

53
24

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

SIMULACIONES HIDRODINAMICAS
BIDIMENSIONALES USANDO
MODELOS DISCRETOS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

FISICO

P R E S E N T A:

MAXIMO PLIEGO DIAZ

FALLA DE ORIGEN

MEXICO, D. F.

1991



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

RESUMEN

En este trabajo desarrollamos de manera de manera formal la teoría de autómatas celulares para modelos hidrodinámicos en dos dimensiones, siguiendo un esquema similar al que se lleva a cabo en la teoría cinética clásica.

Mostramos de manera precisa la manera de obtener las ecuaciones de Euler y de Navier-Stokes, las cuales son las encargadas de describir el comportamiento de los fluidos, para gases de red bidimensionales en los cuales el tiempo y el espacio son discretos, y las cantidades físicas se toman de un conjunto finito de valores también discreto.

Con el fin de mostrar la utilidad que los autómatas celulares tienen para simular el comportamiento de los fluidos, desarrollamos un experimento que consiste en simular el comportamiento temporal de una onda de densidad dentro de una caja de paredes rígidas, para los modelos de gases de red HPP y FHP. Obtenemos algunos de los coeficientes de transporte, como son la velocidad del sonido para HPP y FHP, y la viscosidad cinemática para FHP.

CONTENIDO

CAPITULO 1. INTRODUCCION.	1
CAPITULO 2. TEORIA CINETICA E HIDRODINAMICA CLASICA.	
2.1. Introducción.	6
2.2. Ecuación de Boltzmann.	7
2.3. Invariantes colisionales y ecuaciones de conservación.	10
2.4. El teorema H de Boltzmann.	13
2.5. La solución de Chapman-Enskog en serie.	14
CAPITULO 3. TEORIA CINETICA E HIDRODINAMICA DISCRETA.	
3.1. Introducción.	19
3.2. Presentación de los modelos.	20
3.3. La ecuación microdinámica.	30
3.4. Las relaciones de conservación y las cantidades medias.	34
3.5. Las soluciones en equilibrio.	37
3.5.1. La ecuación de transporte y su solución en equilibrio.	38
3.5.2. Equilibrio a bajas velocidades.	43
3.6. Las ecuaciones macrodinámicas.	46
3.7. Los regímenes macrodinámicos.	53
3.7.1. Propagación del sonido.	55
3.7.2. Sonido amortiguado.	56
3.7.3. El límite incompresible	
(las ecuaciones de Navier-Stokes).	57

CAPITULO 4. SIMULACION NUMERICA DE LA HIDRODINAMICA CON GASES DE
RED EN DOS DIMENSIONES.

4.1. Introducción.	59
4.2. Implementación de modelos de gas de red en una computadora.	60
4.2.1. La implementación de la red y el significado físico de los sitios.	61
4.2.2. La evolución temporal del gas.	64
4.3. Los experimentos.	66
4.3.1. El modelo HPP.	67
4.3.2. El modelo FHP.	71

CAPITULO 5. CONCLUSIONES. 79

APENDICES.

A. Propiedades de simetría de vectores y tensores.	81
B. Cantidades medias.	83
C. El teorema H para gases de red.	85
D. Construcción de la tabla de colisiones.	90

REFERENCIAS. 93

INTRODUCCION.

Cuando los científicos intentan modelar el flujo del agua, del aire o de cualquier fluido, ellos escriben una ecuación diferencial de Navier-Stokes que describa como se comporta una parte pequeña de una corriente continua. Para casos sencillos, tales como el del agua que fluye por un tubo, los cálculos y las conjeturas correctas pueden producir una solución exacta que describa al flujo. Pero para problemas más complejos, tales como el flujo turbulento del aire al rededor del ala de un aeroplano, la solución matemática no pueden ser encontrada con lápiz y papel y es entonces que el análisis numérico por computadora es necesario.

Aún cuando la idea de usar métodos discretos para modelar ecuaciones diferenciales parciales no es nuevo, los últimos años han visto crecer el interés por la simulación del flujo de fluidos mediante la técnica de autómatas celulares, lo cual representa una forma alternativa de aproximar las soluciones a las ecuaciones de la hidrodinámica.

Los autómatas celulares son idealizaciones matemáticas de sistemas físicos en los cuales el espacio y el tiempo son discretos, y las cantidades físicas se toman de un conjunto finito de valores también discretos. Los autómatas celulares fueron introducidos por von Neumann y Ulam, bajo el nombre de "espacios celulares" (von Neumann, 1966), a principios de los cincuenta, como una posible idealización de sistemas biológicos, con el objeto de modelar auto-reproducción biológica. Dichos sistemas se definen por cuatro elementos básicos:

- a) Una red uniforme y regular (usualmente de tamaño infinito), a la cual llamaremos \mathcal{L} . Los vectores de posición r para los sitios de la red, son combinaciones lineales con coeficientes enteros de D vectores base, donde D es la dimensión de la red.
- b) Variables de estado $s(t,r)$ discretas para cada sitio de posición r en la red, i.e., $s(t,r) = 0, 1, \dots, k$, para un autómata celular de k estados.
- c) Una vecindad V_r para cada sitio r de la red, la cual incluye un número finito de sitios de \mathcal{L} , la cual denotamos por

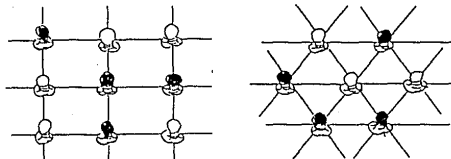
$$V_r = \{s(t, r')\},$$

donde r' es un "vecino" de r , y que algunas veces incluye a r mismo.

- d) Una regla de evolución en el tiempo discreto dada por un operador \mathcal{E} , definido simbólicamente como

$$s(t+1, r) = \mathcal{E} \left\{ \left\{ s(t, r') \right\}_{r' \in V_r} \right\}.$$

Para tener claros los conceptos anteriores, propongamos el siguiente ejemplo que ilustraremos en la figura 1.1. Pensemos en una red de pescar hecha de alambres que conducen corriente eléctrica, la cual representa a \mathcal{L} . La red tiene una regularidad geométrica en sus conexiones y focos en cada uno de sus vértices. La distancia entre vértices adyacentes de la red es uno y cada foco puede estar o no encendido. Pintemos un disco de radio uno alrededor de cada vértice de la red. Si la red es cuadrada, habrá cuatro focos en el perímetro del disco, mientras que si la red es triangular serán seis. Estos focos, junto con el del vértice, constituyen la vecinda V_r . El estado del foco del centro $s(t+1, r)$, depende de los estados de los focos dentro del disco al tiempo t anterior. Estos estados pueden tomar los valores 1 si el foco está encendido y 0 en caso contrario.



(a)

(b)

Fig.1.1. Dos ejemplos de autómatas celulares, construidos para redes de pescar a) cuadrada y b) triangular, con focos en sus vértices. Los focos blancos se encuentran encendidos ($s(t, r)=1$), mientras que los negros no ($s(t, r)=0$).

Para ilustrar la forma que puede tomar la regla de evolución temporal \mathcal{E} , basta con mencionar la forma que dicha regla toma para "el juego de la vida", el cual es un autómata celular de dos dimensiones cuya evolución en el tiempo ha sido estudiada extensivamente [Wolfram, 1983]. La regla de evolución es de carácter local y considera a un sitio como "muerto" (asignándole el valor 0), a menos que 2 o 3 de sus vecinos estén vivos (tienen asignado el valor 1).

Los autómatas celulares son lo suficientemente simples para permitir un análisis matemático detallado, pero lo suficientemente complejos para exhibir una gran variedad de fenómenos complicados. Para los sistemas físicos que contienen muchos elementos discretos que interactúan localmente, la importancia de los fenómenos que en él se desarrollan no radica en su complejidad, sino en el movimiento colectivo que el sistema desarrolla al evolucionar. El comportamiento colectivo de un sistema físico puede ser descrito por una ecuación diferencial, la cual puede ser aproximada por un autómata celular mediante la introducción de diferencias finitas y variables discretas. Como sabemos la dinámica de los fluidos está llena de fenómenos colectivos.

A nivel microscópico los fluidos están compuestos de partículas discretas; pero a gran escala, ellos parecen ser continuos también, por lo que pueden ser descritos por las ecuaciones diferenciales parciales de la hidrodinámica. La forma de estas ecuaciones es en gran medida indiferente a los detalles microscópicos. Los cambios en las leyes de interacción molecular pueden afectar a los coeficientes de transporte, tales como el de la viscosidad, pero no alterar la forma básica de las ecuaciones macroscópicas. Como resultado de ello, el comportamiento general de un fluido puede ser encontrado sin reproducir de manera exacta los detalles microscópicos de la dinámica molecular.

Como sabemos existe tanto un punto de vista continuo como un discreto para representar a un fluido y ambos conducen a las ecuaciones de Navier-Stokes, que son las encargadas de describir el comportamiento colectivo de un fluido disipativo. La imagen intuitiva que tenemos de la dinámica que se desarrolla en un autómata celular, se amolda de manera natural a la representación que ofrece la teoría cinética, (muchos elementos atómicos simples, colisionando con reglas de interacción simples). Como mostramos en la figura 1.2, la representación clásica de la colisión entre dos partículas, puede simularse de manera sencilla mediante autómatas celulares. En la figura 1.2.a. mostramos una colisión binaria de partículas, con velocidades iniciales v_1 , v_2 y finales v_1' , v_2' vista desde el sistema de referencia del laboratorio en la teoría cinética clásica. En las figuras 1.2.b. y 1.2.c., mostramos las posibles simulaciones de dicha colisión binaria de partículas, para dos modelos de autómatas celulares definidos en dos distintas redes, (cuadrada y triangular). En tales simulaciones representamos las velocidades iniciales y finales mediante flechas (\rightarrow).

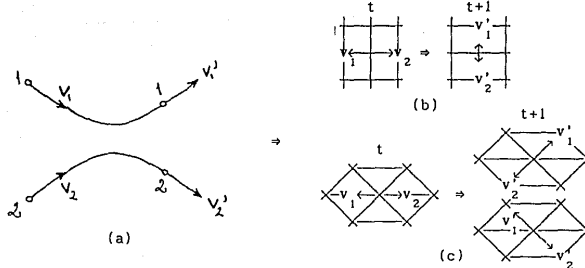


fig.2.2. Representación de una colisión binaria a) en la teoría cinética clásica, en una autómatas celular definido en b) una red cuadrada, c) en una red triangular.

La clase de autómatas celulares utilizados para simular la dinámica de un fluido, son llamados "gases de red". Históricamente los gases de red surgen de los intentos realizados por construir modelos discretos de fluidos.

El interés de la dinámica molecular es el de simular el micromundo "real" con el fin, por ejemplo, de calcular los coeficientes de transporte; para ello uno concentra la masa y la cantidad de movimiento en partículas discretas, que evolucionan en tiempo y espacio continuos, y cuyas velocidades son también continuas, las partículas en un sistema de estas características tienen asociadas interacciones arbitrarias. Una variante a los anteriores sistemas, que ha sido usada para estudiar gases enrarecidos, es aquella que considera a los valores de velocidad como un conjunto finito de valores discretos [Gatignol, 1984]. El tiempo y el espacio siguen siendo continuos en estos sistemas, los cuales evolucionan de manera probabilística obedeciendo las leyes de la teoría cinética clásica. Kadanoff y Swift en un estudio de ondas sonoras realizado en 1971, fueron los primeros en usar un modelo de gas de red para simular un fluido. Pero en dicho modelo el tiempo seguía siendo continuo.

El primer modelo de gas de red totalmente determinístico y para el cual el tiempo, el espacio y el conjunto de velocidades son todos discretos fué el modelo HPP, introducido por Hardy, Pomeau y de Pazzis en 1973. Este modelo, cuya presentación haremos en el capítulo 2 de este trabajo, fué introducido para analizar, de la manera más sencilla posible, cuestiones fundamentales de la mecánica estadística, como son la ergodicidad y la divergencia de los coeficientes de transporte para sistemas definidos en dos dimensiones. Este modelo posee propiedades notables como son, un equilibrio termodinámico local y el surgimiento de una escala de separación; esto es, la escala típica de movimiento colectivo λ es mucho mayor que el camino libre medio l_n : $\lambda \gg l_n$. Sin embargo la macrodinámica a que se da origen tiene una forma que no es física, la cual es poco útil para simular flujos bidimensionales. El

modelo HPP tiene todos los elementos correctos excepto uno: isotropía bajo el grupo de rotaciones de la red. El tensor de flujo de cantidad de movimiento debe reducirse a un escalar por isotropía, pero esto resulta imposible para una red cuadrada. En dos dimensiones la vecindad que tiene los requerimientos mínimos de simetría, y reticula el plano, es una vecindad hexagonal. Debido a las limitantes existentes en la capacidad de cómputo de los años setentas, habrían de pasar muchos años para resolver el problema de aproximar las ecuaciones de Navier-Stokes mediante un autómata celular.

Un nuevo modelo de gas de red, definido en una red triangular y con una vecindad hexagonal, fué introducido por Frisch, Hasslacher y Pomeau en 1986. Este modelo, conocido ahora como FHP, simula de una manera aproximadamente correcta las ecuaciones de Navier-Stokes, y puede ser usado para el diseño de máquinas computadoras masivas en paralelo. Debido a su sencillez y a la importancia de los resultados que produjo, este modelo y en general la técnica de autómatas celulares ha creado gran interés entre los investigadores dedicados a la modelación de fluidos [Doolen, 1989].

El presente trabajo pretende ser una revisión metódica de la técnica de simulación de fluidos por medio de gases de red. Para ello, en el capítulo 2, comenzaremos por obtener las ecuaciones de Euler y Navier-Stokes, que son las encargadas de describir la dinámica de los fluidos, mediante la teoría cinética clásica. Con este fin, describiremos de manera concisa, en ese capítulo, los resultados importantes de dicha teoría. En el capítulo 3, construiremos un simulador discreto de la teoría cinética, obteniendo resultados paralelos a los que se muestran en el primer capítulo. Esta teoría cinética discreta se desarrolla fundamentalmente para los modelos de gases de red de dos dimensiones, HPP y FHP. Los resultados que ahí obtendremos, pueden ser generalizados para modelos con mayor número de velocidades e igual dimensión, ó para aquellos definidos en dimensiones más grandes [Frisch et al., 1987; Wolfgram, 1987]. En el capítulo 4, describimos y analizamos los experimentos que hemos realizado, con la técnica de gases de red. Estos experimentos consistieron en simular una onda de densidad dentro de una caja de paredes rígidas. Para el modelo HPP obtuvimos, con estos experimentos, la velocidad del sonido c_s , mientras que para el modelo FHP, además de dicha velocidad, también obtuvimos el coeficiente de la viscosidad cinemática ν_c para distintas densidades medias. Finalmente en el capítulo 5 analizamos los datos obtenidos con las simulaciones efectuadas en el capítulo 4 y damos las conclusiones generales de este trabajo.

CAPITULO 2

TEORIA CINETICA E HIDRODINAMICA CLASICA

I.INTRODUCCION.

En este capítulo estableceremos de manera general los resultados más importantes de la teoría cinética e hidrodinámica clásicas, que serán utilizados de forma conjunta con el concepto de autómatas celulares en el capítulo siguiente, para obtener la teoría cinética discreta para gases en redes, y a partir de ésta la hidrodinámica.

Los resultados que aquí expondremos son de carácter general y la forma de deducirlos puede encontrarse en casi todos los libros de teoría cinética y mecánica estadística. Para la exposición que aquí haremos nosotros hemos tomado como referencias a los textos de Huang (1963), Chapman (1952), Dorfman (1977), Harris (1971), y Lifshitz (1981). En la sección 2.2 obtenemos la ecuación de Boltzmann haciendo uso de la hipótesis de caos molecular (Stosszahlansatz). En la sección 2.3, estableceremos el concepto de cantidades conservadas para colisiones binarias, y con él obtendremos los invariantes colisionales (masa, cantidad de movimiento y energía), así como las ecuaciones de conservación de estas cantidades en el sistema. En la sección 2.4, mostraremos la tendencia del sistema a estados de equilibrio estable, mediante la utilización de la cantidad H y el teorema que rige su comportamiento. Finalmente, en la sección 2.5 mostraremos las dos primeras soluciones aproximadas a la ecuación de Boltzmann, las ecuaciones de Euler y de Navier-Stokes, utilizando la técnica perturbativa de Chapman-Enskog.

2. ECUACION DE BOLTZMANN.

En la teoría cinética clásica de gases el sistema bajo consideración es un gas diluido de n partículas similares de masa m encerradas en una caja de volumen V . El estado completo del sistema al tiempo t , así como los procesos que en él tienen lugar, quedan determinados por la función de distribución de $f(r, v, t)$. La cantidad $f(r, v, t) \delta^3 r \delta^3 v$, representa el número promedio de partículas del gas que al tiempo t se encuentran en una vecindad de volumen $\delta^3 r = \delta x \delta y \delta z$ alrededor del punto $r = (x, y, z)$ con velocidad en una vecindad de volumen $\delta^3 v = \delta v_x \delta v_y \delta v_z$ alrededor de la velocidad $v = (v_x, v_y, v_z)$. Es importante hacer dos aclaraciones. La primera se refiere a que las vecindades de volumen $\delta^3 r$ y $\delta^3 v$ deben ser pequeñas, la primera respecto al volumen de la caja, y la segunda respecto a la magnitud de alguna velocidad característica del gas como puede ser la velocidad del sonido. Pero estas vecindades deben ser también lo suficientemente grandes con respecto al tamaño de las partículas como para que $f(r, v, t) \delta^3 r \delta^3 v$ sea un número grande respecto a 1, pero pequeño respecto a n . La segunda aclaración se refiere a que la función de distribución se encuentra definida sobre un conjunto representativo de sistemas similares al que estamos estudiando.

Una vez que hemos definido la función de distribución de velocidades, el siguiente paso es encontrar como varía ésta en el tiempo. Para ello consideremos las partículas que al tiempo t tienen velocidades y posiciones en el rango $d^3 r d^3 v$ (de aquí en adelante representaremos por $d^3 r d^3 v$ a las vecindades de volumen $\delta^3 r \delta^3 v$), alrededor de r y v respectivamente. Al tiempo $t = t + \delta t$ estas partículas como resultado de su movimiento bajo la influencia de una fuerza externa $F = F(r)$, tendrán posiciones y velocidades en los rangos $d^3 r' d^3 v'$ alrededor de r' y v' , con $r' = r + v \delta t$ y $v' = v + (F/m) \delta t$. En ausencia de colisiones

$$f(r + v \delta t, v + \frac{F}{m} \delta t, t + \delta t) - f(r, v, t) = 0, \quad (2.1)$$

mientras que en caso contrario

$$f(r + v \delta t, v + \frac{F}{m} \delta t, t + \delta t) - f(r, v, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col} \delta t, \quad (2.2)$$

que define formalmente al término $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col}$ que representa la cantidad en que varía el número de partículas en el elemento de volumen $d^3 r d^3 v$ alrededor de (r, v) entre t y $t + \delta t$ por efecto de las colisiones.

Expandiendo en serie de Taylor a primer orden en δt el término del lado derecho de la ecuación anterior, tendremos que

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}}\right) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{col}} \quad (2.3)$$

Como únicamente estamos interesados en las propiedades de bulto del sistema, podemos escribir al término de colisiones como una ecuación de balance, esto es

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{col}} \delta t = (\Gamma_+ - \Gamma_-) \delta t. \quad (2.4)$$

donde

$\Gamma_- \delta t d^3r d^3v$ es el número de colisiones que ocurren entre t y $t + \delta t$, en las cuales una de las partículas antes de colisionar se encuentra en la vecindad $d^3r d^3v$ alrededor de (\mathbf{r}, \mathbf{v}) , y después no.

$\Gamma_+ \delta t d^3r d^3v$ es el número de colisiones que ocurren entre t y $t + \delta t$, en las cuales una de las partículas después de colisionar se encontrará en la vecindad $d^3r d^3v$ alrededor de (\mathbf{r}, \mathbf{v}) .

Para calcular el término de colisiones es necesario conocer la dinámica de las mismas. Como el gas que estamos considerando es diluido, entonces las únicas colisiones entre partículas del sistema que debemos tomar en cuenta son las binarias.

Para describir las colisiones binarias en el gas, tomaremos como sistema de referencia el del centro de masas de las partículas que intervienen en el choque, por lo que las velocidades importantes en el proceso serán $\mathbf{u} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1'$ y $\mathbf{u}' = \mathbf{v}_2' - \mathbf{v}_1'$, donde $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ son las velocidades de las partículas antes del choque y $\mathbf{v}_1', \mathbf{v}_2'$ las que adquieren después de la colisión. En dicho sistema de referencia el choque de las partículas es simétrico, por lo que podemos fijar nuestra atención en una sola de las partículas. El problema es equivalente a la dispersión de una partícula por un centro de fuerza fijo como se muestra en la figura (2.1). Dado que se conservan tanto la cantidad de movimiento como la energía en las colisiones, $|\mathbf{u}| = |\mathbf{u}'|$. Luego entonces el estado final del proceso quedará especificado por los ángulos de dispersión θ y azimutal ϕ , que denotamos en conjunto por el ángulo sólido Ω , que se muestra en la figura 2.1.

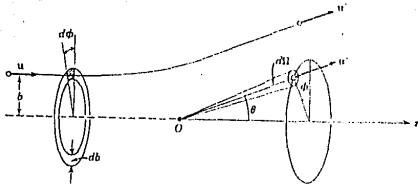


Fig.2.1. Escogiendo el eje polar como paralelo a u , la distancia de dicho eje a las asíntotas de la trayectoria de la partícula que impacta, se le conoce como parámetro de impacto b . Después de interactuar con la partícula blanco, el estado final de dicha partícula se especifica por los dos ángulos de dispersión θ y azimutal ϕ .

Si suponemos además que los efectos de las fuerzas externas que actúan sobre el gas son despreciables, el número esperado de colisiones para un elemento de volumen dado y entre partículas que se encuentran en distintos rangos de velocidad, puede ser calculado estadísticamente. Utilizando además la hipótesis de caos molecular o Stosszahlansatz, podemos demostrar que

$$\Gamma_{-} = \int d^3v_1 \int dc \int db |u| b f(r, v, t) f(r, v_1, t). \quad (2.5)$$

y que

$$\Gamma_{+} = \int d^3v_1 \int dc \int db |u| b f(r, v', t) f(r, v_1, t). \quad (2.6)$$

De estas dos últimas expresiones y la ecuación (2.3) obtenemos que la ecuación de transporte de Boltzmann para un gas monoatómico es

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla_r + \frac{F}{m} \cdot \nabla_v \right) f = \int d^3v_1 \int dc \int db |u| b (f_1' f' - f_1 f), \quad (2.7)$$

donde

$$\begin{aligned} f &= f(r, v, t) & f' &= f(r, v', t) \\ f_1 &= f(r, v_1, t) & f_1' &= f(r, v_1', t) \end{aligned} \quad y$$

En la derivación de la ecuación de Boltzmann está implícita una hipótesis de carácter estadístico, conocida como hipótesis de caos molecular o "Stosszahlansatz". Puesto que en dicha derivación sólo consideramos colisiones entre dos partículas, es necesario

conocer la función de distribución conjunta $f^{[2]}$. La cantidad $f^{[2]}(r, v_1, v_2, t) d^3r d^3v_1 d^3v_2$ representa la probabilidad de encontrar una pareja de partículas en un elemento de volumen d^3r alrededor de r , una de ellas con velocidad en el elemento de volumen d^3v_1 alrededor de v_1 y la otra en el elemento de volumen d^3v_2 alrededor de v_2 . La hipótesis de caos molecular nos dice que

$$f^{[2]}(r, v_1, v_2, t) = f(r, v_1, t) f(r, v_2, t). \quad (2.8)$$

Esta hipótesis indica que el evento de encontrar una partícula con velocidad en una vecindad d^3v_1 alrededor de v_1 y el evento de encontrar otra partícula con velocidad en una vecindad d^3v_2 alrededor de v_2 , para una misma vecindad de volumen d^3r alrededor de r , a un mismo tiempo t , son eventos estadísticamente independientes.

3. INVARIANTES COLISIONALES Y ECUACIONES DE CONSERVACION.

La ecuación de Boltzmann es una ecuación integro-diferencial parcial no lineal, cuya solución general no es conocida. Sin embargo podemos obtener algunas propiedades generales importantes del término de colisiones.

Definimos como invariantes de suma o propiedades moleculares conservadas χ , a aquellas funciones $\chi = \chi(v)$ que dependen de la velocidad de las partículas del gas y que satisfacen la siguiente ecuación de conservación

$$\chi(v) + \chi(v_1) = \chi(v') + \chi(v'_1). \quad (2.9)$$

Para un gas con las características del que hemos descrito en la sección anterior, las variaciones en la función de distribución $f(r, v, t)$ se deben unicamente a colisiones binarias de partículas, por lo que la razón de cambio de una propiedad molecular debida a dichas colisiones es

$$\left(\frac{\partial \chi}{\partial t} \right)_{\text{col}} = \int d^3v \chi(v) \mathfrak{D}(f f_1). \quad (2.10)$$

con

$$\delta(f f_1) = \int d^3 v_1 \int d\epsilon \int d\mathbf{b} \int d\mathbf{u} |b| (f_1' f_1' - f_1 f_1)$$

el cual se conoce como el término de colisión. Si utilizamos argumentos de simetría en las colisiones (invariancia de estas ante rotaciones, reflexiones e inversiones de tiempo), la ecuación (2.10) se puede escribir como

$$\int d^3 v \chi(v) \delta(f f_1) = \frac{1}{4} \int [\chi(v) + \chi(v_1) - \chi(v') - \chi(v'_1)] \delta(f f_1) d^3 v. \quad (2.11)$$

De (2.10) y (2.11) se sigue que para las propiedades moleculares $\chi(v)$ el siguiente teorema, conocido como teorema de conservación, es válido

$$\left[\frac{\partial \chi}{\partial t} \right]_{\text{col}} = \int d^3 v \chi(v) \delta(f f_1) = 0. \quad (2.12)$$

Los procesos de colisión binaria satisfacen leyes de conservación para la masa, la cantidad de movimiento y la energía, por lo que los cinco invariantes de suma serán

$$\chi_1(v) = m,$$

$$\chi_2(v) = m v_1, \quad (2.13)$$

$$\chi_3(v) = \frac{1}{2} m |v-w|^2,$$

donde $i = x, y, z$ y w es la velocidad promedio del sistema, la cual definimos como

$$w = \langle v \rangle = \frac{\int d^3 v v f}{\int d^3 v f} = \frac{1}{n} \int d^3 v v f \quad (2.14)$$

con

$$n = n(r, t) = \int d^3 v f(r, v, t) \quad (2.15)$$

De manera similar, podemos definir el promedio en el espacio de velocidades de una cantidad A cualquiera como

$$\langle A \rangle = \frac{\int d^3v A f}{\int d^3v f} = \frac{1}{n} \int d^3v A f \quad (2.16)$$

Si ahora multiplicamos ambos lados de la ecuación de Boltzmann (2.7) por $\chi(v)$ e integramos sobre v , obtendremos

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n\chi(v) \rangle + \nabla_r \cdot \langle n v \chi(v) \rangle - \frac{n}{m} F \cdot \langle \nabla_v \chi(v) \rangle = 0. \quad (2.17)$$

que es otra forma de escribir el teorema de conservación. Esta ecuación será la que enseguida aplicaremos a cada uno de los invariantes de suma o colisión.

Si la cantidad conservada es la masa, de (2.17) obtenemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho w) = 0, \quad (2.18)$$

en donde ρ es la densidad de masa definida como

$$\rho(r, t) = m \int d^3v f(r, v, t). \quad (2.19)$$

A la ecuación (2.18) se conoce como la ecuación de conservación de masa o continuidad. Apliquemos ahora la ecuación (2.17) a la cantidad $\chi_2(v)$ para obtener

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + w \cdot \nabla \right) w = \frac{\rho}{m} F - \nabla \cdot P, \quad (2.20)$$

conocida como la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento. La P representa al tensor de presiones, el cual se define como

$$P_{ij} = \rho \langle (v_i - w_i)(v_j - w_j) \rangle. \quad (2.21)$$

Finalmente la aplicación de (2.17) se hace sobre la cantidad $\chi_3(v)$ para obtener

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + w \cdot \nabla \right) T = -\frac{2}{3} \nabla \cdot q - \frac{2}{3} P \cdot D. \quad (2.22)$$

en esta ecuación T representa la temperatura cinética para un gas ideal, al ser usado el teorema de equipartición de la energía, mientras que q es conocido como el vector de flujo de calor. A estas cantidades las definimos como

$$T(r, t) = \frac{1}{3}m\langle |v-w|^2 \rangle \quad (2.23a)$$

$$q(r, t) = \frac{1}{2}m\rho\langle (v-w)|v-w|^2 \rangle \quad (2.23b)$$

$$D_{ij} = \frac{1}{2}m \left(\frac{\partial w_i}{\partial x_j} + \frac{\partial w_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.23c)$$

4. EL TEOREMA H DE BOLTZMANN.

Aún cuando no es posible conocer en general la solución a la ecuación de transporte de Boltzmann, podemos mediante el teorema H establecer la tendencia irreversible al equilibrio en un sistema cerrado.

El teorema H establece que si la función $f(r, v, t)$ es una solución de la ecuación de Boltzmann, la función $\mathcal{H}(t)$ definida como

$$\mathcal{H}(t) = \int d^3r \int d^3v f(r, v, t) \ln f(r, v, t) \quad (2.24)$$

será una función no creciente en el tiempo. Esto es

$$\frac{d}{dt} \mathcal{H}(t) \leq 0. \quad (2.25)$$

El enunciado anterior se puede demostrar utilizando los mismos argumentos de simetría en las colisiones empleados en el teorema de conservación, ecuación (2.11), en la ecuación de Boltzmann (2.7), así como el hecho de que la función $f(r, v, t)$ se anula cuando la velocidad tiende a infinito, y también en las paredes del contenedor del sistema.

Puesto que \mathcal{H} está acotado por abajo, pues nosotros hemos impuesto que tanto el número de partículas como la energía cinética total del gas sean finitos [Harris, 1971], dicha cantidad no puede decrecer indefinidamente, sino que tiene un límite correspondiente a un estado del gas para el cual $(\partial \mathcal{H} / \partial t) = 0$, pero esto sólo puede ocurrir cuando

$$f' \cdot f'_1 = f \cdot f_1$$

$$\ln f' + \ln f'_1 = \ln f + \ln f_1 \quad (2.26)$$

De aquí que los logaritmos de la función de distribución son invariantes de suma o colisión, puesto que para colisiones binarias estas cantidades unicamente pueden ser la masa, la cantidad de movimiento y la energía, o una combinación lineal de ellas, tendremos que

$$\ln f = am + b \cdot (mv) + c \frac{1}{2}mv^2, \quad (2.27)$$

donde a, b y c son constantes. Estas cantidades pueden ser determinadas a partir de las condiciones

$$\rho(r, t) = m \int d^3v f(r, v, t)$$

$$w = \langle v \rangle = \frac{1}{n} \int d^3v v f(r, v, t) \quad (2.28)$$

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{3}{2}kT = \frac{1}{n} \int d^3v \frac{1}{2}mv^2 f(r, v, t)$$

En equilibrio termodinámico $w = 0$ y entonces

$$f = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{-m(v-w)^2}{2kT} \right). \quad (2.29)$$

conocida como función de distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann.

5. LA SOLUCION DE CHAPMAN-ENSKOG EN SERIES.

El método de Chapman-Enskog nos permite conocer la función de distribución para situaciones fuera de equilibrio, de manera aproximada y se basa en él desarrollado por Hilbert. Este método de aproximaciones sucesivas puede ser, en principio, extendido a sistemas en los cuales los gradientes de las cantidades termodinámicas son muy grandes. En la aproximación a orden cero la función de distribución que utilizaremos será la de Maxwell-Boltzmann, de donde obtendremos las ecuaciones de Euler. La aproximación a orden uno, nos proporcionará las ecuaciones de

Navier-Stokes. Las aproximaciones a órdenes superiores no serán mencionadas en el presente trabajo. La solución en series a la ecuación de Boltzmann la obtenemos mediante la introducción de un parámetro perturbativo ξ de manera tal, que la frecuencia de colisiones puede ser variada de forma arbitraria sin afectar el número relativo de colisiones de una manera particular. Es por ello que nosotros consideramos el problema hipotético en el cual la ecuación de Boltzmann es

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}}\right) f = \frac{1}{\xi} \mathfrak{D}(ff_1) \quad (2.30)$$

y $1/\xi$ mide la frecuencia de colisiones. Si ξ es pequeña, las colisiones son muy frecuentes y el gas se comportará como un continuo en el cual, el equilibrio local se mantiene en todos lados. Supongamos que la solución se puede expresar en forma de una serie infinita en ξ

$$f = f^{(0)} + \xi f^{(1)} + \xi^2 f^{(2)} + \dots \quad (2.31)$$

Introduciendo esta serie dentro de la ecuación de Boltzmann modificada (2.30), e identificando coeficientes de potencias iguales en ξ , obtendremos el siguiente conjunto de ecuaciones

$$\begin{aligned} 0 &= \mathfrak{D}(f^{(0)} f_1^{(0)}), \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}}\right) f^{(0)} &= \mathfrak{D}(f^{(0)} f_1^{(1)}) + \mathfrak{D}(f^{(1)} f_1^{(0)}), \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}}\right) f^{(1)} &= \mathfrak{D}(f^{(0)} f_1^{(2)}) + \mathfrak{D}(f^{(1)} f_1^{(1)}) + \mathfrak{D}(f^{(2)} f_1^{(0)}), \\ &\vdots \end{aligned} \quad (2.32)$$

La primera de estas expresiones es el conjunto de ecuaciones integrales acopladas consideradas en la discusión de la solución en equilibrio a la ecuación de Boltzmann y el teorema \mathcal{H} . La solución más general a esta ecuación es la función de distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann

$$f^{(0)} = n \left(\frac{m}{2\pi k T}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{-m(\mathbf{v}-\mathbf{w})^2}{2k T}\right) \quad (2.33)$$

Las cantidades n , w y T son funciones arbitrarias del tiempo y del espacio, esto es

$$n = n(\mathbf{r}, t); \quad w = w(\mathbf{r}, t); \quad T = T(\mathbf{r}, t).$$

Para que estas funciones representen valores locales de cantidades físicas, densidad de número de partículas, velocidad promedio y temperatura, y así poder encontrar las soluciones de orden mayor que cero de las ecuaciones (2.32), debe ocurrir que

$$\int f^{[0]} d^3v = n \quad (2.34a)$$

$$\int f^{[0]} mv d^3v = \rho w \quad (2.34b)$$

$$\int f^{[0]} \frac{1}{2}m(v-w)^2 d^3v = \frac{3}{2}n kT \quad (2.34c)$$

y

$$\int f^{[r]} d^3v = 0, \quad r = 1, 2, 3, \dots \quad (2.35)$$

$$\int f^{[r]} mv d^3v = 0, \quad r = 1, 2, 3, \dots \quad (2.36)$$

$$\int f^{[r]} \frac{1}{2}m(v-w)^2 d^3v = 0, \quad r = 1, 2, 3, \dots \quad (2.37)$$

que junto con las ecuaciones (2.32) para $r \geq 1$ especifican de manera única, a la función de distribución de velocidades f que es la solución a la ecuación de Boltzmann (2.30).

Como ya lo hemos mencionado antes, las diferentes soluciones de la ecuación de Boltzmann las obtenemos al expandir a distintos ordenes de aproximación la función de distribución. Supongamos que estamos tratando con un gas que aunque no esté en equilibrio, no se encuentra lejos de él. En particular supongamos que en la "vecindad" de cualquier punto del gas, la función de distribución es localmente una de Maxwell-Boltzmann, y que la densidad, la temperatura y la velocidad promedio varían sólo ligeramente en el espacio y el tiempo. Para dicho gas es natural tratar con la aproximación

$$f(r, v, t) \approx f^{[0]}(r, v, t) \quad (2.38)$$

con $f^{[0]}$ dada por la ecuación (2.33).

Si utilizamos el método de aproximación descrito arriba, se obtienen las siguientes ecuaciones

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (\text{Ecuación de Continuidad}) \quad (2.39)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla P = \frac{\mathbf{F}}{m} \quad (\text{Ecuación de Euler}) \quad (2.40)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) T + \frac{1}{c_v} (\nabla \cdot \mathbf{v}) T = 0 \quad (2.41)$$

donde $c_v = \frac{3}{2}$ es el calor específico y $P = \frac{3}{2} n k T$ es la presión hidrostática. Estas ecuaciones poseen soluciones que describen formas de flujo que persisten indefinidamente en el tiempo, y por lo tanto la hidrodinámica de flujos de gases no-viscosos.

Propongamos ahora que la función de distribución sea de la forma

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f^{[0]}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + g(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (2.42)$$

En donde la función $g(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ es una medida del error cometido al aproximar la función de distribución en equilibrio local $f^{[0]}$ a la función de distribución real f . La fórmula anterior representa la aproximación de primer orden en la expansión de Enskog para f .

A la función g la podemos estimar a partir de $f^{[0]}$, observando que $g \ll f^{[0]}$ y que $f^{[0]}$ depende de \mathbf{r} y t únicamente a través de las funciones ρ , T y \mathbf{v} (definidas en la sección 2.3). Utilizando esta aproximación se obtienen las ecuaciones de la hidrodinámica de primer orden

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.43)$$

(Ecuación de Continuidad)

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) \mathbf{v} = \frac{\mathbf{F}}{m} - \frac{1}{\rho} \left[P - \frac{\mu}{3} \nabla \cdot \mathbf{v} \right] + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} \quad (2.44)$$

(Ecuación de Navier-Stokes)

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) T = -\frac{1}{c_v} (\nabla \cdot \mathbf{v}) T + \frac{\kappa}{\rho c_v} \nabla^2 T \quad (2.45)$$

(Ecuación de Conducción de Calor)

En las ecuaciones anteriores μ es el coeficiente de viscosidad, κ el coeficiente de conductividad térmica, $c_v = 3/2$ el calor específico y P es la presión hidrostática. Estas ecuaciones describen por completo el comportamiento temporal de un fluido, con condiciones iniciales y de frontera específicas, bajo las condiciones de una primera aproximación.

Como mencionamos al principio de este capítulo, todos estos resultados serán ahora obtenidos para gases en redes. Utilizaremos para ello el concepto de autómata celular, y variables de tiempo y espacio discretas.

CAPITULO 3

TEORIA CINETICA

E HIDRODINAMICA DISCRETAS

1. INTRODUCCION.

En el presente capítulo desarrollaremos la teoría cinética discreta para gases en redes utilizando para ello un método paralelo al desarrollado en el capítulo anterior, así como la discretización en el tiempo y el espacio. Esto nos permitirá obtener las diferentes ecuaciones de la dinámica de fluidos, y con ello los distintos regímenes macrodinámicos que pueden ser simulados con modelos de autómatas celulares. Los artículos que hemos utilizado como principales referencias para la realización del presente capítulo fueron los de Frisch et al.(1986, 1987), Hardy et al (1973 y 1976), Hasslacher (1987) y Wolfram (1986).

En la sección 3.2, presentamos dos modelos de autómatas celulares utilizados para simular gases en redes conocidos como HPP y FHP debido a las iniciales de sus autores, Hardy, Pomeau y de Pazzis para el primero, y Frisch, Hasslacher y Pomeau para el segundo. Así mismo describimos la evolución temporal de ambos modelos, y algunas propiedades particulares referentes a las simetrías de las redes en las cuales se les define. Dichas propiedades tienen gran importancia en la transformación de vectores y tensores, las cuales se muestran en el apéndice A. En la sección 3.3, discutimos la ecuación de evolución microdinámica para autómatas celulares. Para esto, hacemos uso del hecho que la evolución global del modelo puede ser descrita en términos de la evolución local en cada uno de los sitios que constituyen a la red. En la sección 3.4, obtenemos las relaciones de conservación de masa y de cantidad de movimiento. También ahí se da cuenta de las cantidades medias obtenidas al utilizar una descripción probabilística en los modelos, las demostraciones de estas relaciones se encuentran en el apéndice B. En la sección 3.5 obtenemos de manera explícita, tanto la ecuación de transporte para gases en redes, la cual es similar a la ecuación de transporte de Boltzmann de la teoría cinética clásica, como su solución en equilibrio. Dicha solución es el equivalente a los estados de Maxwell en la mecánica estadística clásica y son por lo

tanto cruciales para derivar la hidrodinámica. Los dos resultados más importantes son, primero, que la población media para gases en redes está dada por una función de distribución de Fermi-Dirac, y segundo, se determina una ecuación para la población media en equilibrio a bajas velocidades que recupera la invariancia Galileana a nivel microscópico. Para obtener los anteriores resultados se hace uso del Teorema H para gases en redes, cuya demostración se presenta en el apéndice C. En la sección 3.6 encontraremos las ecuaciones macrodinámicas utilizando el formalismo multi-escalas en las relaciones de conservación de la masa y la cantidad de movimiento lineal. Finalmente, una vez que hayamos establecido dichas ecuaciones, en la sección 3.7 obtendremos sus soluciones perturbadas a distintos órdenes, y con ello las ecuaciones de Euler y de Navier-Stokes que son las que nos interesan.

2. PRESENTACION DE LOS MODELOS.

Los modelos de gases en redes que estudiaremos en este capítulo son el HPP [Hardy, Pomeau, y de Pazzis, 1972], y el FHP [Frisch, Hasslacher, y Pomeau, 1986]. Ambos modelos son ejemplos de autómatas celulares definidos en espacios discretos de dos dimensiones. A la dimensión espacial en la que se define un autómata celular se le denota por D , y en nuestro caso $D = 2$. Para el primero de estos modelos la dinámica de las partículas se define sobre una red cuadrada, mientras que para el segundo la red es triangular como se muestra en la figura 3.1.

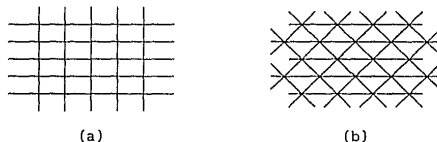


Fig.3.1. Forma de la red para los modelos: a)HPP, y b)FHP.

Para cada uno de los sitios de la red, a los cuales identificamos por un vector de posición discreto r , definimos su vecindad V_r como el conjunto de sitios cercanos $\{r+c_i\}$, con $i = 1, \dots, b$ y los vectores c_i definidos por

$$c_i = (\cos(2\pi(i-1)/b), \sin(2\pi(i-1)/b)), \quad \text{con } b = \begin{cases} 4 & \text{para HPP.} \\ 6 & \text{para FHP.} \end{cases} \quad (3.1)$$

En lo que sigue \hat{b} se define modulo b , incrementándose en sentido opuesto al del movimiento de las manecillas del reloj. Estos vectores se muestran en la figura 3.2.



Fig 3.2. Vectores c_i en los modelos: a) HPP, y b) FHP.

Una vez definido el espacio donde tendrá lugar la dinámica de nuestros modelos, lo que haremos ahora será definirla. Recordemos, de lo dicho en la introducción general, que el tercer elemento que caracteriza a un autómata celular es su configuración por sitio. Dicha configuración se refiere a las posibles velocidades que pueden tener las partículas presentes en un determinado sitio de la red. Haremos la suposición de que tanto la distancia entre sitios adyacentes de la red, como el tiempo que le toma a una partícula desplazarse de su posición original r a alguno de sus vecinos cercanos, son ambos de magnitud uno. De estas suposiciones se desprende que los posibles vectores de velocidad para las partículas en la red son los especificados por la ecuación (3.1). Suponiendo además, que todas aquellas configuraciones por sitio donde existan dos o más partículas con la misma velocidad se excluyen, podemos entonces especificar la configuración de velocidades por sitio a un tiempo determinado, por la función vectorial

$$s(t, r) = (s_1(t, r), \dots, s_b(t, r)), \text{ con } b = \begin{cases} 4 & \text{para HPP} \\ 6 & \text{para FHP} \end{cases} \quad (3.2)$$

y donde

$$s_i(r, t) = \begin{cases} 1 & \text{si hay una partícula con velocidad en la } i\text{-ésima} \\ & \text{dirección.} \\ 0 & \text{si no la hay.} \end{cases}$$

En las ecuaciones (3.1) y (3.2), $i = 1, \dots, b$. Las posibles configuraciones por sitio para los modelos HPP y FHP se muestran en la figura 3.3. Existen un total de 2^b configuraciones ($b = 4$ o 6 dependiendo del modelo), que son las que ilustramos en la figura (3.3).

	(0,0)	(0,1)	(1,0)	(1,1)
(0,0)		→	↑	↖
(0,1)	←	↔	↖	↔
(1,0)	↓	↖	↕	↔
(1,1)	↖	↔	↔	↔

(a)

	000	001	010	011	100	101	110	111
0		→	↗	↘	↖	↗	↖↗	↖↘
0								
0	←	↔	↖↗	↔	↖↗	↔	↖↗	↔↖↗
1								
0	↖	↖↗	↖↗↘	↖↗↘	↖↗↘	↖↗↘	↖↗↘	↖↗↘
1								
1	↖↗	↖↗↘	↖↗↘↙	↖↗↘↙	↖↗↘↙	↖↗↘↙	↖↗↘↙	↖↗↘↙
0								
1	↘	↘↙	↘↙↖	↘↙↖	↘↙↖	↘↙↖	↘↙↖	↘↙↖
0								
1	↖↗	↖↗↘	↖↗↘↙	↖↗↘↙	↖↗↘↙	↖↗↘↙	↖↗↘↙	↖↗↘↙
1								
1	↖↗↘	↖↗↘↙	↖↗↘↙↖	↖↗↘↙↖	↖↗↘↙↖	↖↗↘↙↖	↖↗↘↙↖	↖↗↘↙↖
0								
1	↖↗↘↙	↖↗↘↙↖	↖↗↘↙↖↗	↖↗↘↙↖↗	↖↗↘↙↖↗	↖↗↘↙↖↗	↖↗↘↙↖↗	↖↗↘↙↖↗

(b)

Fig. 3.3. Posibles configuraciones de velocidades por sitio de la red para: a)HPP, b)FHP. La configuración $s(t,r)$ de cada uno de los sitios de la red, tiene b componentes que toman los valores 0 o 1. Dicha configuración pueden ponerse como una combinación de $b/2$ bit derechos y $b/2$ bit izquierdos ($b = 4$ en HPP y 6 en FHP), que es el código que aparece en los margenes de cada figura. De esta manera, por ejemplo el estado $s(t,r) = \leftrightarrow$, es (01,01) en HPP y (001,001) en FHP, donde para construirlos hemos tomado primero a los bits que aparecen en el margen izquierdo y luego les hemos pegado aquellos que aparecen en el margen superior. Las configuraciones sombreadas corresponden a las que llamamos "colisiones interesantes" y que definiremos más adelante.

El hecho de que en cada sitio y en cada una de las direcciones de la red no debe haber más de una partícula, se conoce como *principio de exclusión* en analogía con la mecánica cuántica. Este principio es de trascendental importancia para los resultados que obtendremos en las siguientes secciones. Suponemos también que la masa de las partículas presentes en la red es de magnitud uno, entonces la cantidad de movimiento de las mismas se especifica por los vectores c_i dados en la ecuación (3.1). Además todas las partículas tendrán igual energía cinética y cero energía potencial.

El cuarto y último elemento que caracteriza a un autómata celular es una regla de evolución en el tiempo. Con el fin de describir esta regla, definiremos ahora lo que llamaremos la configuración de un gas en una red, que denotaremos por la función $\underline{S}(t)$, y algunas de sus propiedades. Ésta es el conjunto de las posibles posiciones y velocidades que tienen las partículas en la red \mathcal{L} al tiempo t . Es decir,

$$\underline{S}(t) = \{s_i(t, r), i = 1, \dots, b, y r \in \mathcal{L}\}. \quad (3.3)$$

Como es fácil ver, existen un gran número de posibles configuraciones de la red, para un tiempo t dado. Definimos al espacio de configuraciones Γ , como el conjunto de todas ellas. Ya que en un sitio hay 2^b posibles configuraciones, para una red con m sitios hay $m \times 2^b$, que es la cardinalidad de Γ . También podemos notar que dar la configuración de la red, a un tiempo t determinado, es exactamente lo mismo que dar los vectores $s(t, r)$ para cada uno de los sitios.

Si consideramos un conjunto representativo de posibles configuraciones de velocidades $\underline{S}(t)$, en el espacio Γ , podemos asociar a cada configuración

$$\underline{S}(t) = \{s_1(t), \dots, s_m(t), m = \text{número de sitios en } \mathcal{L}\},$$

una probabilidad $P(t, \underline{S}(t)) \geq 0$, la cual cumple que

$$\sum_{\underline{S} \in \Gamma} P(t, \underline{S}(t)) = 1. \quad (3.4)$$

La evolución en el tiempo de un gas en una red, se lleva a cabo mediante la aplicación del operador de evolución $\hat{\mathcal{E}}$ a una configuración inicial $\underline{S}(t)$, que se transforma como

$$\underline{S}(t+1) = \hat{\mathcal{E}} \underline{S}(t). \quad (3.5)$$

donde $\underline{s}(t+1) = (s_1(t+1), \dots, s_m(t+1))$, $m =$ número de sitios en \mathcal{L}).

El operador de evolución $\hat{\mathcal{E}}$ se puede descomponer en operadores locales \mathcal{E} de manera que

$$s(t+1, r) = \mathcal{E} \left((s(t, r'))_{r' \in V_r} \right) \quad (3.6)$$

Lo anterior quiere decir que el estado de las partículas del sitio r al tiempo $t+1$, es el resultado de aplicar el operador \mathcal{E} a los sitios de la vecindad de r al tiempo t . La nueva configuración de la red $\underline{s}(t+1)$ se obtiene al aplicar simultáneamente a cada uno de los sitios de la red el operador de evolución temporal.

Es en el operador \mathcal{E} donde introducimos los elementos físicos importantes para nuestros modelos. En el caso de los modelos que aquí estamos tratando, impondremos la condición de que este operador conserve dos cantidades dinámicas, que son la masa y la cantidad de movimiento.

El operador de evolución temporal \mathcal{E} puede estar constituido de otro tipo de operadores más específicos. En nuestro caso, y debido a que estamos tratando con autómatas celulares (el estado de un sitio r al tiempo t , depende de los estados de sus vecinos a un tiempo $t-1$), proponemos que

$$\mathcal{E} = S \circ C \quad (3.7)$$

donde C es un operador de colisiones que conserva la masa y la cantidad de movimiento, y S es el operador de traslación que se encarga de simular el movimiento de las partículas después de la colisión. La elección de este orden en particular es sólo por conveniencia, ya que después de un gran número de iteraciones llega a ser irrelevante qué paso ha sido el primero.

El operador C consiste en aplicar simultáneamente, a cada uno de los sitios de la red, reglas de colisión que transformen sus estados iniciales, denotados por los vectores $s(t, r) = (s_i(t, r), i = 1, \dots, b, r \in \mathcal{L})$, en estados finales $s'(t+1, r) = (s'_i(t+1, r), i = 1, \dots, b, r \in \mathcal{L})$. Estos estados que podemos llamar de "entrada" y de "salida" no han sido trasladados, de tal manera que sólo se toma en cuenta la configuración de ese sitio en especial y de ningún otro. Las reglas de colisión se eligen de manera que el número de partículas (masa) y su cantidad de movimiento se conserve en cada uno de los sitios (la conservación de la energía es una consecuencia de la conservación de la masa). Las anteriores restricciones a las reglas de colisión por sitio, provocan la existencia de dos tipos de colisiones que llamaremos "interesantes" y "no interesantes". Las primeras son aquellas que transforman la configuración de un sitio en una distinta; mientras que las segundas dejan invariante la configuración de ese sitio

antes y después de efectuada la colisión.

Para el modelo HPP las colisiones "interesantes" son únicamente aquellas que se efectúan entre pares de partículas que tienen un encuentro de frente. Estas se muestran en la figura 3.4. Todas las demás configuraciones de velocidades por sitio de la red son no-interesantes y pueden ser vistas en la figura 3.3.

Como podemos ver en esta figura 3.4, las colisiones interesantes para HPP lo que hacen es rotar en 90° las posibles direcciones en las velocidades de entrada. Como para un estado de "entrada" sólo existe un estado de "salida", este modelo será determinista con respecto al operador de colisiones.

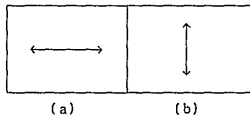


Fig.3.4. Colisiones "interesantes" para HPP.

En el caso del modelo FHP que nosotros utilizamos, el número de colisiones "interesantes" que se obtienen bajo las restricciones de conservación masa y cantidad de movimiento por sitio, es mucho mayor que en el del modelo anterior y pueden verse en la figura 3.5. Este modelo es conocido en la literatura como FHP saturado.

Observando la figura 3.5, podemos ver que existen configuraciones $s(t,r)$, que al llevarse a cabo la colisión tienen más de una posible configuración de salida $s'(t+1,r)$. Esto nos obliga a introducir en el proceso de colisión del modelo FHP, una probabilidad de transición $A(s \rightarrow s') \geq 0$, de una configuración dada s a alguna de las posibles s' , la cual está normalizada ($\sum_{s'} A(s \rightarrow s') = 1$). Esto hace que el operador C sea no-determinístico. Para nuestros modelos $A(s \rightarrow s')$ dependerá únicamente de los estados s , s' y no del sitio en particular donde se lleve a cabo el proceso de colisión. Además de estas características, $A(s \rightarrow s')$ cumple con las siguientes propiedades:

a) Leyes de conservación: la única colección de b números reales a_i tales que

$$\sum_i (s'_i - s_i) A(s \rightarrow s') a_i = 0, \quad \forall s, s', \quad (3.8)$$

son combinaciones lineales de 1 y de c_{11}, \dots, c_{1D} , i.e. a_i está relacionada con la conservación de masa y cantidad de movimiento.

b) Invariancia bajo todas las isometrías que preserven el conjunto

de velocidades.

c) Balance semi-detallado

$$\sum_s \Lambda(s \rightarrow s') = 1, \quad \forall s' \quad (3.9)$$

La suposición (b) tiene consecuencias importantes sobre las propiedades de transformación de vectores y tensores, las cuales explicamos en el apéndice A.



















n	colisiones "interesantes"	
2		
3		
3		
3		
3		
3		
3		
3		
4		

Fig.3.5. Colisiones "interesantes" para 2, 3 y 4 partículas en el modelo FHP. La primera columna muestra el número de partículas presentes en la configuración, y la segunda nos muestra explícitamente las configuraciones de velocidades por sitio que llamamos "colisiones interesantes". Las configuraciones en cada renglón se transforman entre sí al llevarse a cabo una colisión.

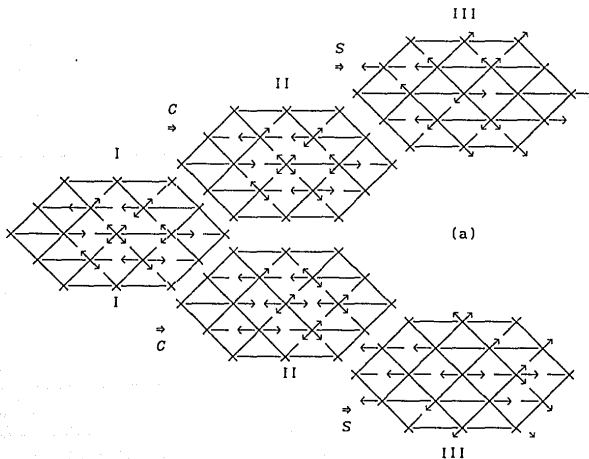
Los vectores $s'(t+1,r)$ son estados intermedios en el proceso de evolución en el tiempo de los gases reticulares. Esto se debe a que las partículas presentes en las configuraciones $s'(t+1,r)$ de los sitios de la red deben ser todavía trasladadas. La traslación

de las partículas se efectúa de manera que

$$s_i(t+1, r+c_i) = s_i'(t+1, r). \quad (3.10)$$

Esta última ecuación nos dice de que manera se mueven las partículas presentes en un sitio, dependiendo de la velocidad que tengan después de la colisión. En la figura 3.6 podemos ver la manera en que se efectúa la evolución temporal, para algún sitio de la red, al aplicar los operadores de colisión C y traslación S a sus vecinos cercanos.

Como podemos ver de las figuras (3.6b) y (3.7), para los gases en redes de carácter determinista, como es el caso del modelo HPP, los operadores C y S no conmutan. La reversibilidad para las reglas de evolución de estos modelos se pueden lograr, mediante la definición de estados del autómata a tiempos semi-enteros, con las partículas localizadas a la mitad de las líneas que conectan sitios vecinos; la evolución temporal del gas comprenderá entonces los siguientes pasos, una semi-propagación seguida de una colisión, que es seguida de una semi-propagación nuevamente [Hardy et al., 1976]. En el caso de modelos no-determinísticos, como lo es FHP, los operadores S y C sí conmutan; esto se debe al carácter probabilístico en las reglas de colisión, las que permiten, como podemos ver en la figura (3.6a), que la configuración inicial de velocidades, sea una de las posibles configuraciones de "salida" al llevarse a cabo la colisión.



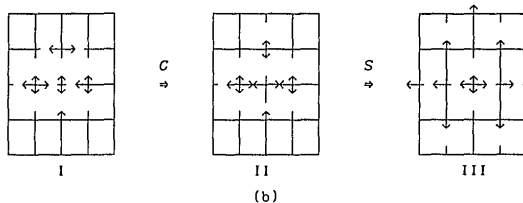


Fig.3.6. Evolución temporal de las partículas en un sitio de la red para los modelos: a) FHP, y b) HPP. En I damos las configuraciones tanto del sitio r como de sus vecinos a un tiempo t . En II efectuamos la colisión en todos los sitios. Finalmente en III, trasladamos las partículas para así poder obtener el estado final de r al tiempo $t+1$. Este mismo procedimiento se aplica simultáneamente a todos y cada uno de los sitios en la red. En el caso del modelo FHP hemos puesto dos de las posibles evoluciones de la configuración inicial que obtendremos después de la colisión.

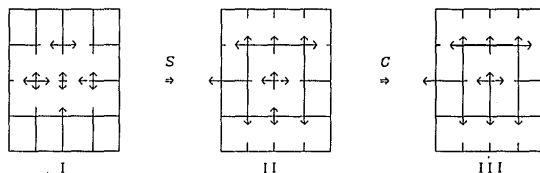


Fig.3.7. Evolución temporal en el modelo HPP suponiendo que, se efectúa primero una traslación S y después una colisión C entre las partículas.

Mencionaremos finalmente que la dinámica de los modelos HPP y FHP, es invariante bajo todas las transformaciones discretas que preserven la simetría de la red sobre la cual se les definió (cuadrada en el caso de HPP y triangular en el de FHP). Más aún, su dinámica permanece invariante bajo el intercambio de partículas por hoyos (unos por ceros), lo cual definimos como la dualidad.

Por último, y sólo por completez, mencionaremos que existen dos variantes al modelo FHP que nosotros hemos mencionado. El primero de ellos conocido como FHP-I es muy parecido al que hemos tratado aquí, excepto que en él sólo se consideran colisiones entre dos y tres partículas. La importancia se debe a que fué el primer modelo de un gas en una red no-determinístico con el cual se obtuvieron las ecuaciones de la hidrodinámica. El segundo es una variante de siete bits del modelo de seis velocidades, llamado FHP-II. Este modelo incluye una "partícula en reposo" de velocidad cero, lo que acarrea como resultado nuevas reglas de colisión para

los choques entre partículas al considerar la conservación de la masa, la cantidad de movimiento y, de manera independiente, de la energía. Las posibles configuraciones por sitio para este modelo se muestran en la figura 3.8. En dicha figura la bolita (•) representa a la partícula en reposo.

n	configuraciones por sitio	ncc
0		1
1		1
1		6
2		1
2		6
2		6
3		1
3		6
3		6
3		6

Fig. 3.8. Lista de configuraciones para el modelo de 7 velocidades FHP. La columna 1 nos dice cuál es el número de partículas y la última el número de colisiones equivalentes que pueden ser obtenidas mediante rotaciones sucesivas de $\pi/3$. Las configuraciones con cuatro o más partículas se obtienen mediante la dualidad, al remplazar hoyos por partículas y partículas por hoyos.

3. LA ECUACION MICRODINAMICA.

De manera similar a lo realizado en la teoría cinética clásica, lo que nos interesa es poder describir la evolución temporal de aquellos modelos mencionados en la sección anterior, a partir de una ecuación que toma en cuenta la dinámica microscópica de los mismos, y que discutiremos a continuación.

Lo que esencialmente queremos saber es cómo dada la configuración de la red al tiempo t , ésta evolucionará al tiempo $t+1$. Como mencionamos en la sección anterior, la evolución temporal de toda la red se realiza mediante dos reglas de carácter local, una colisión seguida de una traslación.

Con el fin de iniciar con la descripción del caso más sencillo, consideraremos primeramente la evolución dinámica de los modelos en ausencia de colisiones, esto es $\mathcal{E} = S$ únicamente. Lo que podemos observar, es que algunas de las partículas presentes en los sitios r' , (pertenecientes a la vecindad V_r), al tiempo t , se moverán al sitio de posición r al tiempo $t+1$ según sea su velocidad. Esto es

$$s_i(t+1, r) = s_j(t, r-c_j) \quad (3.11)$$

Cuando tomamos en cuenta las colisiones, obtenemos que la ecuación microdinámica (3.11) se modifica ahora de la siguiente forma

$$s_i(t+1, r) = s_i(t, r-c_i) + \Delta_1(s^i), \quad (3.12)$$

donde definimos a

$$\Delta_1(s^i) \equiv \Delta_1 \left\{ (s(t, r'))_{r' \in V_r} \right\}. \quad (3.13)$$

La "función de colisión" $\Delta_1(s)$, la cual puede tomar los valores 1 , -1 y 0 , describe los cambios en $s_i(t, r)$ debidos a las interacciones que tienen las partículas en el mismo sitio. Como vimos en la sección 3.2, el proceso de colisión transforma un estado de "entrada"

$$s(t, r) = (s_i(t, r) = 0 \text{ ó } 1, i = 1, \dots, b),$$

en uno de "salida"

$$s'(t+1, r) = (s'_i(t+1, r) = 0 \text{ ó } 1, i = 1, \dots, b).$$

La realización de dicha transformación tiene asociada una probabilidad de transición $A(s \rightarrow s')$. Si $s(t, r)$ y $s'(t+1, r)$ no tienen el mismo número de partículas y la misma cantidad de movimiento $A(s \rightarrow s') = 0$.

Lo que ahora quisiéramos es poder reescribir la ecuación (3.12) con el término de colisiones expresado de manera explícita. Para ello utilizaremos la misma idea de la teoría cinética clásica, y escribiremos a $\Delta_1(s')$ en forma de una ecuación de balance. Dado un sitio de coordenadas r al tiempo t , calcularemos la ganancia y la pérdida de partículas a lo largo de una dirección fija de velocidad debidas exclusivamente a las colisiones.

Comenzaremos analizando el caso del modelo HPP. Como podemos ver en la figura (3.4) la única manera de cambiar la configuración de velocidades en un sitio de la red $s(t,r)$, es mediante la colisión de frente entre dos partículas. Identifiquemos por el subíndice i ($=1, 2, 3, 4$), a las posibles velocidades de las partículas. Entonces, obtendremos una ganancia en la dirección i , si en el estado de "entrada" $s(t,r)$, las direcciones $i+1$, $i+3$ están ocupadas, e i , $i+2$ vacías y obtendremos una pérdida en la dirección i , si las direcciones i , $i+2$ son las ocupadas e $i+1$, $i+3$ las vacías. De aquí que para HPP

$$\Delta_1(s) = s_{i+1}s_{i+3}(1-s_i)(1-s_{i+2}) - s_{i+2}(1-s_{i+1})(1-s_{i+3}) \quad (3.14)$$

En el caso del modelo FHP, el número de colisiones posibles, que cambian la configuración de velocidades en un sitio, es mayor. Como mostramos en la figura (3.5), además de las colisiones de frente entre dos partículas, existen las de tres y cuatro partículas. Es por ello que, utilizando un argumento similar al anterior y con i definido módulo seis, el término de colisiones será ahora

$$\begin{aligned} \Delta_1(s) = & c_{1r} s_{i+1}s_{i+4}(1-s_i)(1-s_{i+2})(1-s_{i+3})(1-s_{i+5}) \\ & + (1-c_{1r}) s_{i+2}s_{i+5}(1-s_i)(1-s_{i+1})(1-s_{i+3})(1-s_{i+4}) \\ & - s_{i+3}(1-s_{i+1})(1-s_{i+2})(1-s_{i+4})(1-s_{i+5}) \\ & + s_{i+1}s_{i+3}s_{i+5}(1-s_i)(1-s_{i+2})(1-s_{i+4}) \\ & - s_{i+2}s_{i+4}(1-s_i)(1-s_{i+3})(1-s_{i+5}) \\ & + s_{i+1}s_{i+2}s_{i+5}(1-s_i)(1-s_{i+3})(1-s_{i+4}) \\ & + s_{i+2}s_{i+4}s_{i+5}(1-s_i)(1-s_{i+1})(1-s_{i+3}) \\ & + s_{i+1}^2s_{i+2}^2s_{i+4}(1-s_i)(1-s_{i+3})(1-s_{i+5}) \\ & + s_{i+1}s_{i+4}s_{i+5}(1-s_i)(1-s_{i+2})(1-s_{i+3}) \\ & - s_{i+1}s_{i+3}(1-s_{i+2})(1-s_{i+4})(1-s_{i+5}) \\ & - s_{i+3}s_{i+4}(1-s_{i+1})(1-s_{i+2})(1-s_{i+5}) \\ & - s_{i+2}s_{i+3}(1-s_{i+1})(1-s_{i+4})(1-s_{i+5}) \\ & - s_{i+1}^2s_{i+3}(1-s_{i+2})(1-s_{i+4})(1-s_{i+5}) \\ & + c_{1r} s_{i+1}s_{i+2}s_{i+4}s_{i+5}(1-s_i)(1-s_{i+3}) \\ & - (1-c_{1r}) s_{i+1}s_{i+3}s_{i+4}(1-s_{i+2})(1-s_{i+5}) \\ & + s_{i+2}^2s_{i+3}s_{i+5}(1-s_{i+1})(1-s_{i+4}) \end{aligned} \quad (3.15)$$

En la anterior ecuación c_{tr} representa una variable Booleana, dependiente del tiempo y del sitio de evaluación, que toma el valor uno cuando la configuración de velocidades se modifica, debido a una colisión, y cero si permanece igual. Observemos en la figura (3.5) que para las colisiones entre dos y cuatro partículas existen dos posibles salidas a las que asignamos igual probabilidad. Suponemos además independencia entre las variables c_{tr} .

Podemos generalizar la idea anterior de cuantificar las ganancias y las pérdidas de partículas para un sitio dado y encontrar una única expresión para el término de colisiones de los modelos que estamos usando y de algunos otros con todas sus velocidades de igual magnitud. Para ello observemos que, del proceso de traslación, la i -ésima componente del estado final $s_i(t+1, r)$ se obtiene de trasladar la misma componente de velocidad en el estado intermedio $s'_i(t, r-c_i)$, paso III de la figura 3.6. Como podemos ver en la figura 3.4, la componente s'_i se encuentra en varias configuraciones s' por lo que es conveniente sumar sobre las 2^b posibles configuraciones intermedias por sitio s' . Por otro lado, los estados s' en los sitios de la red se obtienen de la aplicación del operador de colisiones C a un estado inicial $s(t, r-c_i)$, como se muestra en el paso II de la figura 3.6. Como también aquí existen varias configuraciones s que se transforman en la misma s' , sumaremos sobre todos los 2^b estados iniciales s . Por otra parte, la transición de estados que tiene lugar durante la colisión la efectuaremos, para cada tiempo, sitio y par de estados (s, s') , mediante la introducción de la variable Booleana $c_{ss'}$, a la que llamamos "una realización", (por brevedad en la notación hemos omitido la dependencia en tiempo y espacio de las variables s y s'). Sobre la variable $c_{ss'}$, impondremos las condiciones de que, dado un estado inicial s ésta será uno para un único estado s' , que llamaremos su evolución, y cero para los restantes 2^b-1 estados de configuración por sitio. Como es fácil de ver dicha variable cumple que

$$\langle c_{ss'} \rangle = A(s \rightarrow s'), \quad \forall s, s'. \quad (3.16)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ indica promedio sobre un conjunto representativo, y una condición de normalización especificada por

$$\sum_s c_{ss'} = 1, \quad \forall s'. \quad (3.17)$$

Dado que el sitio $r-c_i$ tiene al tiempo t un estado $s(t, r-c_i)$

bien determinado, los $2^b - 1$ posibles estados de configuración restantes para ese sitio, deben ser descartados. Para efectuar esta discriminación introduciremos para el sitio r una delta de Kronecker δ_{s_s, s_p} . En dicha delta, s_p representa los 2^b posibles estados de configuración por sitio de la red, mientras que s es el estado que tiene el sitio $r - c_l$ al tiempo t , (hemos elegido el subíndice p sólo para significar que la configuración de velocidades s del sitio es probable). Utilizando los elementos descritos arriba, podemos reescribir la ecuación microdinámica (3.12), como

$$s_l(t+1, r) = \sum_{s'} s'_l(t, r - c_l) c_{ss'} \delta_{ss_p} \quad (3.18)$$

A la delta de Kronecker δ_{s_s, s_p} la podemos escribir en términos de las componentes s_j y s_{p_j} , como

$$\delta_{s_s, s_p} = \prod_j s_j^{s_j} (1 - s_j)^{(1 - s_j)_{p_j}} \quad (3.19)$$

De aquí que la ecuación (3.18) será entonces

$$s_l(t+1, r) = \sum_{s, s'} s'_l(t, r - c_l) c_{ss'} \prod_j s_j^{s_j} (1 - s_j)^{(1 - s_j)_{p_j}} \quad (3.20)$$

Observemos que para la ecuación (3.20) la suma sobre s selecciona al estado $s = s_p$ que es el estado de "entrada", mientras que la suma sobre s' junto con el factor $c_{ss'}$ seleccionan al estado de "salida". El factor s'_l asegura la presencia de una partícula con velocidad en la l -ésima dirección después de llevarse a cabo la colisión.

Si utilizamos la identidad

$$s_l(t, r - c_l) = \sum_s s_l(t, r - c_l) \prod_j s_j^{s_j} (1 - s_j)^{(1 - s_j)_{p_j}} \quad (3.21)$$

junto con la ecuación (3.20), obtendremos que

$$\Delta_1(s') = \sum_{ss'} (s'_1 - s_1) c_{ss'} \prod_j s_j^{s_{pj}} (1-s_j)^{1-s_{pj}}, \quad (3.22)$$

que es la forma general, que buscábamos, para el término de colisiones. Aún cuando esta ecuación junto con la (3.18) se establecen para modelos de gases en redes no-determinísticos, estas relaciones pueden ser utilizadas para el caso de HPP; pues para este modelo la probabilidad $A(s \rightarrow s')$ sólo toma los valores 1 ó 0, y esto, en nada afecta el proceso de deducción de dichas igualdades.

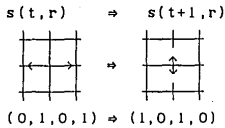
4. LAS RELACIONES DE CONSERVACION Y LAS CANTIDADES MEDIAS.

El objetivo de esta sección es el de deducir las relaciones de conservación de masa y de cantidad de movimiento. La conservación de las cantidades anteriores para cada sitio de la red en el proceso de colisión, puede ser expresado por las siguientes ecuaciones válidas para la función de colisión $\Delta_1(s'(t,r))$

$$\sum_l \Delta_1(s'(t,r)) = 0, \quad \forall s \in \{0,1\}^b \quad (3.23)$$

$$\sum_l c_l \Delta_1(s'(t,r)) = 0, \quad \forall s \in \{0,1\}^b \quad (3.24)$$

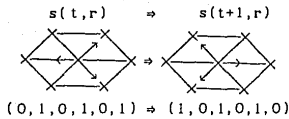
donde $\{0,1\}^b$ denota el conjunto de todas las posibles palabras de b -bits. La validez de las ecuaciones anteriores se deduce fácilmente de la definición de la función $\Delta_1(s')$. En primer lugar esta función es siempre cero para las configuraciones $s(t,r)$ que no cambian, al aplicarseles el operador de colisiones. Para aquellas configuraciones de los sitios de la red que sí varían con la aplicación del operador de colisiones, figuras 3.4 y 3.5, la función $\Delta_1(s')$ nos dice que en caso de existir una partícula con velocidad c_k en el sitio r al tiempo t , ésta cambiará su velocidad a c_l , con $k \neq l$, al llevarse a cabo la colisión. Este hecho puede verse como una pérdida para la dirección k , pero como una ganancia en l para la nueva configuración $s'(t+1,r)$. Al aplicar una interpretación así a todas las posibles velocidades c_l , de las partículas a un determinado sitio de la red y sumar sobre todas ellas, las "ganancias" y las "pérdidas" de partículas para ese sitio de la red se compensan. Esta situación se ejemplifica en la figura 3.9.



(Ia)

i	c_i	$\Delta_i(s)$	$c_i \Delta_i(s)$
1	(1, 0)	-1	(-1, 0)
2	(0, 1)	1	(0, 1)
3	(-1, 0)	-1	(1, 0)
4	(0, -1)	1	(0, -1)
Σ_1		0	(0, 0)

(Ib)



(IIa)

i	c_i	$\Delta_i(s)$	$c_i \Delta_i(s)$
1	(1, 0)	1	(1, 0)
2	$(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$	-1	$(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$
3	$(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$	1	$(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$
4	(-1, 0)	-1	(1, 0)
5	$(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$	1	$(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$
6	$(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$	-1	$(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$
Σ_1		0	(0, 0)

(IIb)

Fig. 3.9. Evaluación de las funciones (3.22) y (3.23). En (Ia) mostramos una posible colisión interesante para HPP y en (Ib) evaluamos las funciones con una tabla. En (IIa) y (IIb) hacemos lo mismo para FHP. Hemos usado las fórmulas (3.14) y (3.15) para evaluar a $\Delta_i(s'(t, r))$.

Aplicando estas relaciones de conservación a las ecuaciones de evolución

$$s_i(t+1, r+c_i) = s_i(t, r) + \Delta_i(s'(t, r))$$

y

$$c_i s_i(t+1, r+c_i) = c_i s_i(t, r) + c_i \Delta_i(s'(t, r)),$$

obtendremos que

$$\sum_i s_i(t+1, r+c_i) = \sum_i s_i(t, r) \quad (3.25)$$

$$\sum_i c_i s_i(t+1, r+c_i) = \sum_i c_i s_i(t, r). \quad (3.26)$$

Estas son las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento, para los sitios de la red. Lo que estas ecuaciones nos dicen, es que la masa y la cantidad de movimiento que existían en el sitio r al tiempo t , han sido trasladadas a sus vecinos cercanos al tiempo $t+1$, y viceversa. Esto lo podemos ver fácilmente si analizamos con cuidado la figura 3.6

Si utilizamos una descripción en términos de las posibles configuraciones $\underline{S}(t)$ de la red, podemos deducir una expresión para las cantidades medias. Esta se obtiene al promediar una cantidad "observable" $q(s(t, r))$ (la cual depende de la configuración que tiene la red a un tiempo determinado), sobre un conjunto representativo de configuraciones $\underline{S}(t)$ del modelo, esto es

$$\langle q(s(t, r)) \rangle = \sum_{\underline{S} \in \Gamma} q(s(t, r)) P(t, \underline{S}(t)). \quad (3.27)$$

De esta ecuación podemos deducir lo que llamaremos la *función de distribución*. A dicha cantidad la definimos como la probabilidad de encontrar una partícula con una velocidad en la dirección i , en el punto de coordenadas (t, r) , esto es

$$f_i(t, r) = \sum_{\underline{S} \in \Gamma} s_i(t, r) P(t, \underline{S}(t)) = \langle s_i(t, r) \rangle. \quad (3.28)$$

De la población media podemos obtener el *número promedio de partículas por sitio* ρ y el *flujo de masa* j (cantidad de movimiento medio), como

$$\rho(t, r) = \sum_i f_i(t, r) \quad (3.29a)$$

y

$$j(t, r) = \sum_i c_i f_i(t, r). \quad (3.29b)$$

Estas son cantidades medias por sitio, de tal manera que $0 \leq f_i \leq 1$ y $0 \leq \rho \leq b$. La densidad se define como $d = \rho/b$. A través del flujo de masa, definimos a la *velocidad media* u como

$$j(t,r) = \rho(t,r) u(t,r). \quad (3.30)$$

Recordemos que la dinámica de estos modelos permanece invariante ante la dualidad, en cuyo caso si intercambiamos partículas por hoyos, ρ_p cambia a $\rho_h = b - \rho_p$, d_p cambia a $d_h = (b - \rho_p)/b = 1 - d_p$, j_p a $j_h = -j_p$, y finalmente u_p a la "velocidad media de hoyos" $u_h = -u_p \cdot d_p / (1 - d_p)$, pues $j_h = \rho_h \cdot u_h$.

Para finalizar podemos observar que si tomamos el promedio de las ecuaciones (3.25) y (3.26) obtenemos las relaciones de conservación para las *poblaciones medias*

$$\sum_i f_i(t+1, r+c_i) = \sum_i f_i(t, r), \quad (3.31)$$

$$\sum_i c_i f_i(t+1, r+c_i) = \sum_i c_i f_i(t, r), \quad (3.32)$$

que es lo que buscábamos. La forma explícita de deducir estas ecuaciones puede verse en el apéndice B.

5. LAS SOLUCIONES EN EQUILIBRIO.

Hardy, Pomeau y de Pazzis mostraron que el modelo HPP tiene una solución muy simple en equilibrio estadístico (lo cual llamaron estados invariantes), en el cual las variables Booleanas en todas los sitios son independientes. Tales soluciones en equilibrio son el equivalente para los gases en redes de los estados de Maxwell de la mecánica estadística clásica, y son por lo tanto cruciales para derivar las ecuaciones de la hidrodinámica. Existen soluciones similares para la clase de modelos no-determinísticos en general, como es el caso del modelo FHP. A continuación discutiremos esas soluciones, recordando que para el caso del modelo HPP la función $A(s+s')$ sólo puede tener valores 0 y 1.

5.1. La ecuación de transporte y su solución en equilibrio.

Con el fin de obtener una ecuación de transporte semejante a la de Boltzmann, tomaremos el promedio sobre un conjunto representativo de las ecuaciones microdinámicas obtenidas en la sección 3.3. Después obtenemos sus soluciones en equilibrio.

Si tomamos dicho promedio sobre la ecuación (3.11), en ausencia de colisiones obtenemos que

$$f_1(t+1, r+c_1) - f_1(t, r) = 0. \quad (3.33)$$

En caso contrario, cuando sí tomamos en consideración las colisiones, ecuación (3.12), encontramos que

$$\begin{aligned} f_1(t+1, r+c_1) - f_1(t, r) &= \sum_{\underline{s} \in \Gamma} \left(\sum_{\underline{s} \underline{s}'} (s'_1 - s_1) c_{\underline{s} \underline{s}'} \delta_{\underline{s} \underline{s}'} \right) P(t, \underline{s}(t)) \\ &= \sum_{\underline{s} \underline{s}'} (s'_1 - s_1) \langle c_{\underline{s} \underline{s}'} \delta_{\underline{s} \underline{s}'} \rangle, \end{aligned} \quad (3.34)$$

donde por definición

$$\langle c_{\underline{s} \underline{s}'} \delta_{\underline{s} \underline{s}'} \rangle = \sum_{\underline{s} \in \Gamma} c_{\underline{s} \underline{s}'} \delta_{\underline{s} \underline{s}'} P(t, \underline{s}(t)).$$

Para encontrar el promedio que aparece en el lado derecho de la anterior ecuación, que es el producto de dos cantidades, debemos tener en cuenta el significado que tiene. Este término se refiere a cuál es la probabilidad de que el sitio r al tiempo t , tenga una configuración de velocidades s y que ésta s evolucione en una nueva configuración s' . Estos dos hechos son estadísticamente independientes. Lo anterior se debe a que mientras el primero de los términos se refiere al hecho de que dada una configuración de "entrada" $s(t, r)$, encontremos sus posibles configuraciones de "salida" $s'(t+1, r)$, lo cual tiene que ver con la interpretación física que hemos hecho de s (s no puede evolucionar en s' , si ambas no tienen igual masa y cantidad de movimiento), y no con encontrar, o no, a dicha configuración en el sitio r al tiempo t . El otro término, $\delta_{\underline{s} \underline{s}'}$, se refiere al problema

de que dada una configuración de la red $\underline{s}(t)$, en el sitio r al tiempo t encontremos una configuración de velocidades $s(t, r)$, lo cual tiene que ver más bien con la manera en que podemos distribuir las partículas entre los sitios de la malla. Es debido a esto que podemos reescribir la ecuación (3.34) como

$$f_1(t+1, r+c_1) - f_1(t, r) = \sum_{ss'} (s'_1 - s_1) \langle c_{ss'} \rangle < \delta_{ss_p} \rangle. \quad (3.35)$$

Si utilizamos la hipótesis de caos molecular en la representación a la delta de Kronecker, dada por la ecuación (3.19), encontramos que

$$\langle \delta_{ss_p} \rangle = \prod_j \langle s_j \rangle^{s_j} (1 - \langle s_j \rangle)^{(1-s_j)} = \prod_j f_j^{s_j} (1 - f_j)^{(1-s_j)}, \quad (3.36)$$

La hipótesis de caos molecular para un gas de red lo que nos dice, en principio, es que la probabilidad de encontrar una partícula en la dirección de velocidad i , nada tiene que ver con la probabilidad de encontrar otra partícula en la dirección de velocidad j (con $j \neq i$), en un mismo sitio r al tiempo t . Esto es, que los dos eventos son estadísticamente independientes.

Usando la expresión (3.36), junto con el hecho de que $\langle c_{ss'} \rangle = A(s-s')$ obtendremos que

$$f_1(t+1, r+c_1) - f_1(t, r) = \sum_{ss'} (s'_1 - s_1) A(s-s') \prod_j f_j^{s_j} (1 - f_j)^{(1-s_j)}. \quad (3.37)$$

Con el fin de hacer que la ecuación (3.37) tenga una forma similar a la ecuación de transporte de Boltzmann, lo que debemos hacer es poner en forma diferencial el término del lado izquierdo de la misma. Para poder realizar esto lo que haremos será, de manera similar a lo realizado en la teoría cinética clásica, considerar elementos de volumen, a los que denotaremos por δ_r , que sean lo suficientemente grandes comparados con la distancia entre los sitios de la red, que denotamos por ℓ_s , para poder contener un número considerable de partículas, pero que son aún lo suficientemente "pequeños" comparados con el tamaño $L_x \times L_y$ de la red (L_x y L_y son las dimensiones longitudinales de la red). En cuanto a los intervalos de tiempo δ_t , consideraremos que estos son lo suficientemente "largos" en comparación con el tiempo de colisiones, que denotamos por t_c , para que podamos observar los cambios en f_1 debidos a ellas. Es por ello que las condiciones para desarrollar en serie de Taylor el lado izquierdo de la ecuación (3.37) son

$$\ell_s \ll \delta_r \ll L_x \text{ (y } L_y) \quad (3.38)$$

y

$$t_c \ll \delta_t.$$

Aún cuando siempre $\xi_s = 1$ y t_c es instantáneo, el problema de las magnitudes de δ_r y δ_t es un problema de escalas, en el cual nosotros decidimos que es lo que designamos por "grande" o "pequeño", en el sentido de los tamaños que estemos manejando tanto en las magnitudes espaciales de la red, como en los tiempos de evolución dinámica del sistema que estemos estudiando.

Tomando en consideración lo especificado en la ecuación (3.38), encontramos que la expresión en serie de Taylor del lado izquierdo de la ecuación de transporte (3.37) es

$$f_1(t+\delta t, r+c_1) - f_1(t, r) = \left[\delta_t \frac{\partial}{\partial t} + \delta_r \cdot \hat{e}_1 \cdot \nabla_r \right] f_1(t, r) + \frac{1}{2} \left[\delta_t^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2\delta_r \delta_t (\hat{e}_1 \cdot \nabla_r) \frac{\partial}{\partial t} + \delta_r^2 (\hat{e}_1 \cdot \nabla_r)^2 \right] f_1(t, r) + \dots \quad (3.39)$$

En la ecuación anterior hemos introducido el vector unitario \hat{e}_1 , con el fin de hacer más entendible la relación que enseguida vamos a deducir. Tomando el límite cuando $\delta t \rightarrow 0$ en la expresión anterior, el único término que sobrevive en el lado derecho es el primero, por lo que la ecuación (3.37) se puede escribir como

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + c_1 \cdot \nabla_r \right] f_1(r, t) = \sum_{ss'} (s_1' - s_1) A(s_1' s_1) \prod_j f_j^{s_j} (1 - f_j)^{[1-s_j]} \quad (3.40)$$

Para obtener esta expresión hemos supuesto, además, que $\delta_r = c_1 \delta_t$ y substituido s_{p_j} por s_j por ser el conjunto de configuraciones por sitio de la red el mismo para ambas. La ecuación (3.40) es la ecuación de transporte para gases en redes.

Como mencionamos al principio de esta sección, también los gases en redes muestran una tendencia a estados de equilibrio. Esto se puede ver fácilmente por medio de un Teorema H para gases de red. Este teorema lo enunciamos y demostramos en el apéndice C. Aquí lo que nos interesa es encontrar la solución de equilibrio a la ecuación de transporte (3.40). Para ello definimos las siguientes cantidades

$$\hat{f}_1 = \frac{f_1}{1 - f_1}, \quad (3.41)$$

$$\Pi = \prod_j (1 - f_j).$$

Ya que nos encontramos en equilibrio, el término del lado derecho de la ecuación (3.39) debe ser igual a cero, por lo que

$$\sum_{s's'} (s'_1 - s_1) A(s \rightarrow s') \prod_j f_j^{s_j} (1 - f_j^{1-s_j}) = 0. \quad (3.42)$$

Si dividimos esta ecuación entre \prod_j encontraremos que

$$\sum_{s's'} (s'_1 - s_1) A(s \rightarrow s') \prod_j \hat{f}_j^{s_j} = 0. \quad (3.43)$$

Multipliquemos esta ecuación por $\ln \hat{f}_1$ y sumemos sobre i para encontrar que

$$\sum_{s's'} A(s \rightarrow s') \ln \left(\frac{\prod_j f_j^{s'_j}}{\prod_j f_j^{s_j}} \right) \prod_j \hat{f}_j^{s'_j} = 0. \quad (3.44)$$

Por otra parte, al existir balance semi-detallado (para los casos particulares de los modelos que aquí tratamos, es detallado), podemos intercambiar en la ecuación (3.43) variables primadas por no-primadas sin afectar su resultado, por lo que

$$\sum_{s's'} A(s \rightarrow s') \left(\prod_j \hat{f}_j^{s'_j} - \prod_j \hat{f}_j^{s_j} \right) = 0. \quad (3.45)$$

Sumando las dos últimas ecuaciones, (3.44) y (3.45), obtenemos

$$\sum_{s's'} A(s \rightarrow s') \left[\ln \left(\frac{\prod_j f_j^{s'_j}}{\prod_j f_j^{s_j}} \right) \prod_j \hat{f}_j^{s'_j} + \prod_j \hat{f}_j^{s'_j} - \prod_j \hat{f}_j^{s_j} \right] = 0. \quad (3.46)$$

Finalmente si hacemos uso de la relación [Roberts, 1973],

$$\psi \ln \frac{\alpha}{\psi} + \psi - \alpha = - \int_{\alpha}^{\psi} \ln \frac{t}{\alpha} dt \leq 0,$$

con $\alpha > 0$, $\psi > 0$ y donde la igualdad se da si $\alpha = \psi$, obtendremos que la ecuación (3.46) es una combinación de expresiones de estas formas, con coeficiente no negativo $A(s \rightarrow s')$. Para tener la

igualdad a cero se debe cumplir que

$$\prod_j \hat{f}_j^{s_j} = \prod_j \hat{f}_j^{s'_j}, \quad (3.47)$$

siempre y cuando $\Lambda(s+s') \neq 0$. Como todos los pasos anteriores son reversibles, esta última igualdad es equivalente a

$$\sum_i \ln(\hat{f}_i^{s'_i} - s_i) \Lambda(s+s') = 0, \quad \forall s, s'. \quad (3.48)$$

Esto significa que $\ln \hat{f}_i$ es un invariante de colisiones, como lo muestra la ecuación (3.8). Utilizando el hecho de que las únicas cantidades que cumplen una relación como la anterior para un gas de red son combinaciones lineales de unos y de las velocidades c_i (de la masa y de la cantidad de movimiento), concluimos que

$$\ln \hat{f}_i = -(\hbar + q \cdot c_i). \quad (3.49)$$

En la ecuación (3.49) \hbar es un número real arbitrario y q es un vector D dimensional también arbitrario (en nuestro caso $D = 2$), los cuales pueden ser determinados a partir de las propiedades conservadas. Este invariante de colisiones es el más general para modelos de gases en redes como los que aquí usamos. Utilizando la definición de \hat{f}_i junto con la expresión anterior, encontramos que en equilibrio la función de distribución f_i es

$$f_i(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{1 + \exp(\hbar + q \cdot c_i)}. \quad (3.50)$$

Para determinar los coeficientes \hbar y q de la ecuación anterior, debemos recurrir a las definiciones de número promedio de partículas y de flujo de masa, esto es

$$\rho = \sum_i f_i = \sum_i \frac{1}{1 + \exp(\hbar + q \cdot c_i)}, \quad (3.51)$$

$$\rho u = \sum_1 f_1 c_1 = \sum_1 c_1 \frac{1}{1 + \exp(h + q \cdot c_1)} \quad (3.52)$$

Aún cuando estas ecuaciones parecen simples a primera vista y por lo tanto esperaríamos encontrar una solución sencilla a ellas, como en el caso del continuo, éste no es el caso y una solución general a dichas ecuaciones todavía no ha podido ser encontrada en general. Para casos sencillos como el modelo HPP y algunos modelos de FHP, los valores de las constantes h y q han sido ya determinados [Hardy et al., 1976; Doolen, 1989]. Para modelos más complicados, como es el caso de un autómata celular de nueve velocidades cuyas magnitudes son en general diferentes, y donde además de los dos principios de conservación de la masa y la cantidad de movimiento, se cumple también el de conservación de energía (lo que implica la aparición de un tercer invariante de colisión asociado a este principio), existe una solución basada en argumentos de carácter termodinámicos [Rechtman y Salcido, 1990].

El que hayamos obtenido una distribución de Fermi-Dirac no es de extrañarse, pues el modelo se construyó con un principio de exclusión (no más de una partícula por cada dirección de velocidad).

5.2. Equilibrio a bajas velocidades.

En la teoría cinética clásica las funciones de distribución en equilibrio con velocidades medias diferentes, se relacionan entre sí mediante una transformación de Galileo. Este tipo de invariancia Galileana no se mantiene a nivel microscópico para un gas en una red. Es por ello que no hay una relación simple entre las funciones de distribución en equilibrio con velocidades media nula y no nula. Para poder derivar las ecuaciones de la dinámica de los fluidos, necesitaremos únicamente equilibrio a velocidades bajas, esto es, que $u = |u| \ll c$. La u y la c son respectivamente la rapidez del fluido y de las partículas. Para dicho equilibrio las función de distribución puede ser calculada perturbativamente en potencias de u .

Podemos escribir la función de distribución en equilibrio como

$$f_1(\rho, u) = f_{FD}(h(\rho, u) + q(\rho, u) \cdot c_1), \quad (3.53)$$

donde ρ es el número promedio de partículas por sitio definido por (3.29a) y f_{FD} es la función de Fermi-Dirac

$$f_{FD}(x) = \frac{1}{1 + e^x} \quad (3.54)$$

Mediante la propiedad que asegura la existencia de una isometría que intercambia las velocidades c_i y c_j , [Frisch et al., 1987], podemos encontrar que si $u = 0$,

$$f_i = \frac{\rho}{b}, \quad \text{para } i = 1, \dots, b. \quad (3.55)$$

En lo que sigue usaremos $d = \rho/b$, que es la densidad que definimos en la sección 3.4. Además

$$f_i = \frac{\rho}{b} = \frac{1}{1 + \exp(h)}.$$

y

$$q(\rho, 0) = 0.$$

Si utilizamos la invariancia de paridad ($c_i \rightarrow -c_i$, $u \rightarrow -u$), propiedad P.I. del apéndice A, encontramos que

$$h(\rho, -u) = h(\rho, u), \quad q(\rho, -u) = -q(\rho, u). \quad (3.56)$$

Usando el hecho de que la función $h(\rho, u)$ es par y la función $q(\rho, u)$ impar, obtendremos al expandir en serie que

$$\begin{aligned} h(\rho, u) &= h_0 + h_2 u^2 + O(u^4), \\ q_\alpha(\rho, u) &= q_1 u_\alpha + O(u^3), \end{aligned} \quad (3.57)$$

donde

$$h_0 = h(\rho, 0), \quad h_2 = \frac{1}{2!} (\hat{u} \cdot \nabla_u)^2 h(\rho, 0) \quad \text{y} \quad q_1 = (\hat{u} \cdot \nabla_u) q_\alpha(\rho, 0).$$

Estas últimas cantidades dependen únicamente de ρ . Debido a la propiedad de isotropía para los tensores de segundo orden (propiedad P.4., apéndice A), las constantes h_2 y q_1 son escalares. Sustituyendo las expresiones de h y q en la ecuación (3.53) obtenmos que

$$f_i(\rho, u) = f_{FD} \left[h_0 + h_2 u^2 + q_1 u \cdot c_i + O(u^3) + O(u^4) \right]. \quad (3.58)$$

Si ahora hacemos una expansión de esta función de distribución f_1 en potencias de u al rededor de h_0 , tendremos que:

$$f_1 = f_{FD} + q_1 f'_{FD} u \cdot c_1 + h_2 f''_{FD} u^2 + \frac{1}{2} q_1^2 f''_{FD} (u \cdot c_1)^2 + O(u^3), \quad (3.59)$$

donde f_{FD} , f'_{FD} y f''_{FD} son los valores, evaluados en h_0 , de la función de distribución de Fermi-Dirac y sus primera y segunda derivadas con respecto a u , en la dirección i respectivamente. Si calculamos con esta última ecuación el número promedio de partículas ($\rho = \sum_1 f_1$), y el flujo de masa ($\rho u = \sum_1 c_1 f_1$), podemos encontrar los valores de q_1 y de h_2 . Esto es

$$\rho = \sum_1 f_{FD} + \sum_1 q_1 f'_{FD} u \cdot c_1 + \sum_1 h_2 f''_{FD} u^2 + \sum_1 \frac{1}{2} q_1^2 f''_{FD} (u \cdot c_1)^2 + \dots$$

$$\rho u = \sum_1 c_1 f_{FD} + \sum_1 c_1 q_1 f'_{FD} u \cdot c_1 + \sum_1 c_1 h_2 f''_{FD} u^2 + \sum_1 \frac{1}{2} c_1 q_1^2 f''_{FD} (u \cdot c_1)^2 + \dots$$

Utilizando la propiedad P.6 del apéndice A, que nos dice que los momentos de velocidad de orden impar son cero, y la ecuación (A.1) que nos da la forma explícita del momento de velocidad de orden 2, podemos ver entonces que en la segunda de las ecuaciones anteriores todos los términos del lado derecho excepto el segundo son idénticamente cero, de ello podemos obtener q_1 . Por otro lado, el primer miembro del lado derecho para la ecuación en ρ , es igual al único miembro del lado izquierdo, por lo que los miembros restantes en el lado derecho serán cero. Tomando términos de órdenes iguales en u , en esta ecuación, vemos que el segundo de ellos es idénticamente cero mientras que podemos sumar el tercero con el cuarto e igualar la suma a cero y así encontrar el valor de h_2 . Los valores de h_2 y q_1 que obtenemos son

$$q_1 = \left(\frac{\rho D}{c^2 d} \right) \left(\frac{b^2}{\rho(\rho-b)} \right) \quad \text{y} \quad h_2 = \frac{Db(b-2\rho)}{2c^2(b-\rho)^2}$$

Recordemos que D es la dimensión espacial de la red, d la población media en equilibrio (en cualquier dirección de velocidad), ρ el número promedio de partículas por sitio, c la rapidez de las partículas y b el número de velocidades en el gas.

La población media en equilibrio calculada hasta segundo orden en u será entonces

$$f_1^{eq}(\rho, u) = \frac{\rho}{b} + \left(\frac{\rho D}{c^2 d} \right) c_{1\alpha} u_\alpha + \rho G(\rho) Q_{\alpha\beta} u_\alpha u_\beta, \quad (3.60)$$

donde

$$G(\rho) = \left(\frac{D^2}{2bc^4} \right) \left(\frac{b - 2\rho}{b - \rho} \right) \quad \text{y} \quad Q_{\alpha\beta} = c_{1\alpha} c_{1\beta} - \left(\frac{c^2}{D} \right) \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.61)$$

Hemos puesto el superíndice "eq" en la ecuación (3.60) para resaltar el hecho de que la población media está evaluada en equilibrio. Observemos además que el coeficiente $G(\rho)$ del término cuadrático se anula cuando $\rho = b/2$, esto es, cuando el número promedio de hoyos y partículas es la misma.

6. LAS ECUACIONES MACRODINAMICAS.

Como hemos visto en la sección anterior los gases de red admiten una solución en equilibrio. Entonces, igual que la teoría cinética clásica, podemos proponernos el encontrar las soluciones perturbadas de dicha solución, de tal manera que a distintas aproximaciones obtengamos las diferentes ecuaciones de la dinámica de los fluidos. Para este fin utilizaremos el formalismo de multi-escalas [Nayfeh, 1981], sobre las relaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento del autómatas celular.

El método de multi-escalas consiste en proponer que una función dependa de un parámetro ξ y potencias de éste, multiplicadas por las "variables físicas" que determinan a dicha función, esto es

$$\mathcal{F}(t, r; \xi) = \hat{\mathcal{F}}(t, \xi t, \xi^2 t, \dots, r, \xi r, \dots) \quad (3.62)$$

ó,

$$\mathcal{F}(t, r; \xi) = \hat{\mathcal{F}}(t_0, t_1, t_2, \dots, r_0, r_1, \dots);$$

donde $t_0 = t, t_1 = \xi t, t_2 = \xi^2 t, \dots$

y $r_0 = r, r_1 = \xi r, \dots$

Notemos que las t_n y r_n denotan diferentes escalas de tiempo y espacio respectivamente, pues ξ es un parámetro pequeño. De esta manera en lugar de determinar \mathcal{F} como una función de t y r , la determinaremos como una función de $t_0, t_1, t_2, \dots, r_0, r_1, \dots$.

Ahora bien, para aplicar esta técnica a un autómata celular como los descritos en la sección 3.2, designaremos por $\rho(r)$ y $u(r)$ a el número promedio de partículas y la velocidad media respectivamente, en el sitio r de la malla. Suponemos además que estas cantidades están cambiando en una escala espacial de ξ^{-1} (en unidades constantes de la red). Esto requiere que el tamaño de la malla ℓ sea en sí mismo al menos $O(\xi^{-1})$. Los cambios espaciales se suponen lo suficientemente regulares para permitir interpolaciones con el propósito de calcular derivadas. Se supone también que el número promedio de partículas es $O(1)$ y que la velocidad u es pequeña comparada con la rapidez c de las partículas. De esta forma, se espera ocurran los siguientes fenómenos

1. relajación al equilibrio local en una escala de tiempo del orden de ξ^0 ,
2. propagación de perturbaciones de densidad como ondas de sonido en una escala de tiempo del orden de ξ^{-1} ,
3. efectos de difusión (y posiblemente advectivos) en una escala de tiempo del orden de ξ^{-2} .

Usamos la siguiente convención: para el tiempo, adoptamos que t es discreto mientras que $t_1 = \xi t$, y $t_2 = \xi^2 t$, serán tratadas como variables continuas. Por otra parte, para el espacio, consideraremos a r como variable discreta y $r_1 = \xi r$ como continua.

Denotamos por $f_1^{(0)}$ la población media en equilibrio basada en los valores locales de ρ y u . Dicha población está dada por la ecuación (3.60). La población media real $f_1(t, r)$ es muy cercana a su valor de equilibrio y se puede expandir en potencias de ξ como

$$f_1(t, r) = f_1^{(0)}(t, r) + \xi f_1^{(1)}(t, r) + O(\xi^2). \quad (3.63)$$

Las correcciones no deben contribuir a los valores locales de densidad y cantidad de movimiento medio, por lo que

$$\sum_1 f_1^{(1)}(t, r) = 0 \quad \text{y} \quad \sum_1 c_1 f_1^{(1)}(t, r) = 0. \quad (3.64)$$

Una vez que hemos especificado la función $f_1(t, r)$, lo que haremos será expandirla mediante una serie de Taylor. A las derivadas espaciales y temporales las denotamos por ∂_t y $\nabla_r = \{\partial_\alpha, \alpha = 1, \dots, D\}$, respectivamente. Entonces

$$f_1(t+1, r+c_1) - f_1(t, r) = \left(\partial_t + c_1 \cdot \nabla_r + \frac{1}{2} \partial_{tt} + \left(c_1 \cdot \nabla_r \right) \partial_t \right. \\ \left. + \frac{2}{1} \left(c_1 \cdot \nabla_r \right)^2 + \dots \right) f_1(t, r) \quad (3.65)$$

Debido al método de aproximación que estamos usando debemos hacer la sustitución

$$\partial_t \rightarrow \xi \partial_{t_1} + \xi^2 \partial_{t_2} \quad \text{y} \quad \nabla_r \rightarrow \xi \nabla_{r_1} \quad (3.66)$$

Expandiendo a su vez la f_1 , así como las diferencias finitas en potencias de ξ , tendremos que

$$\left((\xi \partial_{t_1} + \xi^2 \partial_{t_2}) + (c_{1\alpha} \cdot \xi \partial_{1\alpha}) + \frac{1}{2} (\xi \partial_{t_1} + \xi^2 \partial_{t_2})^2 + (c_{1\alpha} \cdot \xi \partial_{1\alpha}) \cdot (\xi \partial_{t_1} + \xi \partial_{t_2}) + \right. \\ \left. \frac{1}{2} (c_{1\alpha} \cdot \xi \partial_{1\alpha})^2 + \dots \right) (f_1^{(0)} + \xi f_1^{(1)} + \dots) = f_1(t+1, r+c_1) - f_1(t, r) \quad (3.67)$$

Usamos $\partial_{1\alpha}$ para denotar las componentes de ∇_{r_1} . Si sustituimos esta ecuación en la relación de conservación de masa (3.31), podremos reescribirla como

$$\xi \sum_1 (\partial_{t_1} + c_{1\alpha} \partial_{1\alpha}) f_1^{(0)} + \xi^2 \sum_1 (\partial_{t_2} + (\partial_{t_1} + c_{1\alpha} \partial_{1\alpha})^2) f_1^{(0)} + \\ \xi^2 \sum_1 (\partial_{t_1} + c_{1\alpha} \partial_{1\alpha}) f_1^{(1)} + O(\xi^3) = 0 \quad (3.68)$$

Por otra parte al sustituir la ecuación (3.67) en la ecuación de conservación de cantidad de movimiento (3.32) obtendremos que

$$\xi \sum_1 c_{1\alpha} (\partial_{t_1} + c_{1\alpha} \partial_{1\alpha}) f_1^{(0)} + \xi^2 \sum_1 c_{1\alpha} (\partial_{t_2} + (\partial_{t_1} + c_{1\alpha} \partial_{1\alpha})^2) f_1^{(0)} + \\ \xi^2 \sum_1 c_{1\alpha} (\partial_{t_1} + c_{1\alpha} \partial_{1\alpha}) f_1^{(1)} + O(\xi^3) = 0 \quad (3.69)$$

Tomando los términos de primer orden en ξ , en los desarrollos perturbativos de las ecuaciones de conservación anteriores (3.68) y (3.69), obtendremos que

$$\partial_{t1} \sum_1 f_1^{(0)} + \partial_{1\beta} \sum_1 c_{1\beta} f_1^{(0)} = 0$$

$$\partial_{t1} \rho + \partial_{1\beta} (\rho u_\beta) = 0, \quad (3.70)$$

y

$$\partial_{t1} \sum_1 c_{1\alpha} f_1^{(0)} + \partial_{1\beta} \sum_1 c_{1\alpha} c_{1\beta} f_1^{(0)} = 0$$

$$\partial_{t1} (\rho u_\alpha) + \partial_{1\beta} P_{\alpha\beta} = 0. \quad (3.71)$$

donde $P_{\alpha\beta}$ es el tensor de flujo de cantidad de movimiento, el cual si usamos (3.60), puede escribirse como

$$\begin{aligned} P_{\alpha\beta} &= \sum_1 c_{1\alpha} c_{1\beta} f_1^{e\alpha} \\ &= \frac{c^2}{D} \rho \delta_{\alpha\beta} + \rho G(\rho) T_{\alpha\beta\gamma\delta} u_\gamma u_\delta + O(u^4), \end{aligned} \quad (3.72)$$

con

$$T_{\alpha\beta\gamma\delta} = \sum_1 c_{1\alpha} c_{1\beta} Q_{1\gamma\delta}, \quad (3.73)$$

y $G(\rho)$ y $Q_{1\alpha\beta}$ dados por las ecuación (3.61). Las ecuaciones (3.70) y (3.71) son las ecuaciones de Euler para un gas discreto.

Si ahora tomamos los términos de segundo orden en (3.68) y (3.69) obtendremos que para la conservación de la masa

$$\begin{aligned} \partial_{t2} \sum_1 f_1^{(0)} + \frac{1}{2} \partial_{t1} \left(\partial_{t1} \sum_1 f_1^{(0)} + \partial_{1\beta} \sum_1 c_{1\beta} f_1^{(0)} \right) + \partial_{t1} \sum_1 f_1^{(1)} + \\ \frac{1}{2} \partial_{1\alpha} \left(\partial_{t1} \sum_1 c_{1\alpha} f_1^{(0)} + \partial_{1\beta} \sum_1 c_{1\alpha} c_{1\beta} f_1^{(0)} \right) + \partial_{1\alpha} \sum_1 c_{1\alpha} f_1^{(1)} = 0 \end{aligned}$$

O si utilizamos las relaciones (3.64), junto con las ecuaciones (3.70) y (3.71)

$$\partial_{t2} \rho = 0. \quad (3.74)$$

Al término de segundo orden en ξ , de la ecuación (3.69), lo podemos escribir como

$$\begin{aligned} & \partial_{12} \sum_{\alpha} c_{1\alpha} f_{1\alpha}^{(0)} + \frac{1}{2} \partial_{11} \left(\partial_{11} \sum_{\alpha} c_{1\alpha} f_{1\alpha}^{(0)} + \partial_{1\beta} \sum_{\alpha} c_{1\alpha} c_{1\beta} f_{1\alpha}^{(0)} \right) + \partial_{11} \sum_{\alpha} c_{1\alpha} f_{1\alpha}^{(1)} + \\ & \partial_{1\beta} \sum_{\alpha} c_{1\alpha} c_{1\beta} f_{1\alpha}^{(1)} + \partial_{1\alpha} \left[\frac{1}{2} \partial_{11} \sum_{\alpha} c_{1\alpha} c_{1\beta} f_{1\alpha}^{(0)} + \partial_{1\beta} \sum_{\gamma} c_{1\gamma} c_{1\alpha} c_{1\beta} f_{1\alpha}^{(0)} \right] = 0 \end{aligned}$$

Si usamos como antes las ecuaciones (3.64) y (3.70), obtendremos que el segundo y tercer término del lado izquierdo son cero. Por otra parte, al sustituir (3.71) junto con (3.60) (hasta segundo orden en u), en el último término de ese mismo lado, obtenemos que

$$\partial_{12}(\rho u_{\alpha}) + \partial_{1\beta} \left(\sum_{\alpha} c_{1\alpha} c_{1\beta} f_{1\alpha}^{(1)} + \frac{D}{2c^2 b} T_{\alpha\beta\gamma\delta} \partial_{1\gamma}(\rho u_{\delta}) \right) = O(u^2). \quad (3.75)$$

La ecuación (3.74) nos indica que a segundo orden en ξ , no hay difusión de masa (sólo hay una especie de partículas). La ecuación (3.75) describe la difusión de la cantidad de movimiento sobre grandes escalas de tiempo ($O(\xi^{-2})$). Esta última tiene dos contribuciones, el término que involucra a $T_{\alpha\beta\gamma\delta}$ se debe a la propagación de partículas y el término restante en la ecuación (3.75), de los que se encuentran dentro del paréntesis, involucra la derivada de $f_{1\alpha}^{(1)}$ a partir de la población media en equilibrio. Puesto que $f_{1\alpha}^{(1)}$ se anula cuando el equilibrio es uniforme, esta debe ser una combinación lineal de gradientes (con respecto a $r_{1\alpha}$), de ρ y ρu . La teoría lineal para la respuesta se puede usar en el cálculo de los coeficientes. Suponemos que u es pequeña puesto que a órdenes significativos de equilibrio, las ecuaciones son invariantes bajo el grupo de isometrías de la red.

Ya que el gradiente de ρ es un vector y el gradiente de ρu es un tensor de segundo orden, a partir de las propiedades enunciadas en el apéndice A, podemos escribir que

$$f_{1\alpha}^{(1)} = \sigma c_{1\alpha} \partial_{1\alpha} \rho + (\psi c_{1\alpha} c_{1\beta} + \chi \delta_{\alpha\beta}) \partial_{1\alpha}(\rho u_{\beta}), \quad (3.76)$$

donde σ , ψ y χ son funciones que determinaremos en seguida.

Sustituyendo esta ecuación en las relaciones (3.64), y usando las propiedades P.6., para los momentos de velocidad enunciados en el apéndice A, encontramos que $\sigma = 0$ y $c^2 \psi + D \chi = 0$. Debemos observar que ψ debe depender de ρ pero no de u , ya que ésta se evalúa a $u = 0$. Si sustituimos

$$f_{1\alpha}^{(1)} = (\psi c_{1\alpha} c_{1\beta} - \frac{c^2}{D} \delta_{\alpha\beta}) \partial_{1\alpha}(\rho u_{\beta})$$

en el segundo de los términos entre paréntesis de la ecuación (3.75), obtenemos que

$$\sum_I c_{1\alpha} c_{1\beta} \left(\psi c_{1\gamma} c_{1\delta} + \psi \frac{c^2}{D} \delta_{\gamma\delta} \right) \partial_{1\gamma} (\rho u_\delta) = \psi \partial_{1\gamma} (\rho u_\delta) T_{\alpha\beta\gamma\delta}.$$

Por lo que al sustituir este resultado en dicha ecuación, obtendremos que

$$\partial_{12} (\rho u_\alpha) + \partial_{1\beta} \left[\left(\psi(\rho) + \frac{D}{2c^2 b} \right) T_{\alpha\beta\gamma\delta} \partial_{1\gamma} (\rho u_\delta) \right] = O(u^2). \quad (3.77)$$

Una vez que hemos encontrado de forma independiente los términos a $O(\xi^{-1})$ y a $O(\xi^{-2})$ para ρ y ρu , lo que haremos ahora será conjuntar ambos para obtener las expansiones hasta orden dos en las ecuaciones (3.68) y (3.69). Escribiendo estas expresiones en términos de las variables originales t y r (en la versión del continuo, ecuación (3.66)), obtendremos las ecuaciones de la macrodinámica

$$\partial_t \rho + \partial_\beta (\rho u_\beta) = 0, \quad (3.78)$$

y

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta \left(\rho G(\rho) T_{\alpha\beta\gamma\delta} u_\gamma u_\delta + \frac{c^2}{D} \rho \delta_{\alpha\beta} \right) \\ + \left[\left(\psi(\rho) + \frac{D}{2c^2 b} \right) T_{\alpha\beta\gamma\delta} \partial_\gamma (\rho u_\delta) \right] \\ = O(\xi u^3) + O(\xi^2 u^2) + O(\xi^3 u). \end{aligned} \quad (3.79)$$

La ecuación (3.78) es la ecuación de continuidad de la mecánica de fluidos, mientras que la ecuación (3.79) es muy similar a la ecuación de Navier-Stokes.

La ecuación (3.79) no es isotrópica, puesto que el tensor $T_{\alpha\beta\gamma\delta}$ no lo es en general. Como este es un tensor de cuarto orden, la forma general que dicho tensor debe tener, para ser isotrópico es, (ver apéndice A)

$$T_{\alpha\beta\gamma\delta} = A \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + B \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + C \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}, \quad (3.80)$$

con A, B y C constantes. Además el tensor $T_{\alpha\beta\gamma\delta}$ es simétrico por pares en (α, β) y (γ, δ) . De la ecuación (3.73) se sigue que

$$\sum_{\gamma} T_{\alpha\beta\gamma\gamma} = 0, \quad \sum_{\alpha\beta} T_{\alpha\beta\alpha\beta} = bc^4 \left(1 - \frac{1}{D} \right). \quad (3.81)$$

Si el tensor $T_{\alpha\beta\gamma\delta}$ es isotrópico estas propiedades lo constriñen, lo cual implicará que

$$T_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{bc^4}{D(D+2)} \left(\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right). \quad (3.82)$$

Hay que observar que no todos los modelos de autómatas celulares tienen asociados tensores isotrópicos de cuarto orden, como se muestra en el apéndice A. Tales tensores no existen para modelos de cuatro velocidades, cuya magnitud es constante e igual a uno, como el HPP; una evaluación directa del tensor de flujo de cantidad de movimiento para dicho modelo, dado por la ecuación (3.72), muestra que

$$\begin{aligned} P_{11} &= \rho G(\rho)(u_1^2 - u_2^2) + \frac{\rho}{2} + O(u^4), \\ P_{22} &= \rho G(\rho)(u_2^2 - u_1^2) + \frac{\rho}{2} + O(u^4), \end{aligned} \quad (3.83)$$

$$\text{con} \quad G(\rho) = \frac{2 - \rho}{4 - \rho}. \quad (3.84)$$

Este tensor $P_{\alpha\beta}$ es el único tensor de segundo orden cuadrático en la velocidad que contiene a $u_\alpha u_\beta$ y $u \cdot u \delta_{\alpha\beta}$. Como podemos ver de (3.83) este tensor no es isotrópico, por lo que en el modelo HPP no es posible observar efectos hidrodinámicos.

Como también se muestra en el mismo apéndice A, para modelos con mayor número de velocidades el tensor $T_{\alpha\beta\gamma\delta}$ sí es isotrópico y es de la forma especificada por (3.82). Sustituyendo entonces en la ecuación macrodinámica de la cantidad de movimiento (3.79) a (3.82), obtendremos que

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho g(\rho) u_\alpha u_\beta) + \partial_\alpha \left[c^2 \rho \left[1 - g(\rho) \frac{u^2}{c^2} \right] \right] \\ = \partial_\beta \left[(\nu_c(\rho) + \nu_p) \left(\partial_\alpha (\rho u_\beta) + \partial_\beta (\rho u_\alpha) - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\delta) \right) \right] \\ + O(\xi u^3) + O(\xi^2 u^2) + O(\xi^3 u), \end{aligned} \quad (3.85)$$

con

$$g(\rho) = \frac{D}{D+2} \frac{b-2\rho}{b-\rho}, \quad c_s^2 = \frac{c^2}{D},$$

$$\nu_c(\rho) = -\frac{bc^4}{D(D+2)} \psi(\rho), \quad \nu_p = -\frac{c^2}{2(D+2)}. \quad (3.86)$$

Como veremos más adelante, ν_c es la viscosidad debida a las colisiones de las partículas y ν_p la debida a su propagación, la cual es no negativa.

Con lo anterior hemos impuesto la isotropía a nivel macroscópico, y la ecuación (3.85) es muy parecida la ecuación de Navier-Stokes. La función $\psi(\rho)$, que aparece en las fórmulas anteriores, es de la forma [Frisch et al.,1987]

$$\psi(\rho) = \frac{bc^2}{D} \frac{\sum_{j,\alpha\beta} Q_{j,\alpha\beta}^2}{\sum_{j,\alpha\beta} Q_{j,\alpha\beta} A_{j,\alpha\beta}}, \quad (3.87)$$

donde

$$A_{ij} = \left[\frac{\partial \Delta_1^{col}}{\partial f_i} \right]_{f_i = \rho/b} \quad (3.88)$$

con Δ_1^{col} dada por la ecuación (3.19). Esta es la matriz de colisiones linealizada, evaluada a velocidad de equilibrio cero, que además puede ser expresada de manera compacta como

$$A_{ij} = -\frac{1}{2} \sum_{ss'} (s_1 - s_1') \Lambda(s-s_1') d^{p-1} (1-d)^{b-p-1} (s_j - s_j'), \quad (3.89)$$

donde $p = \sum_1 s_1$.

7. LOS REGIMENES MACRODINAMICOS.

Escribamos ahora de manera compacta las ecuaciones macrodinámicas para la masa y la cantidad de movimiento deducidas en la sección anterior, con el fin de observar su similitud con las ecuaciones de la dinámica de fluidos. Esto es

$$\partial_t \rho + \partial_\beta (\rho u_\beta) = 0, \quad (3.90)$$

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta P_{\alpha\beta} = \partial_\beta S_{\alpha\beta} + O(\xi u^3) + O(\xi^2 u^2) + O(\xi^3 u). \quad (3.91)$$

El tensor de flujo de cantidad de movimiento $P_{\alpha\beta}$ y el tensor de esfuerzos viscosos $S_{\alpha\beta}$ están definidos por

$$P_{\alpha\beta} = c_s^2 \rho \left(1 - g(\rho) \frac{u^2}{c^2} \right) \delta_{\alpha\beta} + \rho g(\rho) u_\alpha u_\beta, \quad (3.92)$$

y

$$S_{\alpha\beta} = \nu(\rho) \left(\partial_\alpha (\rho u_\beta) + \partial_\beta (\rho u_\alpha) - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma) \right) \quad (3.93)$$

con

$$\nu(\rho) = \nu_c(\rho) + \nu_p,$$

donde $g(\rho)$, c_s^2 , ν_c y ν_p se definen en la ecuación (3.86).

Se pueden hacer varias observaciones sobre las ecuaciones anteriores. En primer lugar podemos notar que cuando la velocidad u es muy pequeña podemos despreciar los términos de segundo orden en u de la ecuación (3.92), por lo que el tensor de flujo de cantidad de movimiento $P_{\alpha\beta}$ se reduce al término diagonal $\rho \delta_{\alpha\beta}$, que es el término de presiones. La presión está dada por la relación "isotérmica"

$$p = c_s^2 \rho, \quad (3.94)$$

donde c_s representa la velocidad del sonido en el gas. De la ecuación (3.86) $c_s = 1/\sqrt{Z}$, pues $|c| = c = 1$ para los modelos HPP y FHP.

Por otra parte el tensor de flujo de cantidad de movimiento para gases continuos está dado por $P_{\alpha\beta} = \rho \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta$. Esta forma del tensor $P_{\alpha\beta}$ es una consecuencia de la invariancia Galileana, la cual nos permite relacionar sistemas en equilibrio termodinámicos

que tengan velocidad media nula, con aquellos para los cuales no es nula. Para gases en redes con velocidades no-nulas, el tensor de flujo de cantidad de movimiento dado por la ecuación (3.92) difiere por un término aditivo en la presión y un factor multiplicativo $g(\rho)$, dependiente de la densidad, en el término adectivo.

La ecuación (3.93) es la relación de esfuerzo-deformación para un fluido Newtoniano con viscosidad cinemática $\nu_c + \nu_p$ y viscosidad de bulo nula. La ausencia de traza en $S_{\alpha\beta}$ (lo que implica la desaparición de la viscosidad de bulo) es debida a la falta de esta misma en el tensor $Q_{\alpha\beta}$ definido por la ecuación (3.61).

La estrategia general por medio de la cual derivaremos las ecuaciones de la dinámica de fluidos a partir de las ecuaciones (3.90) y (3.91), es reescalar el espacio, el tiempo y las variables de velocidad, de manera que los términos no relevantes desaparezcan cuando $\xi \rightarrow 0$. De esta manera al efectuar una expansión a distintos órdenes en ξ para estas ecuaciones, obtendremos los tres regímenes que nos interesan, y que son: la propagación del sonido, la propagación amortiguada del sonido, y la dinámica de fluidos incompresibles (Navier-Stokes).

7.1. Propagación del sonido.

Para obtener este tipo de régimen, consideremos una pequeña perturbación a la solución de equilibrio con número promedio de partículas ρ_0 y velocidad cero. Esto es

$$\rho = \rho_0 + \rho'. \quad (3.95)$$

Haciendo un desarrollo en serie de las ecuaciones (3.90) y (3.91), en potencias de ξ , y tomando estos desarrollos a primer orden, lo cual quiere decir que

$$r = \xi^{-1} r_1, \quad t = \xi^{-1} t_1, \quad \rho' = \xi^a \rho'_1, \quad u = \xi^a U, \quad a > 0, \quad (3.96)$$

obtendremos, tomando el primer término de las expresiones (3.62), que a este orden en las variables reescaladas de tiempo y espacio

$$\begin{aligned} \partial_{t_1} \rho'_1 + \rho_0 \nabla \cdot u &= 0, \\ \rho_0 \partial_{t_1} u + c_s^2 \nabla \rho'_1 &= 0. \end{aligned} \quad (3.97)$$

Eliminando la u en las ecuaciones de arriba, obtenemos una ecuación de onda escalar

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \rho' - c_s^2 \nabla^2 \rho' = 0. \quad (3.98)$$

Esto significa que perturbaciones en la velocidad y la densidad, con amplitudes $O(1)$ sobre escalas espaciales y $O(\xi)$ en las temporales, se propagan como ondas sonoras con velocidad c_s . Como el presente régimen involucra únicamente tensores de segundo orden, se puede aplicar por tanto al modelo HPP también. En el capítulo siguiente discutiremos este régimen con mayor detalle.

7.2. Sonido amortiguado.

Para obtener este tipo de régimen procederemos de manera similar a lo realizado en la sección anterior, sólo que ahora incluiremos un tiempo adicional $t_2 = \xi^2 t$, y tomaremos en cuenta para la relación de escalas (3.96) que $a > 1$, de manera que ρ' y u deben ser de orden $O(\xi)$; de otra manera los términos no lineales llegarían a ser relevantes. Ahora las ecuaciones son

$$\partial_t \rho' + \rho_0 \nabla \cdot u = 0$$

$$\rho_0 \partial_t u + c_s^2 \nabla \rho' = \rho_0 \nu (\rho_0) \left(\nabla^2 u + \frac{D-2}{D} \nabla \nabla \cdot u \right). \quad (3.99)$$

Podemos observar que el amortiguamiento se obtiene a escalas de tiempo del orden de $O(\xi^{-2})$, y que el segundo término del lado derecho para la segunda ecuación se anula en dos dimensiones. Ya que la propagación y el amortiguamiento se encuentran en escalas de tiempo que involucran diferentes potencias de ξ , no existe la posibilidad de describir ambas en una sola ecuación sin mezclar los órdenes en ξ . También este régimen se discute en mayor detalle en el capítulo 3.

7.3. El límite incompresible (las ecuaciones de Navier-Stokes).

Las ecuaciones incompresibles de Navier-Stokes

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} &= -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \end{aligned} \quad (3.100)$$

pueden describir mucho de el comportamiento del flujo de gases ordinarios a bajo número de Mach ($M = u/c_s \ll 1$). Estas ecuaciones se pueden derivar a partir de ecuaciones compresibles usando una expansión en números de Mach, [Majda, 1984]. La idea esencial de este método es que a órdenes significativos, las variaciones en la densidad llegan a ser irrelevantes en todos los términos excepto en la presión.

La misma forma de expansión puede ser aplicada en la dinámica de gases discretos. La manera de hacerlo es congelar el número promedio de partículas dándole un valor constante y uniforme ρ_0 en las ecuaciones (3.90) y (3.91), excepto en el término de presiones donde se conservarán las fluctuaciones para la densidad. Ignorando los términos de órdenes superiores, $O(\xi^3 u)$, $O(\xi^2 u^2)$, etc., encontraremos las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned} \rho_0 \partial_t \mathbf{u} + \rho_0 g(\rho_0) \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} &= -c_s^2 \nabla \left(\rho' - \rho_0 g(\rho_0) \frac{u^2}{c^2} \right), \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0. \end{aligned} \quad (3.101)$$

Como es de esperar, las ecuaciones anteriores no son invariantes bajo transformaciones de Galileo, (lo cual se deriva de la falta de ésta invariancia a nivel de la red). Para hacer que esto no ocurra lo que se necesita es reescalar el tiempo y la viscosidad de una manera conveniente; esto es

$$t \rightarrow \frac{t}{g(\rho_0)}, \quad \nu \rightarrow g(\rho_0) \nu. \quad (3.102)$$

Haciendo como en las secciones anteriores una expansión en términos de ξ , y reescalando las variables como

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \xi^{-1} \mathbf{r}', & t &= \frac{1}{g(\rho_0)} \xi^{-2} t', & \mathbf{u} &= \xi \mathbf{U}, \\ \left(\rho' - \rho_0 g(\rho_0) \frac{u^2}{c^2} \right) &= \frac{\rho_0 g(\rho_0)}{c^2} \xi^2 p', & \nu &= g(\rho_0) \nu'. \end{aligned} \quad (3.103)$$

Debemos observar que todos los términos significativos en la ecuación (3.90) son de orden $O(\xi^2)$, y de orden $O(\xi^3)$ para la ecuación (3.91). Las ecuaciones que obtenemos por medio de este reescalamiento son

$$\begin{aligned} \partial_t U + U \cdot \nabla_1 U &= -\nabla_1 P' + \nu' \nabla_1^2 U, \\ \nabla_1 \cdot U &= 0, \end{aligned} \quad (3.104)$$

en estas últimas ecuaciones U es la velocidad reescalada del fluido, como se mostró antes.

Las ecuaciones (3.104) son precisamente las ecuaciones incompresibles de Navier-Stokes (donde ∇_1 denota el gradiente con respecto a r_1 y ∂_t la derivada parcial con respecto a t). Para obtener este resultado, la expansión se hace a gran escala y bajos números de Mach, manteniendo fijo el número de Reynolds. La invariancia Galileana es reestablecida, al menos formalmente, por medio de el reescalamiento en el tiempo.

Hay una variante a este formalismo, que conduce también a las ecuaciones incompresibles de Navier-Stokes, pero en términos del *flujo de masa* $j = \rho u$ en lugar de la velocidad u . De esta manera las ecuaciones (sin reescalar) serán

$$\begin{aligned} \partial_t j + \frac{g(\rho_0)}{\rho_0} j \cdot \nabla j &= -c_s^2 \nabla \rho' + \nu(\rho_0) \nabla^2 j, \\ \nabla \cdot j &= 0. \end{aligned} \quad (3.105)$$

Ya que j y $g(\rho_0)/\rho_0$ cambian signo al intercambiar partículas por hoyos, esta última ecuación no tiene invariancia bajo dualidad. La ventaja de la representación con j es que ésta da una mejor aproximación a los estados de equilibrio de las ecuaciones de Navier-Stokes con números de Mach moderadamente pequeños. Esto se debe a que en los estados de equilibrio la ecuación de continuidad implica exactamente que $\nabla \cdot j = 0$.

Como hemos podido observar, existe una forma de recuperar todos los resultados importantes de la teoría cinética clásica, y a partir de ellos, poder obtener las ecuaciones de la hidrodinámica. Una vez que hemos logrado esto, en el siguiente capítulo trabajaremos con modelos que simulen fluidos en los distintos regímenes macrodinámicos que hemos mencionado. Mediante esas simulaciones podremos obtener los distintos parámetros introducidos en las ecuaciones de esta sección, como son la velocidad del sonido c_s (modelos HPP y FHP) y la viscosidad cinemática ν_c (FHP).

CAPITULO 4

SIMULACION NUMERICA DE LA HIDRODINAMICA CON GASES DE RED EN DOS DIMENSIONES.

1. INTRODUCCION.

Los modelos de gases en redes que describimos en la sección anterior han sido utilizados como formas alternativas para el estudio de diversos fenómenos hidrodinámicos. Entre ellos se encuentran las calles de von Karmann, la inestabilidad de Kelvin-Helmholtz y la inestabilidad de Rayleigh-Taylor, los cuales podemos ver en la figura 4.1.

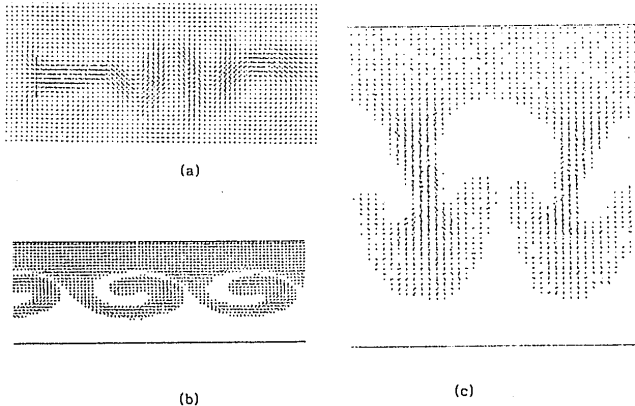


Fig.4.1. a) Calles de von Karmann, b) inestabilidad de Kelvin-Helmholtz, c) inestabilidad de Rayleigh-Taylor. (Tomadas de G. D. Doolen, 1989, p.p. 323. 340 y 419.)

En este capítulo obtendremos, mediante la simulación en computadora de los modelos HPP y FHP, como un primer estudio de ellos, la velocidad del sonido c_s para ambos modelos y la viscosidad cinemática ν_c para el modelo FHP.

En la sección 4.2 describimos la manera de implementar un autómata celular en una computadora, el significado físico que otorgamos a los sitios de la red, la forma como se lleva a cabo la evolución del gas en el tiempo y las características de la computadora que hemos empleado para realizar los experimentos. Describimos también ahí, la manera de implementar los operadores de traslación S , y de colisión C . En la sección 4.3 describimos explícitamente los experimentos que hemos llevado a cabo para los modelos HPP y FHP, y los resultados que con ellos obtuvimos.

2. IMPLEMENTACION DE MODELOS DE GASES DE RED EN UNA COMPUTADORA.

Los resultados que aquí daremos se obtienen al simular los modelos HPP y FHP, en una computadora personal ACER 1100N33. El tamaño de las redes que hemos usado es de $L_x = 305$, $L_y = 95$ sitios en el caso de HPP y de $L_x = 295$, $L_y = 100$ sitios en FHP. En esta máquina el algoritmo que empleamos y que se presenta más adelante actualiza del orden de 10^4 sitios por segundo. Todos los programas con los que efectuamos nuestros experimentos están escritos en Turbo Pascal.

La evolución temporal para estos modelos de gases de red se realiza por medio de un programa que sigue los 4 pasos necesarios de la definición de autómata celular:

- 1.- La simulación de una red discreta. En HPP es cuadrada y en FHP triangular.
- 2.- Un estado para cada sitio de la red

$$s(t,r) = (s_7(t,r), s_6(t,r), \dots, s_0(t,r)), \quad (4.1)$$

el cual es simulado en la computadora mediante una palabra de 8 bits, los cuales tienen una interpretación física que daremos más adelante.

3.- Una vecindad, la cual tiene una forma cuadrada en el caso de HPP y hexagonal para FHP (como se muestran en la figura 1 de la introducción).

4.- Una regla de evolución temporal, la cual consiste de una propagación de las partículas presentes en cada uno de los sitios de la red, seguida de una colisión, en la cual los nuevos estados de los sitios en la red son determinados como una función de sus

viejos estados de acuerdo a las reglas de colisión que nosotros imponemos.

Estos cuatro pasos que describiremos en detalle más adelante, son utilizados de manera general en la evolución temporal de los modelos HPP y FHP. Existen otros elementos, como son la configuración inicial, el tipo de condiciones de fronteras usadas y la existencia o no de obstáculos en la red, todos los cuales dependen del tipo de experimento que deseamos simular.

2.1. La red, los estados de los sitios y las vecindades.

Para llevar a cabo la simulación de los modelos HPP y FHP en la computadora, lo primero que debemos hacer es construir la red en donde se lleva a cabo la dinámica de éstos.

Los tipos de redes más sencillos que podemos implementar en una computadora son aquellos que tienen una forma rectangular, pues éstas se pueden simular fácilmente mediante un arreglo matricial. En este tipo de redes los sitios son etiquetados mediante un vector r de coordenadas (x,y) , con x e y enteros. Para el caso del modelo HPP, esta manera de identificación de los sitios en la red resulta natural, y podemos verla en la figura 4.2.

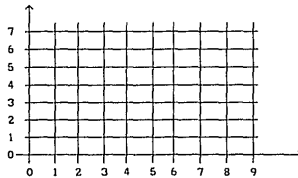


Fig. 4.2. Ubicación de los sitios en una red rectangular.

Para implementar el modelo FHP usaremos redes rectangulares y lo que haremos será tomar distintas reglas de propagación para líneas pares e impares. En la figura 4.3a. podemos ver la forma como se deforman las direcciones de propagación y en 4.3b. la forma en la que se transformarán ahora las trayectorias en la red triangular, (las trayectorias horizontales no cambian).

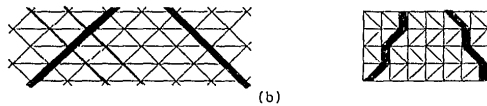
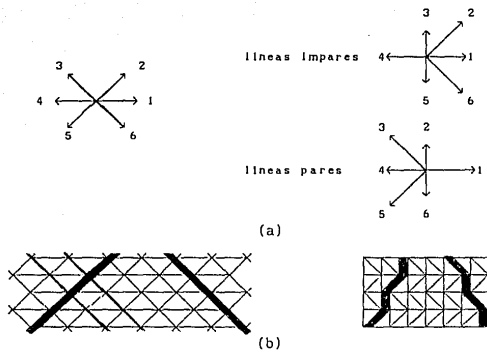
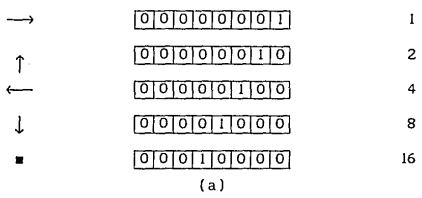


Fig.4.3. Deformación en una red triangular de a) las direcciones de propagación de las partículas, b) las trayectorias diagonales.

Una vez descrita la forma de la red sobre la que trabajaremos, lo siguiente es especificar el significado que daremos a los sitios en ésta, y el tipo de información de carácter físico que contendrán.

Como lo explicamos en el capítulo anterior, la configuración de velocidades para cualquier sitio en la red se especifica mediante el vector $s(t,r)$, formado de ceros y unos, y con 4 o 6 componentes dependiendo del modelo que estemos tratando (HPP o FHP). La forma de simular esto en la computadora, es mediante la identificación de la configuración $s(t,r)$ de cada sitio de la red con una palabra de 8 bits. De estos, 4 o 6 bits son usados para especificar la información de las velocidades de las partículas presentes en ese sitio. Uno de los bits que restan en la palabra, es usado para indicar si el sitio pertenece o no a un obstáculo (o a una pared). La manera como implementamos dicho código de 8 bits, en cada uno de los modelos usados, lo podemos ver en las figuras 4.4.



→	0 0 0 0 0 0 0 1	1
↗	0 0 0 0 0 0 1 0	2
↖	0 0 0 0 0 1 0 0	4
←	0 0 0 0 1 0 0 0	8
↙	0 0 0 1 0 0 0 0	16
↘	0 0 1 0 0 0 0 0	32
■	0 1 0 0 0 0 0 0	64

(b)

Fig.4.4. Código de velocidades para a)HPP y b)FHP. Las flechas indican las posibles direcciones de velocidades, para las partículas. El símbolo ■ la existencia de un obstáculo en un sitio de la red. La segunda columna muestra su implementación en código binario y la tercera el número en base 10 que tienen asociado las distintas velocidades de las partículas.

Como puede verse de las figuras anteriores, la configuración de velocidades en cada sitio de la red es un número en base 10 expresado en sistema binario. Para el modelo HPP la configuración de velocidades por sitio es un número entre 0 y 15, mientras que en el caso de FHP lo es entre 0 y 63. Los obstáculos tienen asignado el número 16 en el caso de HPP o 64 para FHP. El número 16 o el 64, dependiendo del modelo, debe ser sumado a los anteriores en caso de que el sitio sea un obstáculo. Esto quiere decir que en los sitios de la red, podemos tener conjuntamente, obstáculos y partículas. En la figura 4.5, damos algunos ejemplos de esta representación.

$$s(t,r) = \begin{array}{c} \uparrow \\ \leftarrow \blacksquare \rightarrow \end{array} = \boxed{0|0|0|1|0|1|1|1} = 23$$

(a)

$$s(t,r) = \begin{array}{c} \swarrow \\ \blacksquare \rightarrow \\ \searrow \end{array} = \boxed{0|1|0|1|0|1|0|1} = 85$$

(b)

Fig.4.5. Representación en código binario del posible estado de un sitio y su equivalencia con un número de base 10, para a) HPP y b) FHP.

2.2. La evolución temporal.

Continuando con la descripción de los cuatro pasos generales de la evolución temporal de un gas en una red, presentaremos ahora la forma en que se lleva a cabo la propagación y la colisión de las partículas.

Como mencionamos en la sección 3.2, la evolución temporal de un autómatas celular se efectúa de manera local y de acuerdo con la forma especificada por la ecuación (3.5). Esto quiere decir que para obtener el nuevo estado del sitio r al tiempo $t+1$, $s(t+1,r)$, deberíamos de aplicar el operador de evolución \mathcal{E} a las configuraciones de los sitios vecinos $\{s(t,r'), r' \in V_r\}$, de acuerdo con la ecuación (3.6). Por simplicidad y eficiencia en el proceso de cómputo, redefiniremos al operador de evolución como una propagación seguida de una colisión, esto es $\mathcal{E} = C \circ S$. Esta nueva forma del operador \mathcal{E} no afecta en nada los resultados obtenidos en el capítulo anterior, pues como mencionamos en la misma sección 3.2, cuando los tiempos de evolución son muy grandes, el efectuar primero una traslación o una colisión no tiene efectos significativos.

Comencemos por describir la forma en que se efectúa la propagación de las partículas presentes en la red. Debido a la interpretación física que hemos hecho de cada uno de los bits presentes en la configuración de velocidades de cada sitio $s(t,r)$, lo que tenemos que observar es cuales partículas (bits), que se encuentren presentes en las configuraciones de los vecinos cercanos del sitio r , al tiempo t , llegarán a este sitio en un tiempo posterior $t+1$. La manera como realizamos esto en la computadora, fue mediante un proceso como el siguiente:

I) Para el caso de HPP

$$s'(t+1,x,y) = [s(t,x-1,y) \text{ and } 1] \text{ or } [s(t,x+1,y) \text{ and } 4] \text{ or} \\ [s(t,x,y+1) \text{ and } 2] \text{ or } [s(t,x,y-1) \text{ and } 8] \text{ or} \quad (4.2) \\ [s(t,x,y) \text{ and } 16].$$

II) Para el caso de FHP, y debido a la deformación que hemos efectuado en la red, el procedimiento es:

a) Si y es par

$$s'(t+1,x,y) = [s(t,x-1,y) \text{ and } 1] \text{ or } [s(t,x+1,y) \text{ and } 8] \text{ or} \\ [s(t,x-1,y+1) \text{ and } 2] \text{ or } [s(t,x,y-1) \text{ and } 16] \text{ or} \quad (4.3) \\ [s(t,x,y+1) \text{ and } 4] \text{ or } [s(t,x-1,y-1) \text{ and } 32] \text{ or} \\ [s(t,x,y) \text{ and } 64].$$

b) Si y es impar

$$s'(t+1,x,y) = [s(t,x-1,y) \text{ and } 1] \text{ or } [s(t,x+1,y) \text{ and } 8] \text{ or} \\ [s(t,x,y+1) \text{ and } 2] \text{ or } [s(t,x+1,y-1) \text{ and } 16] \text{ or} \quad (4.4) \\ [s(t,x+1,y+1) \text{ and } 4] \text{ or } [s(t,x,y-1) \text{ and } 32] \text{ or} \\ [s(t,x,y) \text{ and } 64].$$

En los procedimientos descritos arriba, la pareja ordenada (x,y) representa al vector r en coordenadas cartesianas, los símbolos "and" y "or" representan los operadores lógicos de disyunción y conjunción, y $s'(t+1,x,y)$ es la configuración intermedia del sitio al tiempo $t+1$. A estos procesos lógicos, que consisten en comparar las expresiones binarias de números enteros (las configuraciones de velocidades del sitio r y sus vecinos), los llamamos enmascaramientos. El enmascaramiento del sitio r con el número 16 o el 64, se efectúa para determinar si existe o no un obstáculo en ese sitio, en los modelos HPP y FHP respectivamente.

Una vez que las partículas presentes en los sitios vecinos a r y que apuntan hacia él han sido trasladadas a dicho sitio, y que hemos obtenido el estado intermedio $s'(t+1,r)$, pasaremos a aplicarle a éste el operador de colisión, para así obtener el estado final en el sitio r al tiempo $t+1$. Este estado es evaluado mediante una tabla. Las tablas de colisiones que nosotros hemos empleado en HPP y FHP se construyen de manera que la masa y la cantidad de movimiento se conserven. Para el caso de colisiones entre obstáculos y partículas, las velocidades de éstas últimas son invertidas, pero la masa en r se sigue conservando. El procedimiento que usamos para la construcción de las tablas se encuentra especificado en el apéndice D. Las tablas construidas con dicho procedimiento son matrices de 2^5-1 renglones y una columna para el caso de HPP y 2^7-1 renglones y 3 columnas para FHP. La manera de usar las tablas, es la siguiente

a) para HPP

$$s(t+1,r) = \text{Tabla}[s'(t+1,r),1] \quad (4.5)$$

b) para FHP

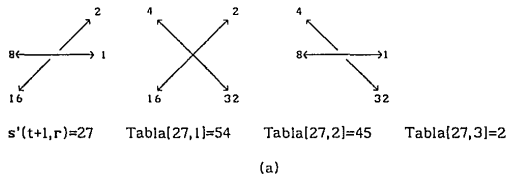
$$s(t+1,r) = \text{Tabla}[s'(t+1,r), \text{random}(\text{Tabla}[s'(t+1,r), N_{\max}]) + 1] \quad (4.6)$$

En estas expresiones Tabla denota a la matriz de colisiones. En el caso de HPP esta es una matriz columna, mientras que para FHP, N_{\max} es la última de sus columnas y la función random es tal que

$$0 \leq \text{random}(A) \leq A-1, \quad \text{con } A \in \mathbb{Z}^+. \quad (4.7)$$

La configuración intermedia $s'(t+1,r)$, que es además la configuración de entrada en el proceso de colisión, nos indica el número del renglón. $\text{Tabla}[s', N_{\max}]$ nos envía a la columna final de éste, en la cual se encuentra contenida la información del número de configuraciones de salida $s(t+1,r)$. El número aleatorio dado como segunda coordenada, nos indica el número de la columna elegida, que es siempre distinta de la última. Esta dirección, nos

indica el elemento de la matriz que tomaremos como configuración final para el sitio r al tiempo $t+1$. En la figura 4.6 damos un ejemplo de la manera como se realiza el procedimiento en el caso del modelo FHP.



$$s(t+1,r) = \text{Tabla}[27, \text{random}(\text{Tabla}[27,3])+1]$$

(b)

Fig.4.6. Uso de la tabla en el proceso de colisión. a) En la parte superior mostramos la configuración de entrada $s'(t+1,r)$ y sus posibles configuraciones de salida $s(t+1,r)$. En la parte inferior representamos la parte correspondiente a la matriz de colisiones que las representa. b) La forma que adquiere la ecuación (3.6) para este proceso en el caso de FHP.

La nueva configuración de la red al tiempo $t+1$, la obtendremos repitiendo los procesos de traslación y colisión para todos y cada uno de los sitios en ella.

Una vez que hemos descrito la forma como se efectúan los cuatro pasos generales de la evolución temporal para un gas de red, en la siguiente sección describiremos los experimentos que hemos realizado con los modelos HPP y FHP.

3. LOS EXPERIMENTOS.

Los experimentos que realizamos se hicieron en condiciones tales que pudimos usar las ecuaciones de los dos primeros regímenes macrodinámicos, obtenidos en la sección 3.7. El primero de ellos (la propagación del sonido), nos sirve para determinar la velocidad del sonido c_s en HPP. El segundo régimen (la propagación del sonido amortiguado), nos sirve para encontrar además de la velocidad del sonido c_s , el valor de la viscosidad cinemática $\nu(d)$ en FHP, ($d = \rho/b$ es la densidad, como se definió en la sección 3.4).

Las simulaciones experimentales en ambos modelos de gases de red, consisten en observar el comportamiento dinámico de una perturbación de el número de partículas ρ' , con respecto de un valor de equilibrio ρ_0 . Dicha perturbación ρ' es periódica y unidimensional. Enseguida explicaremos la manera en que hemos efectuado estos experimentos para cada una de los modelos en particular y cuales han sido los resultados obtenidos.

3.1. El modelo HPP.

Como ya mencionamos arriba, en el modelo HPP hemos simulado una propagación del sonido. Este régimen macrodinámico está descrito por la ecuación (3.97), que para una perturbación unidimensional en el número de partículas ρ' es

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \rho' - c_n^2 \frac{\partial}{\partial x^2} \rho' = 0. \quad (4.8)$$

Esta ecuación de onda puede ser resuelta por el método de variables separables, si proponemos que ρ' sea de la forma

$$\rho'(t,x) = \rho'_t(t) \cdot \rho'_x(x). \quad (4.9)$$

Las soluciones generales a esta ecuación son de la forma

$$\rho'_t(t) = A_1 \cos(\omega t + \phi) + A_2 \sin(\omega t + \phi), \quad (4.10)$$

$$\rho'_x(x) = B_1 \cos(k_x x) + B_2 \sin(k_x x), \quad (4.11)$$

donde A_1 , A_2 , B_1 y B_2 son constantes y la constante de fase $\phi = 0$ por sencillez. La frecuencia de oscilación ω y el número de onda k_x están relacionados por

$$k_x^2 = \frac{\omega^2}{c_n^2}. \quad (4.12)$$

Proponemos además que a $t=0$, las condiciones a la frontera sean

$$\rho'_x(0) = 0 \quad \text{y} \quad \rho'_x(L_x) = 0 \quad (4.13)$$

donde L_x es la longitud de la caja a lo largo del eje x. Puesto que las soluciones a la ecuación (4.11) son superposiciones de modos normales de oscilación, consideremos el segundo de ellos ($n = 2$) de modo que $k_x = 2\pi/L_x$, y la ecuación (4.11) tome la forma

$$\rho'_x(x) = B_2 \operatorname{sen} \left(\frac{2\pi}{L_x} x \right), \quad (4.14)$$

debido a las condiciones de frontera que hemos impuesto. La longitud onda es en este caso $\lambda = L_x$. Definiendo a τ como el período de oscilación, la velocidad del sonido para HPP es

$$c_s = \frac{L_x}{\tau}. \quad (4.15)$$

El tamaño de la caja donde realizamos el experimento es de $L_x = 305$ sitios de largo, por $L_y = 95$ sitios de ancho. La configuración de los sitios en los bordes de la caja es la de un obstáculo ($s(t,r) = 16$). La manera de implementar el perfil de onda especificado por la ecuación (4.14), en nuestra malla, fue tomando pequeñas regiones rectangulares de 5×5 sitios, a las que llamamos células. Esta células representarán a los "puntos macroscópicos" (α, ψ) , de tal manera que para nuestra caja $\alpha \in \{0, 1, \dots, 60\}$ e $\psi \in \{0, 1, \dots, 18\}$. Dada una densidad de equilibrio $d_0 = 0.5$ y una perturbación a ésta, de $d'_x = 0.1$ ($d_0 = \rho_0/b$ y $d'_x = \rho'_x/b$), la manera de proceder es la siguiente:

For $\psi = 0$ to 18 do
 For $\alpha = 0$ to 60 do

$$\rho(\alpha, \psi) = \operatorname{Round} \left\{ \left[0.5 + \left[0.1 \times \operatorname{sen} \left(\frac{\pi}{30} x \right) \right] \right] \times 100 \right\}; \quad (4.16)$$

El procedimiento anterior nos proporciona un determinado número de partículas ρ , que dependen del valor que tome α , y que se distribuyen de manera aleatoria dentro de los sitios de la red pertenecientes a la célula (α, ψ) . Recordemos que en cada sitio de la red podemos colocar hasta un máximo de 4 partículas con

diferentes velocidades. La forma que tiene la distribución de partículas en la red al tiempo $t = 0$ puede verse en la figura 4.7.

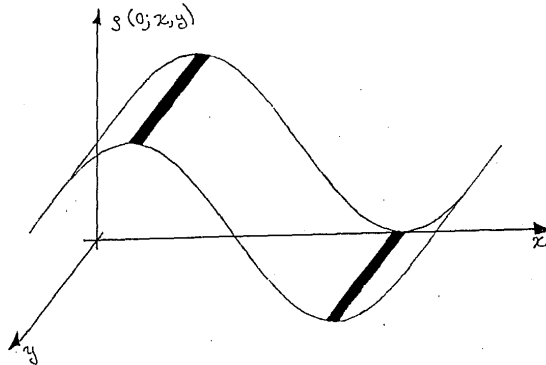


Fig.4.7 Configuración inicial de partículas $\underline{S}(0)$ en la red, para el modelo HPP. Las franjas más oscuras indican el lugar donde hemos tomado las medidas de la variación de $\rho(x, y)$ en el tiempo.

Si $x_0 = \text{constante}$, todas las células con esta abscisa tendrán el mismo número de partículas $\rho(x_0, y)$. Para cuantificar las variaciones que sufre $\rho(t, x, y)$ al transcurrir el tiempo, tomaremos diez de estas células con la misma coordenada x_0 , pero distinta y , de tal manera que lo que observamos son las variaciones de la densidad en una franja. Una de estas franjas se encuentra centrada en $x_0 = 15$ y la otra en $x_0 = 45$, que corresponden a las abscisas de la cresta y el valle de la onda a $t = 0$.

La configuración inicial $\underline{S}(0)$ de la red, se deja evolucionar en el tiempo, de acuerdo a los procesos de traslación y colisión de partículas descritos en la sección anterior. Cada diez pasos de tiempo, efectuamos un conteo del número de partículas presentes en cada una de las células de las franjas y tomaremos un promedio, el cual asignamos como valor a $\rho(t, x)$. En la figura 4.8 mostramos la gráfica de la densidad $d(t, x, y)$ contra el tiempo t , para una evolución del gas de 10300 tiempos. Cada punto de la gráfica es la densidad $d(t, x_0)$ de partículas presentes en una célula, la cual obtenemos al promediar sobre una franja con diez de ellas, y sobre un conjunto de diez distintas repeticiones del experimento, que es el número de veces que lo llevamos a cabo. Recordemos que se mide en la cresta y el valle de la configuración inicial de densidad como se muestra en la figura 4.7.

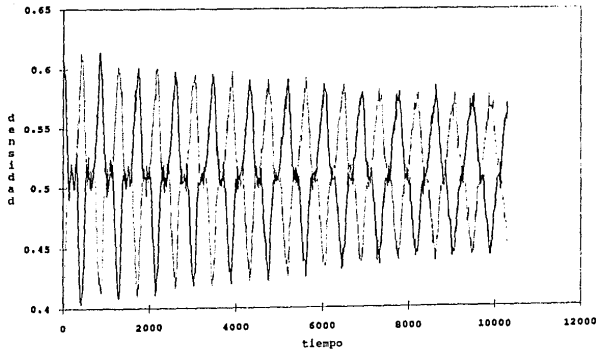


Fig.4.8. Gráfica de densidad contra tiempo en el modelo HPP. La densidad media $d_0 = 0.5$ y la perturbación $d' = 0.1$. La línea de trazo fuerte corresponde a medidas de la densidad hechas en la cresta $\alpha = 15$, mientras que la línea punteada corresponde a medidas hechas en el valle $\alpha = 45$.

Si observamos con cuidado la figura 4.8, podremos ver que la gráfica de densidad contra tiempo muestra un decaimiento exponencial hacia la densidad de equilibrio d_0 . Puesto que dicho decaimiento en d se efectúa de manera muy lenta en el tiempo, para el número de datos que nosotros hemos medido, podemos considerar que la amplitud de la onda no cambia en el tiempo y por lo tanto la ecuación (4.8) sigue siendo válida para nuestro experimento.

Haciendo un análisis de los datos que obtenemos para $d(t, \alpha, y)$ mediante la transformada rápida de Fourier, implementada en el paquete de programación MATLAB, encontramos que el período de oscilación es en este caso, para cada una de las realizaciones del experimento

$$\tau = 412.9 \text{ unidades de tiempo,}$$

mientras que la longitud de onda es

$$\lambda = 305 \text{ sitios.}$$

Con estos dos valores obtenemos que la velocidad del sonido es

$c_s = 0.7387$ sitios/unidad de tiempo,

que concuerda muy bien con el valor $c_s = 1/\sqrt{2} \approx 0.7071$, que es lo que teóricamente habíamos predicho en la sección 3.7. La ausencia de error en la medida de la velocidad del sonido se debe al hecho de que al analizar los datos de cada una de las repeticiones del experimento, con la transformada rápida de Fourier, el período que obtenemos es siempre el mismo. Sin embargo debemos mencionar que al efectuar el análisis primero sobre 256 datos, luego sobre 512 y finalmente sobre 1024 encontramos que los períodos fueron variando de manera tal que conforme aumentaba el número de datos, el período obtenido se aproximaba paulatinamente al que esperaríamos obtener de acuerdo con la teoría.

3.2. El modelo FHP.

En el caso del modelo FHP podemos simular una propagación del sonido que se amortigua. Utilizando las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento (3.99) y el hecho de que $D = 2$, el régimen de sonido amortiguado para este modelo se encuentra descrito para una perturbación unidimensional del número de partículas ρ' , por la ecuación

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \rho' - c_s^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho' - \nu(\rho_0) \frac{\partial^3}{\partial x^2 \partial t} \rho' = 0, \quad (4.17)$$

donde c_s es la velocidad del sonido y $\nu(\rho_0)$ la viscosidad cinemática. Al igual que en el caso estudiado arriba, para resolver esta ecuación diferencial por el método de separación de variables, propondremos que

$$\rho'(t, x) = \rho'_t(t) \cdot \rho'_x(x). \quad (4.18)$$

Esta suposición da origen a las siguientes dos ecuaciones diferenciales

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho'_x + k_x^2 \rho'_x = 0, \quad (4.19)$$

y

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \rho'_t + k_x^2 \nu(\rho_0) \frac{\partial}{\partial t} \rho'_t + k_x^2 c_s^2 \rho'_t = 0, \quad (4.20)$$

donde k_x es el número de onda.

Para encontrar la solución a la primera de estas ecuaciones, la cual tiene la misma forma que (4.8), proponemos que para $t=0$ las condiciones de frontera sean

$$\frac{\partial}{\partial x} \rho'_x(0) = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial}{\partial x} \rho'_x(L_x) = 0. \quad (4.21)$$

Al igual que en HPP, la ecuación (4.19) tendrá como solución una superposición de modos normales. Tomando el primero de ellos ($n = 1$), de modo que $k_x = \pi/L_x$ y

$$\rho'_x(x) = B_1 \cos\left(\frac{\pi}{L_x} x\right). \quad (4.22)$$

con L_x el tamaño en x de la caja. La longitud de onda dada es en este caso $\lambda = 2L_x$. Si nuevamente definimos como τ el período de oscilación, la velocidad del sonido para FHP sigue estando dada por la ecuación (4.15).

Por otro lado, para resolver la ecuación (4.20), propondremos que ésta tenga una solución de la forma

$$\rho'_t = \exp(\alpha(\rho_0)t), \quad (4.23)$$

con lo cual obtenemos una ecuación característica

$$\alpha^2 - k_x^2 v(\rho_0) \alpha + k_x^2 c_s^2 = 0, \quad (4.24)$$

con discriminante

$$k_x^4 v^2 - 4k_x^2 c_s^2 < 0. \quad (4.25)$$

El que el discriminante sea menor que cero, es un hecho que obtenemos de manera experimental y que más adelante mostraremos. Definiendo

$$-4\omega^2 = k_x^4 v^2 - 4k_x^2 c_s^2, \quad (4.26)$$

encontramos que la solución general para ρ'_t tiene la forma

$$\rho'_t = \left[A_1 \cos(\omega t) + A_2 \operatorname{sen}(\omega t) \right] \exp \left\{ - \frac{K^2 \nu(\rho_0)}{2} t \right\}. \quad (4.27)$$

De esta última ecuación obtenemos que la viscosidad cinemática está dada por

$$\nu(\rho_0) = \frac{2\alpha(\rho_0)L_x^2}{\pi^2}. \quad (4.28)$$

El proceso de implementación y de medición para FHP, es esencialmente el mismo que el usado para HPP. Los cambios consisten, en que ahora las longitudes de la caja son $L_x = 295$ y $L_y = 100$ sitios y el procedimiento con el cual creamos la configuración inicial de la malla $\underline{S}(0)$, dado por la ecuación (4.22), es ahora:

For $y = 0$ to 19 do

For $x = 0$ to 58 do

$$\rho(x, y) = \operatorname{Round} \left\{ \left[\rho_0 + \left[0.1 \times \cos \left(\frac{\pi}{58} x \right) \right] \right] \times 150 \right\}; \quad (4.29)$$

Al igual que antes, este procedimiento nos proporciona el número de partículas en la célula (x, y) , las cuales distribuiremos de manera aleatoria entre los sitios dentro de ella, 25 en total.

En este procedimiento tomaremos diferentes densidades de equilibrio ($d_0 = \rho_0/b$), de manera que $d_0 = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ y 0.6 , pues para el caso de FHP nos interesa saber como varia la viscosidad cinemática ν como función de la densidad de equilibrio d_0 . Las franjas de 10 células sobre las cuales se efectúan las mediciones de $\rho(t, x, y)$, se encuentran a ahora en $x_0 = 8$ y $x_1 = 50$. Para cada una de las diferentes densidades de equilibrio d_0 , el tiempo de duración de la simulación es de 9000. Se ejecutaron 10 repeticiones de cada una de estas simulaciones para la misma d_0 . Debemos de destacar el hecho de que, aún cuando la forma de la onda es la misma para cada una de estas repeticiones, la configuración inicial $\underline{S}(0)$ de la red no lo es, en principio. Esto se debe a la manera en que distribuimos las partículas entre los sitios de una célula, la cual es aleatoria. El perfil que tiene la onda inicialmente ($t = 0$) se muestra en la figura 4.9.

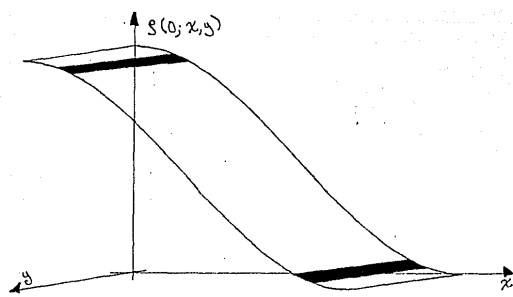


fig.4.9. Configuración inicial de partículas $S(0)$ en la red, para el modelo FHP. Las franjas más oscuras indican el lugar donde hemos tomado las medidas de la variación de $\rho(x, y)$ en el tiempo.

La forma que adquiere la función $d(t, x, y)$ al evolucionar en el tiempo se muestra en la figura 4.10. Puesto que el comportamiento $d(t, x, y)$ es esencialmente el mismo para todas las densidades, mostramos sólo el comportamiento para $d_0 = 0.4$. Cada punto de esta gráfica es, al igual que para la figura 4.8, la densidad de partículas presentes en una célula, obtenido de promediar sobre una franja que contiene a diez de ellas, y sobre un conjunto de diez repeticiones del experimento. De manera similar a lo que se realiza con el modelo HPP, las medidas de densidad se llevan a cabo cerca de la cresta y del valle de la configuración inicial de densidad como se muestra en la figura 4.9.

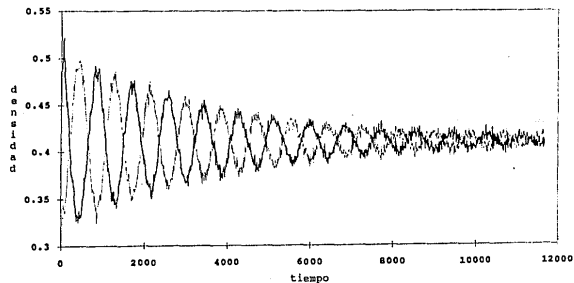


Fig.4.10. Gráfica de densidad contra tiempo en el modelo FHP. La densidad media $d_0 = 0.4$ y la perturbación $d' = 0.1$. La línea de trazo fuerte corresponde a medidas de la densidad hechas en la cresta $\alpha = 8$, mientras que la línea punteada corresponde a medidas hechas en el valle $\alpha = 50$.

Los datos obtenidos de estas simulaciones se analizan con la transformada rápida de Fourier, para cada una de las densidades d_0 . En todos y cada uno de los experimentos que realizamos con este modelo, el período obtenido fue

$$\tau = 787.4 \text{ unidades de tiempo.}$$

La longitud de onda es

$$\lambda = 590 \text{ sitios,}$$

por lo que la velocidad del sonido que obtenemos con estos datos es

$$c_s = 0.7493 \text{ sitios/unidad de tiempo,}$$

que de nuevo concuerda con la velocidad predicha teóricamente ($c_s = 0.7071$). La ausencia de error en la medida de la velocidad del sonido, se debe al hecho de que al analizar los datos de todos los experimentos realizados para las diferentes densidades medias d_0 , mediante la transformada de Fourier rápida, el período que obtenemos es siempre el mismo de manera similar a como ocurrió en HPP. El fenómeno observado en HPP, referente al hecho de que al aumentar el número de datos con el cual se efectúa el análisis de Fourier de la serie temporal, el período obtenido se aproximaba paulatinamente al que esperaríamos obtener de acuerdo con la teoría, vuelve a repetirse también en FHP.

Observando las gráfica de $d(t,x,y)$ contra t , vemos que la perturbación de la densidad d' , tiende a anularse y por lo tanto d tiende a su valor de equilibrio d_0 . Este hecho se debe a la existencia de una viscosidad cinemática ν_c , la cual depende del valor d_0 . Para determinar el valor que tiene la viscosidad, para cada uno de las distintas d_0 , analizaremos los datos de las gráficas de la manera siguiente. Tomando los puntos en la gráfica que se encuentren separados por un múltiplo entero de $\tau/2$ de la primera cresta (o valle), construimos una nueva gráfica de $\ln(d)$ contra t . Puesto que el período que hemos obtenido arriba no es un múltiplo entero de 10, que es el intervalo mínimo de tiempo en el cual efectuamos las medidas de la densidad, tomaremos a $\tau = 790$ y le asociaremos error $\delta\tau = \pm 10$, este error introducido en el período nos produce un error en la densidad que nunca es mayor de $\delta d\% = 5\%$. Como mencionamos anteriormente la pendiente de la recta que obtenemos en esta gráfica, a la cual llamamos α , se encuentra relacionada con la viscosidad cinemática $\nu(d_0)$ de la manera especificada por la ecuación (4.28). En la figura 4.11 mostramos

la gráfica de $\ln(d)$ contra t , para la densidad media de $d_0 = 0.4$. En dicha gráfica tomamos valores de la densidad hasta 600 tiempos únicamente. Hacemos esto para asegurar que la amplitud del "ruido" que se observa en la gráfica de d vs. t , no tenga un tamaño comparable a la amplitud de las crestas o valles de la misma gráfica y afecte de manera significativa el valor de la pendiente $\alpha(d_0)$. Esta pendiente se obtiene ajustando una recta por mínimos cuadrados a los datos obtenidos en la gráfica de $\ln(d)$ vs. t que se muestran en la figura 4.11, (una para \blacksquare y otra para \triangle). El mismo procedimiento se aplica a los datos obtenidos para las diferentes densidades d_0 con las cuales hemos efectuado nuestros experimentos.

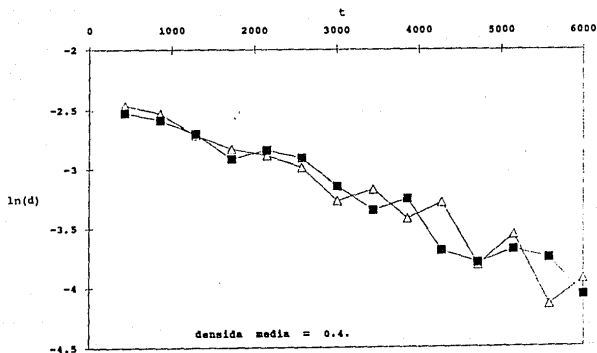


Fig.4.11. Gráfica de $\ln(d)$ vs. t , para una densidad media de $d_0 = 0.4$. Los \blacksquare corresponden a las medidas tomadas en $\alpha = 8$, donde originalmente se encontraba la banda cercana a la cresta de ρ_0 y los \triangle corresponden a las medidas tomadas en $\alpha = 50$ en la banda cercana al valle de ρ_0 .

Los datos para $\nu_c(d_0)$ que obtenemos con este método de análisis se encuentran reportados en la tabla 4.1, para los distintos valores de d_0 con que trabajamos y para las medidas realizadas en las bandas cercanas a la cresta y al valle. Tomando en cuenta los valores en los errores introducidos en las medidas del período $\delta\tau$ y de la densidad δd y la forma en que estos se propagan, encontramos que el máximo error asociado a las medidas de la viscosidad cinemática reportadas en la tabla 4.1, es del 15%. En la figura 4.15, se muestra la forma de la gráfica de ν_c vs. d_0 .

TABLA 4.1

d_0 $\left(\frac{\text{partículas}}{\text{sitios}^2}\right)$	$\nu(d_0)_{\text{cresta}}$ $\left(\frac{\text{sitios}^2}{\text{u. tiempo}}\right)$	$\nu(d_0)_{\text{valle}}$ $\left(\frac{\text{sitios}^2}{\text{u. tiempo}}\right)$
0.1	140.98	140.98
0.2	87.03	88.77
0.3	62.66	57.44
0.4	48.73	48.73
0.5	38.29	36.55
0.6	45.25	43.51

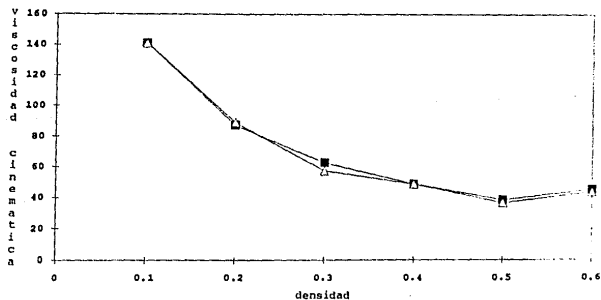


Fig.4.12. Gráfica de ν_c vs. d_0 , para el modelo FHP que toma en cuenta todas las posibles colisiones entre 2, 3 y 4 partículas. Los ■ son las medidas realizadas en la banda cercana a la cresta de ρ_0 , mientras que los △ son para la banda cercana al valle.

Aún cuando la gráfica 4.15, tiene una forma parecida a la que se encuentra reportada en trabajos de d'Humière & Lallemand, 1987, y Hasslacher, 1988, para el modelo FHP que considera únicamente colisiones entre 2 y 3 partículas, en la literatura no se reportan gráficas de v_c vs. d_0 para el modelo FHP que nosotros hemos simulado en el presente trabajo. En el siguiente capítulo haremos un análisis de estos resultados y daremos las conclusiones generales al trabajo.

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

CAPITULO 5

CONCLUSIONES

Los resultados que hemos obtenido en el capítulo anterior, muestran la concordancia entre la simulación del flujo de fluidos con gases de red y la teoría que los describe, la cual desarrollamos en el capítulo 3. Aún cuando solo hemos trabajado con 2 de los tres regímenes descritos en la sección 3.7, estos nos sirven para ilustrar las bondades de la técnica de simulación de fluidos con autómatas celulares.

Dentro de las ventajas que este método de simulación presenta, se encuentran, su sencillez para realizar simulaciones hidrodinámicas, la cual se debe a la simplicidad de los códigos de computadora que se utilizan; la gran rapidez para realizar cálculos, que se debe al hecho de que todos y cada uno de los bits de la memoria son igualmente importantes, pues todo lo que uno necesita saber es si existe o no una partícula con determinada dirección de velocidad para un bit dado, (principio de exclusión). Además todas las operaciones para realizar dicha testificación son de carácter lógico. Puesto que al hacer medidas en un gas de red, lo que hacemos es básicamente un conteo de partículas, en ellas no existirán errores. La implementación de condiciones de frontera se realiza de manera sencilla, y no requiere de mucho tiempo de cómputo, (nosotros hemos utilizado únicamente la inversión de las direcciones de velocidad de las partículas, pero también se pueden simular reflexiones especulares y difusivas).

Por otro lado, el principio de exclusión que antes nos produjo un eficiente uso de la memoria también representa una limitación, pues restringe los sistemas bajo estudio a aquellos que son descritos por una función de distribución de Fermi-Dirac. Esto provoca una dependencia de la velocidad en la ecuación de estado para velocidades pequeñas $p = \frac{1}{2}d\left(1 - \frac{1}{2}v^2\right)$, donde p es la presión, d la densidad y v la rapidez del flujo, lo cual se relaciona con el hecho, de que los modelos de gases de red pierden la invariancia ante las transformaciones de Galileo, como vimos en la sección 3.5.

Las restricciones de no poder simular flujos con números de Mach mayores a 1.5, de tener un rango restringido del número de Reynolds o la imposibilidad para simular fenómenos térmicos, que

presentan los modelos con una única rapidez para todas las partículas ($|c_i| = 1$), como los que nosotros hemos descrito y usado en el presente trabajo, desaparecen al introducir distintas rapideces para las partículas.

Lo realizado en este trabajo pretende ser una introducción a la técnica de gases de red para la simulación hidrodinámica. Muchas de las limitaciones mencionadas arriba pueden ser salvadas con equipos de cómputo más poderosos, los cuales constituyen además una herramienta muy útil para el estudio de fenómenos más complejos e interesantes que los tratados aquí. Pero no es sólo en el terreno de la mecánica de fluidos donde las técnicas de autómatas celulares han ido ganando importancia, como lo demuestran investigaciones recientes en otras áreas de la investigación científica. Es por ello que en trabajos posteriores trataremos de profundizar más en el estudio y la aplicación de esta nueva técnica con máquinas computadoras más sofisticadas.

APENDICES.

A. PROPIEDADES DE SIMETRIA DE VECTORES Y TENSORES.

Las suposiciones introducidas en la sección (3.2) para los autómatas celulares no determinísticos, tienen consecuencias importantes en las transformaciones de vectores y tensores. Comencemos por definir a \mathcal{G} como el grupo cristalográfico de isometrías que preservan globalmente al conjunto de vectores de velocidad. Definimos un tensor como \mathcal{G} invariante si este es invariante bajo cualquier isometría en \mathcal{G} . Un conjunto i -dependientes de tensores de orden p , $\{T_i = t_{i_1 i_2 \dots i_p}, i = 1, \dots, b\}$ se dice que es \mathcal{G} invariante si para cualquier isometría en \mathcal{G} que cambie c_i en c_j , esta también cambia T_i en T_j . El momento de velocidad de orden p se define como $\sum_i c_{i_1} c_{i_2} \dots c_{i_p}$. De aquí se sigue que

- P.1. Invariancia de Paridad. El conjunto de vectores de velocidad es invariante bajo inversiones espaciales.
- P.2. Cualquier conjunto de vectores i -dependientes $v_{i\alpha}$, el cual es \mathcal{G} invariante, es de la forma $\lambda c_{i\alpha}$.
- P.3. Cualquier de tensores i -dependientes $t_{i\alpha\beta}$, el cual es \mathcal{G} invariante, es de la forma $\lambda c_{i\alpha} c_{i\beta} + \mu \delta_{\alpha\beta}$.
- P.4. Isotropía del tensor de segundo orden. Cualquier tensor \mathcal{G} invariante $t_{\alpha\beta}$ es de la forma $\mu \delta_{\alpha\beta}$.
- P.5. Cualquier tensor de tercer orden \mathcal{G} invariante es nulo.
- P.6. Momentos de velocidad. Los momentos de velocidad de orden impar son nulos. El segundo momento de velocidad está dado por

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = \frac{b c^2}{D} \delta_{\alpha\beta}. \quad (A.1)$$

Consideremos los siguientes tensores

$$E_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n}^{(n)} = \sum_i (c_i)_{\alpha_1} \dots (c_i)_{\alpha_n} \quad (A.2)$$

los cuales están determinados en un autómata celular por la elección de las direcciones de velocidad de las partículas c_i .

Estos tensores serán invariante bajo el grupo de simetrías discretas de la red si son totalmente simétricos en sus índices espaciales, y sin ninguna otra condición. Los $E^{(n)}$ deben tener $\binom{n+d-1}{n}$ componentes independientes en un espacio de dimensión D.

Ahora bien los tensores isotrópicos $E^{(n)}$ obtenidos con un conjunto de M vectores c_i en un espacio de dimensión D, deben ser de la forma

$$E^{(2n+1)} = 0 \quad (A.3)$$

$$E^{(2n)} = \frac{M}{d(d+2) \cdots (d+2d-2)} \Delta^{(2n)} \quad (A.4)$$

donde

$$\Delta^{(2)} = \delta_{\alpha\beta} \quad (A.5)$$

$$\Delta^{(4)} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\epsilon} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\epsilon} + \delta_{\alpha\epsilon} \delta_{\beta\gamma} \quad (A.6)$$

En general $\Delta^{(2n)}$ consiste de la suma de todos los $(2n-1)!!$ productos del símbolo de la delta de Kronecker para los posibles pares de índices dados por la relación recursiva

$$\Delta_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n}^{(2n)} = \sum_{j=2}^{2n} \delta_{\alpha_j \alpha_1} \Delta_{\alpha_2 \dots \alpha_{j-1} \alpha_{j+1} \dots \alpha_n}^{(2n-2)} \quad (A.7)$$

Para un conjunto de vectores isotrópicos c_i , se encuentra a partir de la relación (A.2) que

$$\frac{1}{M} \sum_i (c_i \cdot v)^{2n} = Q_{2n} |v|^{2n} = \frac{(2n-1)!!}{d(d+2) \cdots (d+2n-2)} |v|^{2n} \quad (A.8)$$

y de manera similar que

$$\frac{1}{M} \sum_i (c_i \cdot v)^{2n} c_i \cdot v = Q_{2n} |v|^{2n} v \quad (A.9)$$

En algunos modelos de autómatas celulares, los cuales simulan fluidos, se considerarán partículas con velocidades c_i de magnitudes distintas entre si. Los tensores relevantes en tal caso son

$$E_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n}^{(n)} = \sum_i w(|c_i|^2) c_{i\alpha_1} \cdots c_{i\alpha_n} \quad (A.10)$$

Los pesos $w(|c_i|^2)$ se determinan típicamente a partir de los coeficientes en la expansión en serie de la ecuación de "Boltzmann" para soluciones en equilibrio local.

Si consideramos un conjunto de vectores unitarios c_i que correspondan a los vértices de un polígono regular de M lados

$$c_i = \left(\cos \frac{2\pi i}{M}, \sin \frac{2\pi i}{M} \right) \quad (A.11)$$

con $i = 1, \dots, M-1$ y M lo suficientemente grande. Cualquier tensor $E^{(2)}$ construido a partir de dichos c_i debe ser isotrópico.

La siguiente tabla muestra las condiciones necesarias de M para obtener tensores isotrópicos. En general se puede mostrar que $E^{(n)}$ es isotrópico sí y sólo si, los enteros $n, n-2, n-4, \dots$, no dividen a M . Así por ejemplo, $E^{(n)}$ debe ser isotrópico siempre y cuando $n > M$.

TABLA 1. Condiciones para que los tensores $E^{(n)}$ sean isotrópicos, con los vectores de la red c_i elegidos para corresponder a los vértices de un polígono regular de M lados.

$E^{(2)}$	$M > 2$
$E^{(3)}$	$M \geq 2, M \neq 3$
$E^{(4)}$	$M > 2, M \neq 4$
$E^{(5)}$	$M \geq 2, M \neq 3, 5$
$E^{(6)}$	$M > 4, M \neq 6$
$E^{(7)}$	$M \geq 2, M \neq 3, 5, 7$

B. CANTIDADES MEDIAS.

Para poder demostrar las relaciones de conservación enunciadas en la sección 3.4, ecuaciones (3.31) y (3.32), recurriremos a un "truco" que nos hará ver de manera sencilla dichas relaciones. Como se menciona ya en la sección 3.2, para describir los posibles estados de un autómata celular, como los que aquí hemos estado tratando, debemos recurrir a un espacio de fases Γ , el cual hemos definido como el conjunto de todas las posibles asignaciones de la función $\underline{S}(t)$, o configuraciones de la red. Dicho conjunto de configuraciones es cerrado bajo los operadores de traslación y colisión definidos en la misma sección. Ahora bien, cuando dichos operadores son, como en caso del modelo HPP, totalmente determinísticos y por lo tanto invertibles, la conservación de la probabilidad se expresa como

$$P(t+1, \underline{S}(t+1)) = P(t, \mathcal{E}^{-1} \underline{S}(t)) \quad (B.1)$$

donde $P(t+1, \underline{S}(t+1))$ es la probabilidad de tener una configuración $\underline{S}(t+1)$ al tiempo $t+1$, la cual cumple con la ecuación de normalización (3.4). Como \mathcal{E} consta de los dos operadores S y C , podemos escribir de manera alternativa la ecuación anterior como

$$P(t+1, S \underline{S}(t+1)) = P(t, C^{-1} \underline{S}(t)) \quad (B.2)$$

Para el caso en que el operador de evolución \mathcal{E} no es totalmente determinístico (el operador de traslaciones S es siempre determinístico, mientras que el operador de colisiones C , puede en algunos casos, como el del modelo FHP, no serlo). Debemos ampliar el espacio de probabilidades para incluir no sólo el espacio fase de configuraciones iniciales, sino también el espacio de todas las posibles elecciones de las variables booleanas $e(ss')$, las cuales para cada tiempo y nodo seleccionan una única transición a partir de un estado inicial s dado. Puesto que las e son elegidas independientemente a cada tiempo, la evolución temporal del autómatas es un proceso de Markov. Para construir dicha evolución, tomemos una posible configuración de la red $\underline{S}(t)$, la cual puede evolucionar a una configuración $\underline{S}'(t+1)$, que ocurre si cada vector $s(t, r)$ de la malla evoluciona de manera independiente a cada uno de los vectores $s'(t+1, r)$, que es determinado por las variables $e_{ss'}$ (cuyo promedio sobre el conjunto representativo es $A(s(t, r) \rightarrow s'(t+1, r))$, de donde obtenemos el producto sobre todos los sitios de la red de la probabilidad de transición $A(s \rightarrow s')$. Como en el espacio fase Γ existen varias configuraciones $\underline{S}(t)$ que pueden evolucionar a $\underline{S}'(t+1)$, debemos sumar sobre todas ellas. Por ello es que la probabilidad al tiempo $t+1$, de tener una configuración propagada $\underline{S}'(t+1)$, está dada por

$$P(t+1, S \underline{S}'(t+1)) = \sum_{\underline{S} \in \Gamma} \prod_{r \in \mathbb{Z}^d} A(s(t, r) \rightarrow s'(t+1, r)) P(t, \underline{S}(t)) \quad (B.3)$$

Si ahora utilizamos esta ecuación y la definición de cantidad media, sobre las ecuaciones (3.24) y (3.25), obtendremos que

$$\begin{aligned} \sum_i f_i(t+1, r+c_i) &= \sum_i \langle s_i(t+1, r+c_i) \rangle \\ &= \sum_i \sum_{\underline{S}' \in \Gamma} s_i(t+1, r+c_i) P(t+1, S \underline{S}'(t)) \\ &= \sum_i \sum_{\underline{S}' \in \Gamma} s_i(t+1, r+c_i) \sum_{\underline{S} \in \Gamma} \prod_{r \in \mathbb{Z}^d} A(s \rightarrow s') P(t, \underline{S}(t)) \\ &= \sum_i \sum_{\underline{S}' \in \Gamma} s_i(t+1, r+c_i) P(t, \underline{S}(t)) \sum_{\underline{S} \in \Gamma} \prod_{r \in \mathbb{Z}^d} A(s \rightarrow s') \end{aligned}$$

Pero el último término es uno si tomamos en cuenta que

$$\sum_{i=1}^n (\prod_{j=1}^m x_{ij}) = \sum_{j_1, \dots, j_m=1}^n (\prod_{i=1}^n x_{ij_i})$$

y

$$\sum_{\underline{s} \in \Gamma} A(s(t,r) \cdot s'(t+1,r)) = 1.$$

De esta manera

$$\begin{aligned} \sum_i f_1(t+1, r+c_i) &= \sum_{\underline{s} \in \Gamma} \sum_i s_i(t+1, r+c_i) P(t, \underline{s}(t)) \\ &= \sum_{\underline{s} \in \Gamma} \sum_i s_i(t,r) P(t, \underline{s}(t)) = \sum_i \langle s_i(t,r) \rangle \\ &= \sum_i f_1(t,r). \end{aligned} \quad \text{q.p.d.}$$

De igual manera se puede demostrar la ecuación (3.32).

C. EL TEOREMA H PARA GASES DE RED.

Como ya se menciona en el primer capítulo de éste trabajo, el teorema H se encarga de mostrar la tendencia de un gas a estados de equilibrio estable. Para encontrar dicho resultado en los gases de red, debemos recordar que en ellos las partículas están sometidas a un principio de exclusión y son indistinguibles, por ello es la estadística de Fermi-Dirac la que debemos aplicar en este caso, y por lo tanto, analizar el comportamiento de la siguiente cantidad

$$\sum_{i=1}^b N_i \ln(N_i) + (1-N_i) \ln(1-N_i) \quad (C.1)$$

Donde N_i será la probabilidad de que una partícula del gas se encuentre en el sitio de posición r , con una velocidad en la dirección i al tiempo t , mientras que $(1-N_i)$ es la probabilidad de que ocurra lo contrario. Antes de enunciar el teorema H, definiremos ciertas cantidades y demostraremos algunos lemas que nos serán de utilidad.

Definamos a $p(s(t,r))$ como la probabilidad de tener un estado inicial s en la posición r al tiempo t . Esta probabilidad cumple que

$$\sum_s p(s(t,r)) = 1 \quad (C.2)$$

por lo que en terminos de ella las N_1 serán

$$N_1(t, r) = \sum_s s_1 p(s(t, r)) \quad (C.3)$$

$$1 - N_1 = \sum_s (1 - s_1) p(s(t, r))$$

De manera similar a la anterior, podemos definir una probabilidad para los estados finales o de salida $s'(t+1, r)$, y con ella las cantidades $N_1'(t+1, r)$ y $(1 - N_1'(t+1, r))$.

Si como en la sección 3.1, llamamos $A(s \rightarrow s')$ a la probabilidad de que un estado inicial $s(t, r)$ cambie a algun estado final $s'(t+1, r)$ por medio de una colisión, entonces

$$p(s'(t+1, r)) = \sum_s p(s(t, r)) A(s \rightarrow s') \quad (C.4)$$

Donde $A(s \rightarrow s')$ cumple obviamente con las dos condiciones impuesta en la misma sección.

$$\sum_{s'} A(s \rightarrow s') = 1$$

y también

$$\sum_s A(s \rightarrow s') = 1$$

que no son otras que las condiciones de balance semi-detallado. Luego de haber definido estas cantidades, procederemos a demostrar algunos lemas, en los cuales intervienen de manera explícita las cantidades anteriores.

LEMA 1. Si $f(x)$ es una función convexa, entonces

$$\sum_{s'} f(p'(s'(t+1, r))) \leq \sum_s f(p(s(t, r)))$$

PRUEBA:

Desigualdad de Jensen: Sea f una función convexa sobre un intervalo abierto (a, b) , sean $x_i \in (a, b)$. Si $\alpha_i > 0$ y $\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1$, entonces

$$f\left(\sum_{i=1}^n \alpha_i x_i\right) \leq \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i)$$

Aplicando esta desigualdad a $p'(s')$ y $p(s)$, e identificando a las α_1 con las $A(s'(t+1,r)+s(t,r))$, de la propiedad de balance semi-detallado $\left(\sum_{s'} A(s \rightarrow s') = \sum_s A(s \rightarrow s') = 1 \right)$, obtenemos que

$$\begin{aligned} \sum_{s'} f(p'(s')) &= \sum_{s'} f\left(\sum_s p(s) A(s \rightarrow s')\right) \leq \sum_{s'} \sum_s A(s \rightarrow s') f(p(s)) \\ &= \sum_s \left(\sum_{s'} A(s \rightarrow s')\right) \cdot f(p(s)) = \sum_s f(p(s)) \quad \text{q.p.d.} \end{aligned}$$

LEMA 2. La siguiente desigualdad es válida

$$\sum_{s'} p'(s'(t+1,r)) \ln(p'(s'(t+1,r))) \leq \sum_s p(s(t,r)) \ln(p(s(t,r)))$$

PRUEBA:

La función $f(x) = x \ln(x)$, es una función convexa ($d^2 f/dx^2 > 0$) por lo tanto podemos aplicarle el lema anterior a las cantidades

$$f(p'(s')) = p'(s') \ln(p(s)) \quad \text{y} \quad f(p(s)) = p(s) \ln(p(s)),$$

y entonces substituyendo en la ecuación del lema anterior obtener el resultado deseado.

LEMA 3. La siguiente desigualdad es válida

$$\sum_s p(s(t,r)) \ln(p(s(t,r))) \geq \sum_{i=1}^b \{N_i(t,r) \ln(N_i(t,r)) + [1 - N_i(t,r)] \cdot \ln(1 - N_i(t,r))\}.$$

La igualdad se da si y sólo si

$$p(s_1, \dots, s_b) = \prod_{i=1}^b N_i^{s_i} (1 - N_i)^{(1-s_i)}$$

PRUEBA:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^b [N_i \ln N_i + (1-N_i) \ln(1-N_i)] &= \sum_{i=1}^b \left\{ \sum_s s_i p(s) \ln N_i + \right. \\ &\quad \left. \sum_s (1-s_i) p(s) \ln(1-N_i) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^b [N_i \ln N_i + (1-N_i) \ln(1-N_i)] &= \sum_{s=1}^b \sum_{i=1}^s s_i p(s) \ln N_i + (1-s_i) p(s) \ln(1-N_i) \\
&= \sum_{s=1}^b \sum_{i=1}^s [s_i \ln N_i + (1-s_i) \ln(1-N_i)] p(s) \\
&= \sum_{s=1}^b \left\{ \sum_{i=1}^s \ln \left[N_i^{s_i} \cdot (1-N_i)^{(1-s_i)} \right] \right\} p(s) \\
&= \sum_{s=1}^b p(s) \ln \left\{ \prod_{i=1}^s N_i^{s_i} \cdot (1-N_i)^{(1-s_i)} \right\}
\end{aligned}$$

Construyamos ahora la cantidad

$$x = \left\{ \frac{\prod_{i=1}^b N_i^{s_i} (1-N_i)^{(1-s_i)}}{p(s)} \right\}$$

Para cualquier x no negativa : $\ln x \leq x - 1$; donde la igualdad es valida solamente si $x = 1$. De aquí que

$$\begin{aligned}
\ln \left\{ \frac{\prod_{i=1}^b N_i^{s_i} (1-N_i)^{(1-s_i)}}{p(s)} \right\} &\leq \left\{ \frac{\prod_{i=1}^b N_i^{s_i} (1-N_i)^{(1-s_i)}}{p(s)} \right\} - 1 \\
p(s) \ln \left\{ \frac{\prod_{i=1}^b N_i^{s_i} (1-N_i)^{(1-s_i)}}{p(s)} \right\} &\leq \prod_{i=1}^b N_i^{s_i} (1-N_i)^{(1-s_i)} - p(s)
\end{aligned}$$

si ahora sumamos sobre todas las s

$$\sum_s p(s) \ln \left\{ \frac{\prod_{i=1}^b N_i^{s_i} (1-N_i)^{(1-s_i)}}{p(s)} \right\} \leq \sum_s \prod_{i=1}^b N_i^{s_i} (1-N_i)^{(1-s_i)} - \sum_s p(s)$$

las dos sumatorias del lado derecho son ambas iguales a uno, la última por definición de probabilidad y para la primera debido a que se cumple el teorema del binomio, esto es

$$\sum_{s_1=1}^s N_1^{s_1} (1-N_1)^{(1-s_1)} = \begin{bmatrix} b \\ b \end{bmatrix} N_1^b (1-N_1)^0 + \begin{bmatrix} b \\ b-1 \end{bmatrix} N_1^{(b-1)} (1-N_1)^1 + \dots \\ \dots + \begin{bmatrix} b \\ 1 \end{bmatrix} N_1^1 (1-N_1)^{(b-1)} + \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} N_1^0 (1-N_1)^b \\ = (N_1 + (1-N_1))^b = 1$$

por lo tanto

$$\sum_s p(s) \ln \left[\frac{\prod_{i=1}^b N_1^{s_i} (1-N_1)^{(1-s_i)}}{p(s)} \right] \leq 0,$$

o,

$$\sum_s p(s) \ln \left[\prod_{i=1}^b N_1^{s_i} (1-N_1)^{(1-s_i)} \right] - \sum_s p(s) \ln (p(s)) \leq 0.$$

q.p.d.

La igualdad se cumple si $x = 1$, esto es

$$x = \left[\frac{\prod_{i=1}^b N_1^{s_i} (1-N_1)^{(1-s_i)}}{p(s)} \right] = 1.$$

Esta última relación corresponde a la aproximación de Boltzmann, pues nos dice que la probabilidad de tener el evento conjunto $s=(s_1, \dots, s_b)$, es igual al producto de las probabilidades de tener los eventos individuales e independientes s_i . Puesto que las s_i son variables Booleanas ($s_i=1$ o 0), al ponerlas como exponentes aseguramos que el producto sea no nulo. Podemos ahora enunciar y demostrar los siguientes teoremas:

El teorema H (local).

Si las reglas de colisión satisfacen balance-semidetallado y la aproximación a Boltzmann, se cumple entonces la desigualdad

$$\sum_{i=1}^b [N_1^i \ln(N_1^i) + (1-N_1^i) \ln(1-N_1^i)] \leq \sum_{i=1}^b [N_1^i \ln(N_1^i) + (1-N_1^i) \ln(1-N_1^i)] \quad (C.5)$$

Esto se demuestra fácilmente utilizando los lemas 2 y 3 que hemos enunciados arriba.

Para encontrar un teorema global, sumemos sobre todos los sitios de la red la ecuación (C.1), (recordemos que en la aproximación a Boltzmann los estados del sistema son homogéneos). Si denotamos por r el número obtenido al sumar sobre todas las posiciones de velocidad y todos los sitios de la red, encontramos la siguiente relación

$$\sum_{j=1}^r [N^{(j)} \ln(N^{(j)}) + (1-N^{(j)}) \ln(1-N^{(j)})] \quad (C.6)$$

$$\leq \sum_{j=1}^r [N^{(j)} \ln(N^{(j)}) + (1-N^{(j)}) \ln(1-N^{(j)})].$$

Debemos observar que ésta suma permanece invariante bajo una propagación. Por lo tanto podemos extender el teorema un número arbitrario de pasos de tiempo y así obtener (bajo las mismas hipótesis que para el teorema H local)

El teorema H (global).

La función

$$\sum_{j=1}^r [N^{(j)} \ln N^{(j)} + (1-N^{(j)}) \ln(1-N^{(j)})] \quad (C.7)$$

no crece cuando un gas de red evoluciona en el tiempo.

Haciendo ahora la sencilla identificación de las N_i con las f_i , y sustituyendo dicha variable en las ecuaciones de los Teoremas H (local y global), obtendremos los resultados deseados, los Teoremas H para gases en redes, los cuales nos muestran claramente la tendencia de estos sistemas a estados de equilibrio temporal.

D. CONSTRUCCION DE LA TABLA DE COLISIONES.

Para construir nuestras tablas de colisiones para los modelos HPP y FHP, partiremos de la interpretación física que dimos a los bits de una palabra, de ocho de ellos, en la sección 4.1 y de la ecuación (3.1) la cual nos dice que

$$c_i = \left(\cos\left(\frac{2\pi(i-1)}{b}\right), \sin\left(\frac{2\pi(i-1)}{b}\right) \right),$$

con $b = \begin{cases} 4 & \text{para HPP.} \\ 6 & \text{para FHP.} \end{cases} \in i \text{ modulo } b.$

Con estos resultados y el hecho de que la configuración de velocidades para cada uno de los sitios de la red es un número entero entre 0 y $2^{b+1}-1$ (entre 0 y 141 para HPP, y 0 y 191 para FHP), construimos el siguiente procedimiento general

Programa Tabla.

(Este programa construye la tabla de colisiones, utilizando para ello dos procedimientos internos. El primero de ellos que llamaremos Lógico, calcula la masa y la cantidad de movimiento de las configuraciones de velocidades para los sitios de la red. El segundo llamado Inversión, invierte las direcciones de velocidad de las configuraciones de los sitios.)

Procedimiento Lógico(número, masa, px, py);

Inicio

masa = 0;

px = 0;

py = 0;

For $j = 0$ to $(b - 1)$ do

Inicia

mascara = (1 shl j) and número;

If mascara > 0 Then

inicia

masa = masa + 1;

px = px + $\cos\left(\frac{2\pi j}{b}\right)$;

py = py + $\sin\left(\frac{2\pi j}{b}\right)$;

fin;

FIN;

Fin;

Procedimiento Inversión(número);

Constantes

derecha = $2^{b/2} - 1$;

izquierda = $2^b - 2^{b/2}$;

obataculos = 2^b ;

Inicio

mascaraderecha = (número and derecha) shl $\left(\frac{b}{2}\right)$;


```

mascaraizquierda = (número and izquierda) shr  $\left(\frac{b}{2}\right)$ ;
Inversión = mascaraderecha or mascaraizquierda or obstaculo;
Fin;

INICIO
  For  $i = 0$  to  $2^{b+1}-1$  do

  Inicio
    n = 0;      (n es el número de salidas)
    salida[n] = i;
    Lógico(i, masai, pxi, pyi);

    If  $i \leq 2^b-1$  then
      (esta primera parte compara las masa y la cantidad de movimiento
      de dos configuraciones, simulando la colisión entre partículas)
      Inicio
        For  $k = 0$  to  $2^b-1$  do
          Lógico(k, masak, pxk, pyk);
          If [(masai = masak) and (pxi = pxk) and (pyi = pyk)] then
            inicio
              n = n + 1;
              salida[n] = k;
            fin
          fin
        Fin
      Else
        (en esta segunda parte se invierten las velocidades de las
        partículas, simulando las colisiones de partículas y obatacuíos)
      Inicio
        n = n+1;
        salida[n] = Inversión(i);
      Fin;
    Fin;

  Fin;

FIN.

```

Como podemos ver, esta tabla tiene cuando menos, para cada "entrada", una salida que es la misma "entrada". La tabla que construimos con este programa, es una matriz de $2^{b+1}-1$ renglones y $N_{\max} + 1$ columnas. N_{\max} = máximo (n) , donde n representa el número de salidas (configuraciones finales después de realizada la colisión), que tiene cada número de entrada i (configuración inicial por sitio). Para varios de los números de entrada i , habrá salidas que estarán vacías, pues su configuración de velocidades no cambiará al realizarse la colisión. En la columna $N_{\max} + 1$ de cada renglón i , pondremos el número de posibles salidas que no estén vacías. La configuración de "salida" que tendrá un sitio después de llevarse a cabo la colisión, la tomaremos de manera aleatoria del conjunto de posibles salidas (columnas), que no estén vacías para esa "entrada" (renglón i).

Chapman, 1952.

S. Chapman & T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge University, Cambridge, 1952.

Doolen, 1989.

G.D. Doolen, *Lattice Gas Methods for Partial Differential Equations*, G.D. Doolen editor, Los Alamos, New Mexico, 1989.

Dorfman, 1977.

J.R. Dorfman & A van Beijeren, *The Kinetic Theory of Gases*, Plenum Press, U.S.A., 1977.

Frisch et al., 1986.

U. Frisch, B. Hasslacher & Y. Pomeau, *Phys. Rev. Lett.*, 56, (1986), 1505.

Frisch et al., 1987.

U. Frisch, D. d'Humière, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau & J.P. Rivet, *Complex Systems*, 1, (1987), 649.

Gatignol, 1984.

R. Gatignol, "Théorie Cinétique des Gaz à Répartition Discrète des Vitesses", *Lectures Notes in Physics*, 36, Springer, Berlín, 1984.

Hardy & Pomeau, 1972.

J. Hardy & Y. Pomeau, *Thermodynamics and Hydrodynamics for a Modeled Fluid*, *J. Math. Phys.*, 13, (1972), 1042.

Hardy et al., 1973.

J. Hardy, Y. Pomeau & O. de Pazzis, *J. Math. Phys.*, 14, (1973), 1746.

Hardy et al., 1976.

J. Hardy, Y. Pomeau, & O. de Pazzis, *Phys. Rev.*, A13, (1976), 1946.

Harris, 1971.

S. Harris, *An Introduction to the Theory of the Boltzmann Equation*, Holt, Rinehart & Winston, U.S.A., 1971.

Hasslacher, 1987.

B. Hasslacher, *Los Alamos Science Special Issue*, (1987), 1505.

Huang, 1963.

K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons, U.S.A., 1963.

Lifshitz, 1981.

E.M. Lifshitz & L.P. Pitaevskii, *Physical Kinetics*, Pergamon, Gran Bretaña, 1981.

Majda, 1984.

A. Majda, *Compressible Fluid Flow and Systems of Conservation Laws in Several Space Variables*, Springer, Berlín, 1984.

MatLab,
MatLab, Manual del Usuario, Borlan International, U.S.A., 1987.

Nayfeh, 1981.
A. H. Nayfeh, Introduction to Perturbation Techniques, Wiley, New York, 1981.

Rechtman & Salcido,
R. Rechtman & A. Salcido, Thermodynamic Entropy and Temperature of a Nine Velocities Lattice Gas Automaton, Discrete Models of Fluid Dynamics, A. S. Alves editor, World Scientific, 1991.

Roberts & Varberg, 1973.
A.W. Roberts & D.E. Varberg, Convex Functions, Academic Press, USA, 1973.

Turbo Pascal, 1987.
Turbo Pascal, Manual del Usuario, Borlan International, U.S.A., 1987.

von Neumann, 1966.
J. von Neumann, Theory of Self-Reproducing Automata, Univ. of Illinois, U.S.A., 1966.

Wirth, 1983.
N. Wirth, Systematic Programing (An Introduction), Fac. Ciencias, U.N.A.M., México, 1983.

Wolfram, 1983.
S. Wolfram, Reviews of Modern Physics, 55, (1983), 601.

Wolfram, 1986.
S. Wolfram, J. Stat. Phys., 45, (1986), 471.

Wood, 1987.
S. Wood. Turbo Pascal Versión 3.0, Osborne/McGraw-Hill, México, 1987.