

BREVE DESCRIPCION DEL AUTOMATA CELULAR LATTICE GAS (LGAC)

Jesús Abel Vera Cruz
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de estudios superiores Acatlán
Lic. Matemáticas Aplicadas y Computación
XXI Verano de Investigación
Universidad Autónoma de Puebla
Departamento de aplicación de Microcomputadoras
Instituto de Ciencias

25/Agosto/2011

Índice

1. Introducción	3
2. AUTÓMATA CELULAR	4
2.1. Juego de la vida	4
2.2. Autómata celular lineal	5
3. AUTOMATA CELULAR LATTICE GAS (LGAC)	9
3.1. EL NUMERO DE REYNOLDS	10
3.2. El MODELO LGAC HPP	12
3.3. El MODELO LGAC FHP	15

1. Introducción

En 1986 Uriel Frisch, Brosl Hasslacher, y Yves Pomeau demostraron que el movimiento interno de un fluido, no tiene que ser tan detallado como la dinámica molecular real, con el fin de dar lugar a la mecánica de fluido realista. En cambio, un fluido puede ser construido por partículas ficticias con igual masa y moviéndose con la misma rapidez, y diferenciando solo su movimiento (vector velocidad). Además de los desplazamientos de las partículas ficticias se restringen a un conjunto finito, incluso, la construcción de un fluido en dos dimensiones, solo se necesitan 6 desplazamientos. El autómata celular Lattice-Gas [LGAC] es un método para la simulación del flujo de un fluido, que es muy diferente a la dinámica molecular por un lado y los métodos basados en la discretización de ecuaciones diferenciales parciales (el flujo de un fluido lleva a ecuaciones diferenciales parciales no lineales) por otro lado. El flujo de un fluido incompresible puede ser descrito por la ecuación de Navier-Stokes.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u \nabla)u = -\nabla P + \nu \nabla^2 u \quad (1)$$

junto con la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (2)$$

donde

∇ : operador nabla

u : velocidad del fluido

$P = \frac{p}{\rho_0}$ presión cinemática

p : presión

ρ_0 : densidad de masa (constante)

ν : viscosidad cinemática de corte (medida de la velocidad a la que un impulso se transmite en un fluido)

Diferentes fluidos como el aire, agua o aceite son característicos por tener diferentes valores de masa, densidad y viscosidad. Los flujos incompresibles de estos fluidos obedecen de la misma forma a la ecuación de Navier-Stokes, mientras que sus interacciones microscópicas son muy diferentes. La ecuación de Navier-Stokes es no lineal con u como velocidad, lo que prohíbe una solución analítica a excepción de unos pocos casos.

2. AUTÓMATA CELULAR

El concepto de autómata celular surge con el interés del científico Jhon vonn Neumann en los sistemas autorreproductivos (maquinas que se puedan reproducirse a si mismas manteniendo un buen funcionamiento con partes poco confiables), con la ayuda del científico Stanislaw Ulam, vonn Neumann desarrollo un modelo matemático que resultó ser un autómata celular.

vonn Neumann formuló un modelo en dos dimensiones, que consiste en un plano cuadrulado infinito en el cual el estado de cada célula (celda) depende de las células de alrededor de ella en partícular la célula inmediata superior, inferior, derecha e izquierda, (células ortogonales, vecindad de Neumann)y 29 estado para cada célula. Figura(1)

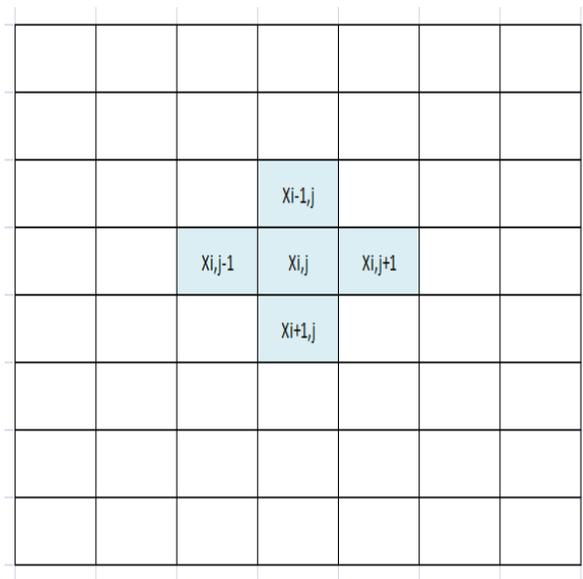


Figura (1) Modelo de Neumann

Considerando 2 estados y 2 vecinos tenemos $(k=2 \ r=2) \ k^{2(2)+1} = 32$ vecindades y 2^{32} reglas diferentes de evolución. lo que da una idea del potencial que tiene los autómatas en 2 dimensiones para modelar sistemas reales (flujo de un fluido).

2.1. Juego de la vida

El juego de la vida es un autómata celular en dos dimensiones, creado por el matemático John Horton Conway en 1970 y recuperado por Martin Gardner en el número de octubre de 1970 de la revista Scientific American. El modelo que Conway diseñó contempla una vecindad diferente a la utilizada por Nuemman, la vecindad de Moore que aparte de considerar los 4 vecinos en células ortogonales, considera los vecinos en las diagonales, dando un total de 8 células, con una vecindad de 9 células las reglas que siguen este autómata para evolucionar son muy sencillas y se describen a continuación.

En un espacio con células vivas

- 1)Una célula con 1 o 0 vecinos se muere.
 - 2)Una célula con 4 o más vecinos tambien muere
 - 3)Una célula con 2 o 3 vecinos sobrevive
- En un un espacio con células muertas
- 1)Cada célula con tres vecinos se reproduce.

Estas sencillas reglas llevan a comportamientos muy interesantes en el autómata, como por ejemplo configuraciones como las "still lifes".^{es} decir que a lo largo de la evolución no cambian, o configuraciones que solo desaparecen pasadas un gran número de evoluciones. En la figura (2) se muestra el juego de la vida hecho en un programa llamado Game of life.

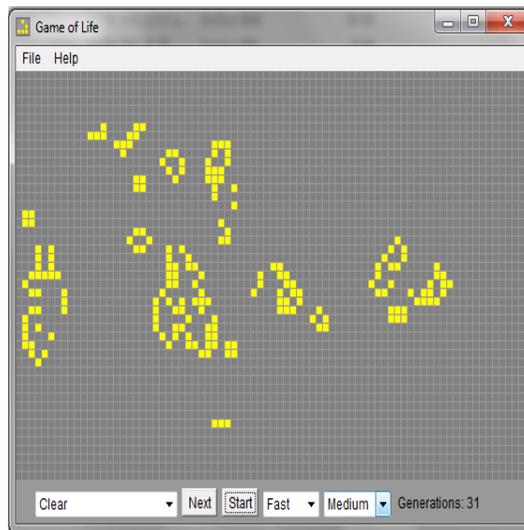


Figura (2) Evolución del juego de la vida en el programa Game of life

2.2. Autómata celular lineal

El autómata celular lineal a diferencia de los de dos dimensiones consta de un arreglo unidimensional células (celdas), en la cual cada célula toma un valor de un conjunto de estados finitos K , la célula modificará ese valor dependiendo de las células vecinas a cada lado y de si misma este cambio lo hace en tiempo discretos, considerando esto cada vecindad tendrá $2r + 1$ células siendo r el radio de vecindad, por ejemplo si $r=1$, entonces cada 3 células (bloque de vecindad) generan una nueva célula, de esta manera tenemos k^{2r+1} vecindades diferentes. El mapeo $k^{2r+1} \rightarrow K$, este mapeo quiere decir que cada vecindad va asignarle un estado del conjunto K a una célula, a esto se le llama regla de evolución. En la Figura (3) se muestra este proceso considerando $k=2$ (2 estados 0 o 1) y $r=1$.

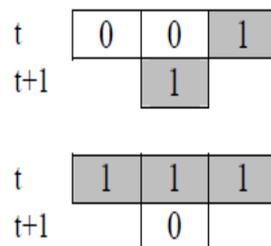


Figura (3) Posible mapeo de un autómata celular lineal $k=2$ y $r=1$

En la Figura (4) se muestra una evolución de un autómata (2,1) Regla 110 (Clasificación de Wolfram) hecha en el programa NXLCAU21 desarrollado por el Dr. Harold V. McIntosh.

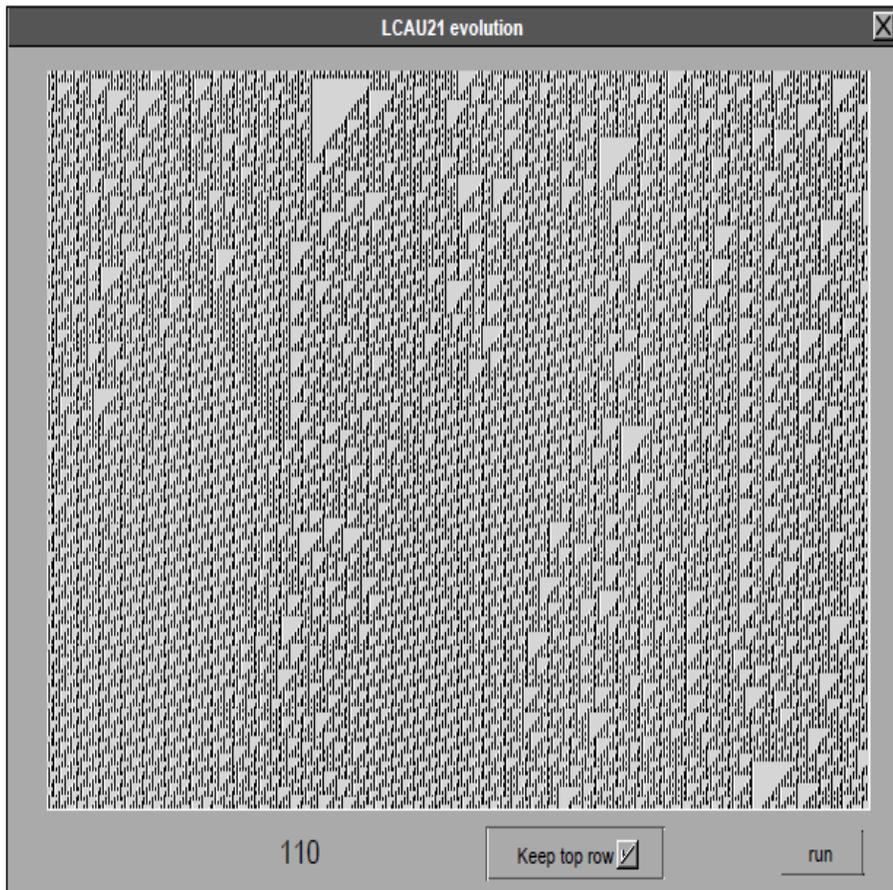


Figura (4) Evolución de autómata celular lineal $k=2$ y $r=1$ Regla 110

Esta regla de evolución se formó a partir del mapeo $k^{2r+1} \rightarrow K$ de la manera siguiente. Figura(5)

Potencias de 2	Decimal de vecindad	Vecindad			Evolución
		4	2	1	
1	0	0	0	0	0
2	1	0	0	1	1
4	2	0	1	0	1
8	3	0	1	1	1
16	4	1	0	0	0
32	5	1	0	1	1
64	6	1	1	0	1
128	7	1	1	1	0
suma =	110				

Figura (5) Regla 110

Teniendo en cuenta esta relación de evolución, tenemos que el número de reglas diferentes va a ser $k^{k^{2r+1}}$, en este caso si $k=2$ y $r=1$ vamos a tener 2^8 reglas de evolución diferentes con 8 posibles vecindades. El estudio de este tipo de autómatas (2,1) tomó más relevancia con las investigaciones de Stephen Wolfram. Otra característica de este tipo de autómatas, es que se pueden estudiar con diferentes herramientas como la teoría de grafos que permite obtener un entendimiento más claro de como evoluciona el autómata, por ejemplo uno de los conceptos más útiles es el diagrama de Bruijn que es un grafo que representa los traslapes de las vecindades parciales del autómata, básicamente es un grafo de la evolución del autómata, Figura(6).

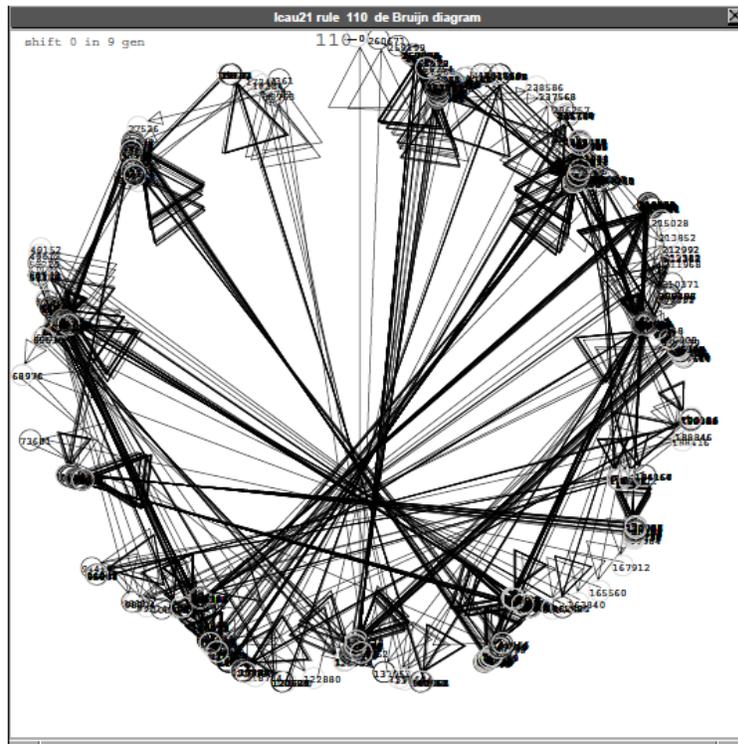


Figura (6) Diagrama de Bruijn de regla 110. 9 generaciones 0 corrimientos

3. AUTOMATA CELULAR LATTICE GAS (LGAC)

Al considerar los fluidos como partículas ficticias, podemos imaginarlas en una red hexagonal Figura (7).

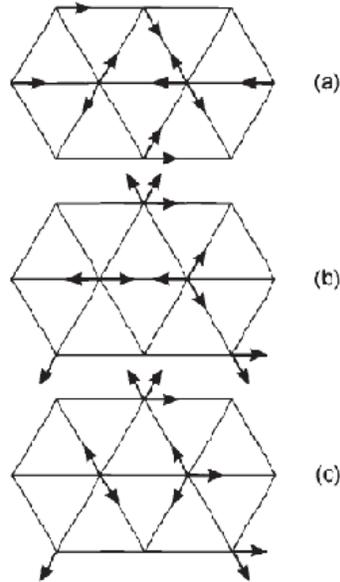


Figura (7). *Modelo de un fluido simple*

La red está inicialmente preparada para que no más de una partícula se mueva con una velocidad determinada en un sitio determinado de la red Figura 7(a). Entonces en cada generación la partícula se mueve en su dirección un solo sitio de la red Figura 7(b). La dispersión a causa del movimiento se muestra en la Figura 7(c). Si dos o más partículas llegan al mismo sitio, pueden chocar, algunas colisiones pueden causar que las partículas se dispersen, esto es su velocidad cambia, mientras otras no. Sin embargo las colisiones no cambian el número total de partículas, ni el vector suma de sus velocidades, masa y momento son conservados. Este modelo es llamado Lattice-Gas. La conservación de momento en conjunción con la masa, permite obtener una ecuación que describe la evolución de estas cantidades en el modelo.

3.1. EL NUMERO DE REYNOLDS

Los flujos con velocidades pequeñas son suaves y son llamados flujos laminar, a velocidades altas se convierten en flujos turbulentos, imagine que tenemos un tubo con en la Figura 8 (a) y tenemos dos fluidos, uno transparente, que abarca todo el volumen del tubo, y un fluido de color, que es inyectado en algún punto del tubo, si el fluido transparente se mueve a una velocidad pequeña veremos que al inyectar el fluido de color, éste se mueve en línea recta. Pero si el fluido transparente se mueve a una velocidad alta e inyectamos el fluido de color, veremos que éste se mueve de una manera turbulenta Figura 8 (b).



Figura 8 (a).



Figura 8 (b).

La transición de flujo laminar a flujo turbulento de un fluido no depende solo de la velocidad. Considere el flujo más allá de un obstáculo, como una esfera, un cilindro o una placa. El campo de flujo dependerá de la velocidad upstream (término que se refiere ir contra corriente en un río, "aguas arriba") (U) y el tamaño lineal del obstáculo (L). El fluido es caracterizado por la velocidad cinemática (v). Estos tres parámetros U, L y v se expresan en

$$\frac{\text{longitud}}{\text{tiempo}}, \quad \text{longitud} \quad \text{y} \quad \frac{\text{longitud}^2}{\text{tiempo}}$$

. respectivamente. Estos tres parámetros define el número de Reynolds.

$$Re = \frac{UL}{v}$$

El número de reynolds es un número sin dimensiones. Los parámetros U y L se pueden adaptar a todas las cantidades de la ecuación de Navier-Stokes de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} u' &= \frac{u}{U} \\ x' &= \frac{x}{L} \\ \nabla' &= L \cdot \nabla \\ \nabla'^2 &= L^2 \cdot \nabla^2 \\ t' &= t \cdot \frac{u}{L} \end{aligned}$$

Insertando las cantidades escaladas en la ecuación de Navier-Stokes obtenemos la siguiente expresión.

$$\frac{\partial u'}{\partial t'} + (u' \nabla') u' = -\nabla' P' + \frac{1}{Re} \nabla'^2 u' \quad (3)$$

La ecuación (3) no contiene ningún tipo de escala y solo una cantidad sin dimensiones, es decir el número de Reynolds. Así que dado un tipo de flujo (flujo alrededor de una esfera) la velocidad a escala de un flujo estacionario dependerá sólo de la coordenada espacial a escala y el número de Reynolds.

$$u' = \frac{u}{U} = f_u\left(\frac{x}{L}, Re\right) \quad (4)$$

donde la función

$$f_u$$

depende del tipo de flujo. Lo mismo es cierto para la presión a escala

$$p' = \frac{P}{U^2} = f_p\left(\frac{x}{L}, Re\right) \quad (5)$$

En consecuencia todos los flujos del mismo tipo pero con diferentes valores de U, L y ν son descritos por la misma solución no dimensional (u, p) , si sus números de Reynolds son iguales. Todos estos flujos se dicen que son dinámicamente similares.

El valor del número de Reynolds proporciona una estimación de la importancia relativa de las fuerzas no viscosas y viscosas. El gradiente de presión (diferencia de presión entre dos puntos) por lo general juega un papel pasivo, que se están creando en el flujo como consecuencia de los movimientos de una frontera rígida o de la existencia de tensiones de fricción. Así, los flujos se caracterizan por la magnitud relativa de la advección (variación de un escalar en un punto por efecto de un escalar) y las fuerzas viscosas:

$$\frac{|(u\nabla)u|}{|\nu\nabla^2u|} \approx \frac{U \cdot L}{\nu} = Re \quad (6)$$

Flujos con pequeños números de Reynolds ($Re \ll 1$) son laminares, Von Karman Vortex streets (Patrón repetitivo de molinos causados por la inestabilidad de un flujo sobre un cuerpo), son observados en valores intermedios ($Re \approx 100$) y flujos turbulentos ocurren en números de Reynolds muy altos ($Re \gg 1$).

El hecho que los flujos puedan ser caracterizados por el número de Reynolds y la ley de la similitud dinámica provee la liga entre flujos en el mundo real donde las longitudes son medidas en metros y la simulación de estos flujos con LGAC, sobre un lattice con una red de longitud unitaria y rapidez unitaria. En estos modelos la viscosidad es una cantidad sin dimensiones ya que se expresan en unidades de longitud de la red y rapidez del lattice. Estos flujos adimensionales en el lattice son similares a flujos reales, cuando sus números de Reynolds son iguales.

3.2. EL MODELO LGAC HPP

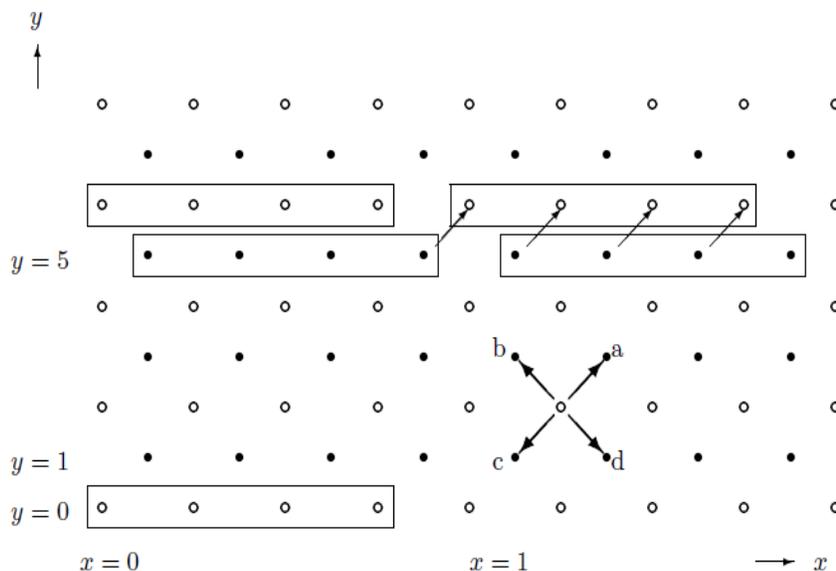
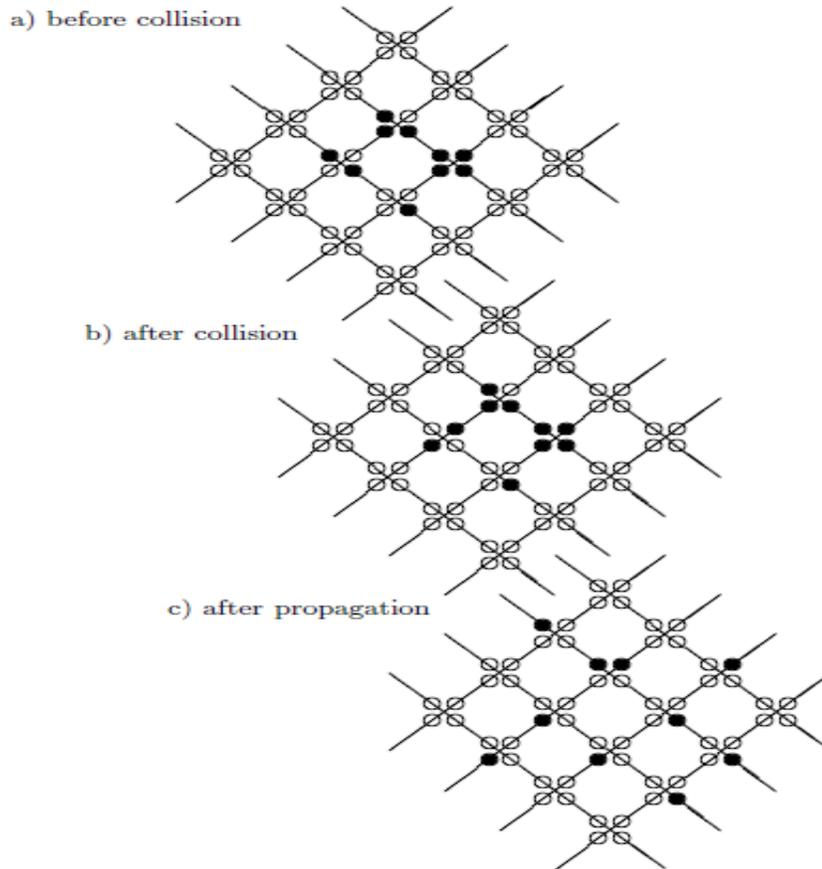


Figura (9) Las 4 flechas etiquetadas por a,b,c y d indica el lattice velocities c_i . Las partículas son intercambiadas entre los puntos negros y los puntos blancos del sub-lattice (tablero de ajedrez)

El primer LGAC fue propuesto en 1973 por Hardy, de Pazzis y Pameau. Es conocido como HPP que son las iniciales de los tres autores. El HPP es el LGAC más simple, y actualmente sólo es de interés para explicar el funcionamiento del LGAC. HPP es un LGAC de dos dimensiones sobre un lattice cuadrado. Los vectores c_i para $i = 1, 2, 3, 4$ conectan con el vecino más cercano Figura (10) y son llamados *lattice vector* o *lattice velocities*. Más preciso el lattice velocities esta dado por el lattice vector dividido por el tiempo de transición Δ_t que siempre será igual a 1. Por lo tanto los lattice vector y los lattice velocities tienen diferentes dimensiones pero el mismo valor numérico. El significado de c_i se puede reconocer fácilmente por el contexto respectivo. En cada sitio (nodo) hay cuatro células, cada una asociada a una liga con el vecino más próximo. Estas células pueden estar vacías o ocupadas a lo más por una partícula. Este principio de exclusión es característico de los LGAC. Esto lleva a la distribución de equilibrio tipo Fermi-Dirac. Todas las partículas tienen la misma masa que por simplicidad será 1 y son indistinguibles. La evolución en el tiempo es determinística y procede como una alternancia de colisiones locales C (sólo partículas del mismo nodo son involucradas) y transmisiones S (también llamados propagación), a lo largo de los enlaces correspondientes a los vecinos más cercanos. El operador ε es definido como la composición de colisiones con transmisiones.

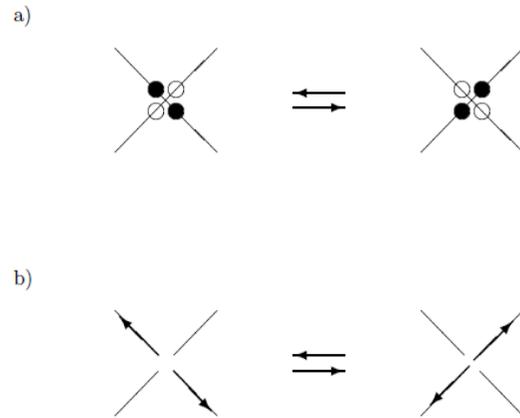
$$\varepsilon = S \circ C \quad (7)$$



Figura(10) Colisión y propagación, Círculos rellenos indican células ocupadas y círculos en blanco células vacías.

- a) Parte del lattice antes de la colisión, solo hay una configuración de colisión (2 partículas de lado opuesto en el mismo nodo)
- b) Después de la colisión, la configuración

A cada partícula un momento y magnitud mc_i es asignado. La colisión debería conservar masa y momento mientras cambian la ocupación de las células. Para el modelo HPP hay una sola configuración de colisión. Cuando dos partículas entran a un nodo de direcciones opuestas y las otras dos células están vacías, una colisión se lleva a cabo y las partículas giran 90° en el mismo sentido, Figura (11). Las demás configuraciones permanecen sin cambios durante el paso de la colisión. En cada transición las partículas se intercambian entre el sub-lattice que consiste de puntos con índices pares (sub-lattice blanco) y el sub-lattice que consiste de puntos impares (sub-lattice negro) como un tablero de ajedrez. Por lo tanto existe dos poblaciones de partículas desacopladas de la red. Este desacoplamiento es característico del lattice cuadrado. El modelo HPP no obedece como se desea a la ecuación de Navier-Stokes en el límite microscópico, esto se debe al insuficiente grado de simetría rotacional del lattice.

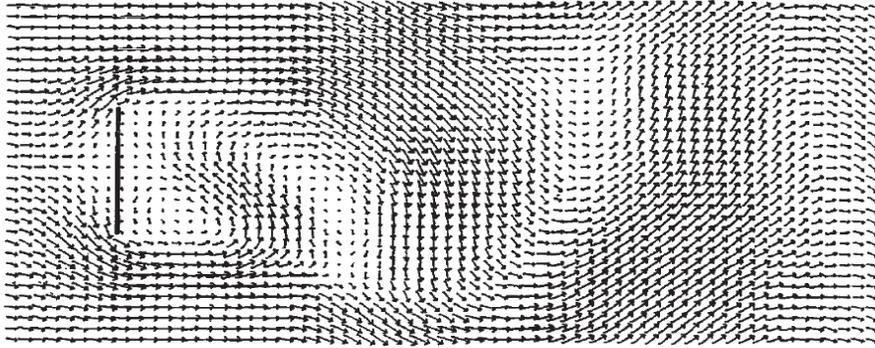


Figura(11),

- a) Es solo una configuración de colisión (colisión frontal) para HPP 2 células en ligas opuestas son ocupadas y las otras 2 células estan vacias, después de la colisión las vacias son ocupadas y viceversa
 b) Muestra los vectores de movimiento asociados, ambos vectores son rotados 90° . Masa y momento se conserva

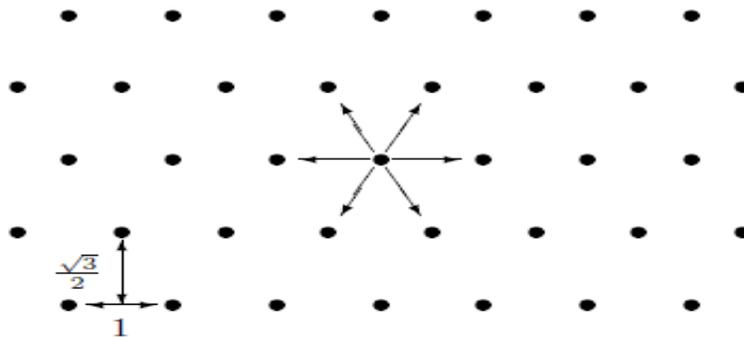
Además de la masa y momento existen más cantidades conservadas por el modelo HPP. Por ejemplo la diferencia entre el número de partículas paralelas y anti-paralelas a un eje del lattice no cambian por colisiones de propagación. Estos "spurious invariant" son ideseables por que restringen en cierta medida la dinámica del modelo no tiene una contra partida en el mundo real.

3.3. El MODELO LGAC FHP



Figura(12)

En la Figura (12) se muestra la simulación de un fluido con lattice gas. Este flujo en particular es forzado de izquierda a derecha. El número de Reynold es alrededor de 70's, suficientemente alto como para dar lugar a vortices inestables Von Karman vortex streets, detrás de la placa plana. Esta simulación cualitativa coincide con los mismos resultados que uno espera de un flujo de dos dimensiones (como se ve por ejemplo cuando una bandera ondea suavemente) o de una simulación con otros métodos numéricos. En 1986 Frisch, Hasslacher y Pomeau, demostraron que un LGAC sobre un lattice con un grupo de simetría mayor que el de lattice cuadrado da mejor acercamiento a la ecuación de Navier-Stokes en el límite macroscópico. Este modelo con simetría hexagonal es llamado FHP tomando las iniciales de sus tres autores. El modelo FHP está compuesto por triángulos lo que forma lattice hexagonales. Es invariante bajo rotaciones $n \cdot 60^\circ$ módulo 360° (simetría hexagonal) alrededor de un eje a través de un nodo y perpendicular al plano del lattice. Figura (13).



Figura(13) Lattice triangular del FHP modelo donde se muestra simetría hexagonal. los lattice velocities c_i son representados por las flechas.

Cada nodo y cada liga al vecino más cercano es una célula que puede estar vacía o ocupada a lo más por una partícula (principio de exclusión). Todas las partículas tienen la misma masa y son indistinguibles. El estado de un nodo puede ser descrito por seis bits. El principio de exclusión lleva a una distribución de equilibrio, del promedio de números de ocupación de tipo Fermi-Dirac. Cada célula es asociada con un vector lattice c_i que conecta a un nodo con su vecino más cercano en la dirección de i . El lattice vector también es llamado lattice velocities por que en un paso Δ_t siempre se establece en 1 en los LGAC y por lo tanto c_i y $\frac{c_i}{\Delta_t}$ tienen el mismo valor numérico por que todas las partículas tienen la misma masa $m=1$, c_i es también el momento de la partícula. En el modelo HPP se tiene dos partículas en colisión frontal, el estado inicial $(i, i+3)$ se puede transformar en uno de los dos estados finales $(i+1, i+4)$ o $(i-1, i+2)$ (rotación por 60° de izquierda a derecha) mientras conserva masa y momento. Si uno elige siempre el mismo estado final el modelo se convierte en *chiral* (Un objeto o un sistema es *chiral* si no es idéntico a su imagen en el espejo, es decir, que no pueden ser superpuestos en la misma). Esto no es invariante con respecto a la reflexión espacial (transformación de la paridad). Esta es una propiedad no deseada, porque las ecuaciones hidrodinámicas no rompen la simetría de paridad. Para restaurar la simetría de reflexión a nivel macroscópico la elección entre los estados finales va a darse por medio procesos aleatorios con probabilidades iguales para rotación de izquierda y la derecha. Por lo tanto las reglas del modelo FHP son no determinísticas, en contrario al modelo HPP.

La colisión con dos partículas no solo conserva masa y momento, también el número de partículas que fluyen en direcciones opuestas. (la misma invariante que HPP) Esta invariante no tiene contraparte en la hidrodinámica del mundo real, por lo que es llamado un "spurious invariant". Esto restringe aún más el LGAC que puede llevar a desviaciones en el comportamiento hidrodinámico a nivel macroscópico. La invariancia de la diferencia de partículas puede ser eliminada por simetría de la colisión de tres partículas que conservan masa y momento. La colisión de 2 y 3 partículas forman un conjunto mínimo de colisiones para el modelo FHP. Esta versión del modelo FHP es llamada FHP-I, introduciendo colisiones adicionales llevan a más variantes (FHP-II, FHP-III). Las ecuaciones macroscópicas correspondientes tienen la misma forma y solo difieren del coeficiente de viscosidad. Como regla general el coeficiente de viscosidad disminuye con el aumento en el número de colisiones.

2.3.1 Propiedades esenciales del modelo FHP

- 1) La red regular subyacente muestra simetría hexagonal
- 2) Los nodos son ligados a seis vecinos localizados a la misma distancia con respecto al nodo central
- 3) Los vectores c_i vinculados a los nodos vecinos más cercanos son llamados lattice vector o lattice velocities

$$c_i = \left(\cos \frac{\pi i}{3}, \sin \frac{\pi i}{3} \right) \quad \text{para} \quad i = 1, 2, \dots, 6$$

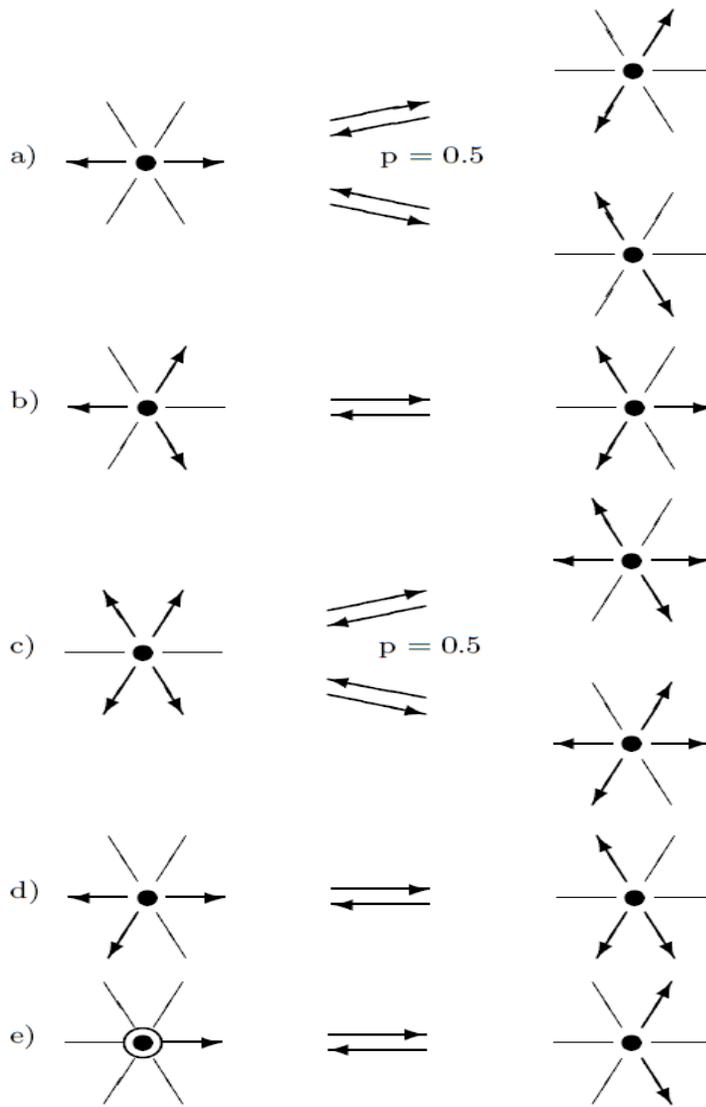
con $|c_i| = 1$ para todo i

- 4) Una célula asociada con cada liga en todos los nodos
- 5) Células pueden estar vacías o ocupadas a lo más por una partícula (principio de exclusión)
- 6) Todas las partículas tienen la misma masa y son indistinguibles
- 7) La evolución predece por una alternancia de la colisión C y transmisión S (también llamado propagación)

$$\varepsilon = S \circ C$$

ε = operador de evolución

- 8) La colisión es estrictamente local, solo las partículas de un solo nodo están involucradas.



Figura(14)

Todas las posibles colisiones del modelo FHP y variantes, células ocupadas se representan como flechas y células vacías como líneas delgadas

- a) 2 partículas en colisión frontal
- b) Simetría en colisión de 3 partículas
- c) 4 partículas colisión frontal
- d) 2 partículas colisión frontal con espectador
- e) Colisión del resto de partículas

CONCLUSIONES

El hecho de que los autómatas (en conjunto con otros conceptos) puedan aproximar una ecuación diferencial parcial como la ecuación de Navier-Stokes, habla del poder multidisciplinario de este concepto y la gran cantidad de aplicaciones que se pueden realizar. En este tema en particular se ve como el autómata celular interactúa con otras ideas para llegar a la simulación de un fluido, y es esa parte, la que es interesante por que nos da la pauta para pensar en otras situaciones que se pueden llevar al plano de los autómatas, que junto con sus propias herramientas de análisis, podemos descubrir nuevas formas de resolver un problema, o como en este caso hacer una muy buena aproximación.

BIBLIOGRAFIA

- DANIEL H. ROTHMAN, STEPHANE ZALESKI. "Lattice-Gas Cellular Automata Simple models of complex hydrodynamics". Cambridge University Press 2004 ISBN 0 521 60760
- Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models An Introduction. Dieter A. Wolf-Gladrow. Alfred Wegener Institute for Polar and Marine Research, Postfach 12 01 61 D-27515 Bremerhaven Germany e-mail: dwolf@awi-bremerhaven.de Version 1.05
- <http://delta.cs.cinvestav.mx/mcintosh/comun/tesismaestria/genaro/node5.html>
- <http://delta.cs.cinvestav.mx/mcintosh/comun/summer99/seck/node6.html>