



UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
INSTITUTO DE FÍSICA

**PROPAGAÇÃO DE FOGO E EQUAÇÕES
ESTOCÁSTICAS**

ANDRÉ TELLES CAMPOS

ORIENTADOR: TARCÍSIO MARCIANO DA ROCHA FILHO

TESE DE DOUTORADO EM
FÍSICA

BRASÍLIA
2013

ANDRÉ TELLES CAMPOS

**PROPAGAÇÃO DE FOGO E EQUAÇÕES
ESTOCÁSTICAS**

Tese de Doutorado submetida ao Instituto de Física da Universidade de Brasília, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Física.

ORIENTADOR: TARCÍSIO MARCIANO DA ROCHA FILHO

**BRASÍLIA
2013**

PROPAGAÇÃO DE FOGO E EQUAÇÕES ESTOCÁSTICAS

Por

ANDRÉ TELLES CAMPOS

Tese de Doutorado submetida ao Instituto de Física da Universidade de Brasília, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Física aprovada por:

Prof. Dr. Tarcísio Marciano da Rocha Filho (IF-UnB)
(Orientador)

Prof. Dr. Marco Antônio Amato (IF-UnB)
(Membro titular)

Prof. Dr. Annibal Dias de Figueiredo Neto (IF-UnB)
(Membro titular)

Dr. George Cajaty Barbosa Braga (CBMDF)
(Membro titular)

Prof. Dr. Zolacir Trindade de Oliveira Júnior (UESC-BA)
(Membro titular)

Prof. Dr. Ademir Eugênio de Santana (IF-UnB)
(Membro suplente)

Brasília-DF, julho de 2013.

Dedicatória

Para Luís Felipe e Luiza.

Agradecimentos

Sou grato primeiramente a Deus, por ter me dado forças para superar as dificuldades do caminho.

Presto reconhecimento especial à minha família, que soube compreender os momentos de ausência e ainda incentivar-me a continuar na longa empreitada. Meus queridos avós (*in memoriam*) e minha mãe que me educaram com todo o carinho do mundo. Minha esposa e meus filhos queridos, que foram os que mais se ressentiram com os momentos de ausência.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Tarcísio Marciano, pelo empenho, confiança e paciência.

Deixo meu muito obrigado aos amigos e amigas que colaboraram com ideias e estímulo à pesquisa. Obrigado também pelas conversas sem pé nem cabeça, pelos momentos de descontração. Certamente esquecerei de mencionar alguns nomes, mas vale destacar a significativa contribuição de: Juliano, Franciscarlos, Fernando, Márcio, Regina, Gleydson, Lima, Pedroso, Tarragô, Edson, Isaac, George, Helen e Maria Luiza.

Finalmente, e não menos importante, agradeço ao CBMDF, na pessoa de seu Comandante-Geral, Cel. Lopes, por ter apoiado e propiciado as condições mínimas para esta oportunidade ímpar de pesquisa e interação entre o CBMDF e a Universidade. Outros apoios decisivos ao longo do caminho vieram do Ten-Cel Waterloo, do Cel Silveira e do Cel P. Fernandes. Recebi incentivos de várias pessoas em diferentes momentos e indubitavelmente não citei aqui, mas agradeço de coração a todas.

Epígrafe

Não é a posse do conhecimento, da verdade irrefutável, que faz o homem de ciência - o que o faz é a persistente e arrojada procura crítica da verdade.

Karl Popper

Resumo

Esta tese de doutorado aborda o problema de crescimento de interfaces em superfícies, especificamente da propagação superficial de frentes de fogo e de sua modelagem por meio de equações diferenciais estocásticas. Uma nova abordagem é introduzida para determinar os parâmetros da equação Kardar-Parisi-Zhang que utiliza um algoritmo de integração numérica e assim requer um pequeno número de configurações como dados de entrada. Nosso método inverso encontra os parâmetros da equação Kardar-Parisi-Zhang a partir de poucas frentes de fogo, o que representa vantagem com relação a outros métodos inversos, podendo ser aplicado em cenários reais de queimadas. A abordagem aqui apresentada é aplicada a dados de temperatura de um simulador de incêndios baseado em dinâmica de fluidos computacional e a modelos discretos. Nós desenvolvemos um modelo discreto baseado em autômatos celulares estocásticos para a propagação de frentes de fogo e discutimos suas propriedades, demonstrando que ele pertence à classe de universalidade Kardar-Parisi-Zhang. Os coeficientes da equação de evolução contínua são obtidos pelo método da equação mestra e determinados numericamente pelo método inverso aqui introduzido.

Palavras-chave: autômatos celulares; equação KPZ; método inverso; modelagem de fogo.

Abstract

This PhD thesis addresses the problem of interfaces growth, specifically the surface spread of fire fronts and its description using stochastic differential equations. We introduce an inverse method to determine the parameters of the Kardar-Parisi-Zhang equation corresponding to a evolving interface which requires a small number of configurations as input data. Our approach presents advantages for application in real world scenarios since it does not require small time intervals between the interfaces. This inverse method is applied to discrete models and to data from a fire dynamics simulator based on computational fluid dynamics. We develop a discrete model based on stochastic cellular automata for propagation of fire fronts and discuss its properties. It is demonstrated the model belongs to the Kardar-Parisi-Zhang universality class. We obtain the continuous evolution equation for the interface from the master equation approach. The parameters of the Kardar-Parisi-Zhang equation are numerically determined from our inverse method.

Keywords: cellular automata; fire modelling; inverse method; KPZ equation.

Lista de Figuras

2.1	Esquema do aparato experimental.	p. 24
2.2	Eixos coordenados para descrição de interfaces em 1 + 1 dimensões. . .	p. 25
2.3	Tempo de cruzamento	p. 26
2.4	Origem do termo não-linear da equação KPZ	p. 31
2.5	Termo não-linear da equação KPZ	p. 32
3.1	Limites de inflamabilidade	p. 39
3.2	Comportamento da ignição de acordo com a taxa de aquecimento do material	p. 42
3.3	Modos de propagação de chamas	p. 43
3.4	Influência da inclinação da superfície na taxa de propagação de chamas	p. 45
4.1	Modelo de deposição balística	p. 60
5.1	Interfaces geradas por integração numérica da equação KPZ	p. 73
5.2	Ajuste dos parâmetros da equação KPZ em função do número de interfaces	p. 74
5.3	Visualização realística da propagação de frentes de fogo no simulador FDS-SMV com os respectivos campos de temperatura.	p. 76
5.4	Frentes de fogo processadas a partir da queima de uma espuma e gravadas a cada 10 segundos de simulação no FDS.	p. 77
5.5	Comportamento da largura da interface $w(t)$ para o modelo CFD.	p. 78
5.6	Ajuste da equação KPZ para diferentes malhas numéricas.	p. 79

5.7	Comportamento da largura da interface $w(t)$ e da função correlação espacial $C(\zeta, 0)$ para a propagação de frentes de fogo modelada por autômatos celulares estocásticos.	p. 79
5.8	Comparação entre uma interface de entrada simulada de acordo com o modelo de autômatos celulares estocásticos e a frente ajustada pelo método inverso.	p. 80
5.9	Leis de escala para $C(0, \tau)$ e $C(\zeta, 0)$ para propagação de frentes de fogo modelada por autômatos celulares estocásticos.	p. 80
5.10	Comportamento da largura da interface w para diferentes valores de proporção inicial de células susceptíveis S_0	p. 81

Lista de Tabelas

5.1	Resultados numéricos	p.73
5.2	Comparação de métodos inversos	p.74

Sumário

1	INTRODUÇÃO	p. 13
1.1	Estrutura da tese	p. 16
2	CRESCIMENTO DE INTERFACES	p. 17
2.1	Conceitos de processos estocásticos	p. 17
2.2	Evidências experimentais do crescimento de interfaces na Natureza . . .	p. 22
2.3	Dinâmica de crescimento de interfaces	p. 23
2.4	Propriedades de escala	p. 27
2.5	Equação KPZ	p. 29
2.6	Crescimento de interfaces em meios aleatórios	p. 33
3	DINÂMICA DE INCÊNDIOS	p. 36
3.1	Ignição	p. 38
3.2	Propagação de chamas	p. 41
3.3	Taxa de queima	p. 46
3.4	Incêndio em vegetação	p. 48
3.5	Modelagem computacional do fogo	p. 49
3.5.1	Métodos probabilísticos	p. 50
3.5.2	Métodos determinísticos	p. 51
4	MODELOS DISCRETOS NA CLASSE DE UNIVERSALIDADE KPZ	p. 55
4.1	Modelo RSOS	p. 55

4.2	Deposição balística	p. 59
4.3	Autômatos celulares estocásticos	p. 62
5	MODELAGEM DA EQUAÇÃO KPZ	p. 66
5.1	Solução numérica da equação KPZ	p. 67
5.2	Método inverso de Lam e Sander	p. 69
5.3	Método inverso para número arbitrário de configurações de entrada . . .	p. 70
5.4	Teste de auto-consistência e comparação com o método inverso original	p. 72
5.5	Aplicação do método inverso ao modelo CFD	p. 74
5.6	Aplicação do método inverso ao modelo SCA	p. 76
6	CONCLUSÃO	p. 82
	Referências Bibliográficas	p. 85
	Apêndice A – Código fonte para implementação do modelo SCA	p. 91
	Apêndice B – Algoritmo de cálculo dos coeficientes da equação de Langevin para o modelo SCA	p. 104
	Apêndice C – Código fonte para implementação do método inverso para número arbitrário de configurações.	p. 106
	Apêndice D – Código fonte para gerar e propagar numericamente interfaces.	p. 125
	Apêndice E – Algoritmo para identificar a posição das frentes de fogo geradas pelo FDS.	p. 132

1 INTRODUÇÃO

A propagação de fogo é um problema de transferência de calor que envolve mecanismos complexos e cuja solução analítica somente é obtida para casos bastante particulares e idealizados [1, 2, 3]. Por outro lado, esse fenômeno complexo pode ser entendido como um problema de crescimento de interfaces, o qual, por sua vez, está relacionado com diversos problemas relevantes, tais como escoamento de fluidos em meios porosos, linhas de fluxos em supercondutores, deposição atômica, agregados coloides, crescimento de tumores e outros [4]. O crescimento de interfaces tem atraído a atenção de pesquisadores por décadas devido à sua importância em muitos campos e ainda persiste como um tópico atual em Mecânica Estatística com questões de interesse científico a serem exploradas [5, 6, 7].

Uma ferramenta para compreender o comportamento de vários processos de crescimento são as equações diferenciais estocásticas. Tais equações descrevem a interface em escalas de comprimento grandes, ou seja, negligenciam detalhes de escala de comprimento pequeno e focam somente nas propriedades assintóticas de grão-grosso. Desse modo, a escolha da forma da equação e a determinação de parâmetros relevantes pode permitir uma boa descrição do padrão de crescimento, ou propagação, numa escala que modele os detalhes finos como parte do processo estocástico subjacente. Diversos processos de crescimento podem ser descritos por uma equação diferencial parcial estocástica não-linear, conhecida como equação Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) [8]. Em geral, não é possível obter soluções exatas, portanto, é necessário aplicar várias aproximações para desnudar o comportamento de escala da interface. Existem transformações da equação KPZ que levam a outras formas conhecidas como as equações de Burgers e de Schrödinger, que permitem explorar as propriedades e modos de resolução da equação KPZ usando técnicas já aplicadas para essas outras equações [6, 8]. Outra possibilidade para tratar o problema é usar a abordagem da equação de Fokker-Planck, que permite calcular diretamente a distribuição de probabilidade das flutuações de altura na interface para o

estado estacionário [6]. Enfim, uma variedade de técnicas tem sido desenvolvidas para lidar com a equação KPZ que também são úteis em outras áreas da Física Estatística de não-equilíbrio [5].

Uma série de outros conceitos contemporâneos da Física também estão envolvidos nesse campo da Mecânica Estatística, tais como: grupos de renormalização, equações de Langevin e Fokker-Planck, teorema de flutuação-dissipação, equação de Burgers, equação de Kuromoto-Sivashinski, criticalidade auto-organizada, quebra de simetria em réplicas, evolução biológica intermitente, instabilidade em níveis fundamentais, formação de padrões, entre outros [6]. Ademais, o interesse no tema não é apenas teórico, mas também experimental em áreas como: propagação de fogo em papel e florestas, absorção de tinta, superfícies de estado sólido, corrosão química, deposição eletroquímica, geomorfologia e erosão de superfícies terrestres, vórtices em supercondutores cerâmicos e recuperação de óleo através de meios porosos [6]. O ruído desempenha papel essencial na morfologia final da interface. A origem da aleatoriedade ou ruído em problemas de escoamento de fluidos está relacionada com a natureza desordenada do meio através do qual a interface avança. Por exemplo, em supercondutores as forças de travamento junto com as flutuações térmicas determinam a dinâmica das linhas de fluxo [4].

Um ponto importante da teoria da dinâmica de crescimento de interfaces a ser pesquisado é a propagação de frentes de fogo, uma vez que há indicações fortes da descrição desse fenômeno pela equação KPZ [9, 10]. O estudo das queimadas constitui um tema atual e relevante para um desenvolvimento e crescimento sustentáveis da sociedade. Sua relevância aumenta quando se leva em conta o número de vítimas e os custos relacionados à ocorrência de incêndios. Por exemplo, nos Estados Unidos da América em 2005 houve 21.717 mortos e feridos em ocorrências de incêndios e as perdas financeiras são estimadas em cerca de 10,7 bilhões de dólares [11]. No Brasil não há uma centralização das estatísticas referentes aos dados de incêndios. De acordo com o relatório estatístico de ocorrências operacionais do Corpo de Bombeiros Militar do Distrito Federal, ocorreram 11.212 incêndios urbanos e florestais na capital federal no ano de 2012. Portanto, cresce em importância a pesquisa acerca de modelos capazes de descrever a evolução do incêndio, permitindo revelar as características essenciais da propagação superficial de chamas, além de ensejar a descoberta de conexões entre fenômenos à primeira vista totalmente díspares na Natureza. É preciso saber quais propriedades do fenômeno são relevantes para descrevê-lo, quais suas interrelações com parâmetros de equações diferenciais estocásticas já propostas para modelar outros processos similares e quais adaptações precisam

ainda ser executadas para otimizar tais modelos e fazer com que eles reproduzam cada vez mais fielmente a realidade, dentro das limitações impostas pela atual tecnologia disponível.

Um problema frequentemente explorado para dados simulados e especialmente para dados experimentais é a determinação dos expoentes de escala, uma vez que há ocorrência de geometrias auto-similares a partir de processos estocásticos locais [6]. Adicionalmente às propriedades universais, as propriedades não-universais desses sistemas, tais como razões de amplitude, constante de acoplamento adimensional no ponto fixo da KPZ e suas propriedades de persistência e especificamente aquelas relacionadas com as flutuações de uma interface propagando em torno de sua posição média, tem sido recentemente discutidas [12, 13]. Distribuições dessas flutuações dependem da geometria global da interface média e apresentam comportamento diferente nos regimes estacionário e transiente. O aparecimento de expoentes de escala anômalos, ou seja, expoentes de rugosidade local diferentes do expoente de rugosidade global da interface, foram observados nesse tipo de sistemas [14].

Abordagens típicas em fenômenos de crescimento buscam determinar a classe de universalidade à qual o processo pertence. Uma vez estabelecido que os processos em estudo nesta tese são da classe KPZ, o foco da pesquisa consiste em determinar os parâmetros dessa equação. A primeira modelagem da equação KPZ a partir de dados experimentais é creditada a Lam e Sander [15]. Os autores propuseram um método inverso baseado em diferenças finitas para aproximar a dinâmica de crescimento. No entanto, esse método apresenta uma dificuldade de implementação, visto que requer passos de tempo curtos entre as interfaces. Para superar tal dificuldade desenvolvemos uma abordagem para modelar o crescimento superficial de frentes de fogo usando a equação KPZ. Essa metodologia aqui desenvolvida foi publicada como contribuição original em periódico científico de circulação internacional [16]. Nossa abordagem, então, é submetida a testes e comparações com outros modelos. Inicialmente é realizado um teste de consistência numérica. Em seguida as previsões do simulador de incêndios baseado em dinâmica de fluidos computacional (CFD), denominado *Fire Dynamics Simulator* (FDS) [17], são confrontadas com aquelas obtidas a partir do procedimento de reconstrução da equação KPZ. O FDS é um dos *softwares* que retrata mais fielmente o comportamento do fogo [18]. Uma segunda aplicação de nossa abordagem é realizada sobre um modelo discreto baseado em autômatos celulares estocásticos que serve de protótipo para a propagação de interfaces. O algoritmo dos autômatos celulares desenvolvido originalmente para esta tese também é

submetido ao método da equação mestra e tem suas propriedades de escala determinadas.

Diante da riqueza de assuntos que o tema proporciona cabe limitar o escopo deste trabalho. O objetivo geral da pesquisa é propor um método inverso capaz de modelar a propagação de frentes de fogo sobre superfícies usando a equação KPZ obtida a partir de dados simulados e experimentais. Pretendemos obter uma modelagem que necessite de poucas frentes de fogo para ter uma boa descrição da evolução geral do sistema.

1.1 Estrutura da tese

O texto da tese está assim distribuído. O capítulo 2 traz uma revisão da literatura concernente ao crescimento de interfaces do ponto de vista de processos estocásticos. Explicita as ferramentas da Mecânica Estatística disponíveis para a caracterização da dinâmica e do comportamento de escala dos sistemas estudados nos capítulos subsequentes. O capítulo 3 visa caracterizar qualitativa e quantitativamente os processos de propagação de chamas sobre superfícies, uma aplicação central nesta tese. Os processos físicos de transferência de calor das chamas para o material combustível ainda não queimado são o mecanismo responsável pela propagação das frentes de fogo. No entanto, as equações determinísticas são solúveis apenas em casos muito específicos e a modelagem computacional desempenha papel importante neste cenário. Os modelos discretos permitem a determinação das taxas de transição entre configurações com certa facilidade, o que possibilita a construção de equações mestras para a distribuição de probabilidades de cada configuração. O capítulo 4 dedica-se à derivação analítica dos coeficientes da equação de evolução estocástica de modelos discretos na classe de universalidade KPZ pelo método da equação mestra. Nesse capítulo ainda introduzimos um modelo original para a propagação de frentes de fogo baseado em autômatos celulares estocásticos, diferenciado de outros existentes na literatura pelo foco na propagação de frentes de fogo. O capítulo 5 discorre sobre a principal contribuição desta tese: a formulação de uma nova abordagem para determinação dos parâmetros da equação KPZ a partir de um número pequeno de interfaces [16]. Essa abordagem foi iniciada no trabalho de dissertação deste autor [19], sendo ampliada e aprofundada nesta pesquisa. A abordagem aqui introduzida é submetida a testes numéricos e comparativos com outros métodos disponíveis para cálculo dos coeficientes da equação KPZ e modelos de propagação de frentes de fogo. A tese encerra-se com o capítulo 6 de conclusões e perspectivas de trabalhos futuros derivados desta linha de pesquisa.

2 *CRESCIMENTO DE INTERFACES*

Muitos problemas relevantes relacionados com o crescimento de interfaces ocorrem em superfícies, formadas como resultado de um processo de deposição, enquanto outras diminuem devido à corrosão [8]. Existem ainda as interfaces que se propagam através de meios inhomogêneos. Uma superfície aparentemente lisa pode ser rugosa em uma escala menor. Como descrever a formação, o crescimento e a dinâmica de tais interfaces são questões de interesse nesta pesquisa.

O crescimento de interfaces pode ser estudado de várias maneiras, seja por experimentos, conceitos de escala, modelos discretos ou equações contínuas [4]. Nos experimentos sobre propagação de frentes de fogo em folhas de papel [9, 10] a desordem do meio desempenha papel preponderante na morfologia da interface. Estudar processos de rugosidade cinética por meio de leis de escala permite relacionar sistemas aparentemente desconexos, tais como, escoamento de fluidos em meios porosos e propagação de frentes de fogo [4]. A simulação numérica de modelos discretos representa uma ligação entre experimento e teoria. Algoritmos com regras simples servem para modelar processos de deposição e corrosão, entre outros. Equações diferenciais estocásticas tipicamente descrevem interfaces focando em propriedades assintóticas de grão-grosso [4]. Elas podem ser derivadas a partir de um modelo discreto do sistema, por princípios de simetria ou a partir de experimentos.

2.1 Conceitos de processos estocásticos

Uma vez que o movimento de um sistema pode ser reformulado como um processo estocástico, resta a tarefa de escolher o processo adequado. Para um sistema isolado e fechado, o movimento determinístico microscópico pode ser representado por uma traje-

tória no espaço de fase Γ . Cada ponto $X \in \Gamma$ é mapeado por uma função $f(X, t) = X^t$ em outro ponto no tempo t . Se no tempo inicial for escolhida uma densidade de probabilidade $P(x)$ em Γ , então $f(X, t)$ é um processo estocástico como definido a seguir.

Um processo estocástico é definido a partir do conceito de variável estocástica X , que consiste em especificar:

- O conjunto de valores possíveis; e
- A distribuição de probabilidade sobre esse conjunto.

O conjunto de valores pode ser discreto, contínuo ou parcialmente discreto e parcialmente contínuo. A distribuição de probabilidade é dada por uma função não-negativa $P(x) \geq 0$ e normalizada $\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)dx = 1$. A probabilidade que X assuma valores entre x e $x + dx$ é $P(x)dx$. No caso de uma variável contínua, $P(x)$ é denominada uma densidade de probabilidade.

Uma grande vantagem de introduzir o conceito de variável aleatória é a possibilidade de tratar as equações dessas variáveis de modo análogo à descrição de sistemas determinísticos por meio de equações diferenciais [20]. Uma vez definida uma variável aleatória, podemos definir todas as quantidades Y que são função de X por algum mapeamento f . Essas quantidades Y podem ser qualquer objeto matemático, em especial, funções de uma variável adicional t :

$$Y_X(t) = f(X, t). \quad (2.1)$$

A equação (2.1) define um processo estocástico quando t é uma variável temporal. Desse modo, um processo estocástico é simplesmente uma função de duas variáveis, uma das quais é o tempo e a outra uma variável estocástica [21]. A realização do processo é obtida quando X assume um de seus possíveis valores: $Y_x(t) = f(x, t)$, que é uma função amostra. As médias são formadas com base nas densidades de probabilidade das variáveis aleatórias:

$$\langle Y(t) \rangle = \int Y_x(t) P_X(x) dx. \quad (2.2)$$

Um processo estocástico é dito estacionário quando os momentos não são afetados por um deslocamento τ no tempo, isto é,

$$\langle Y(t_1 + \tau) \cdots Y(t_n + \tau) \rangle = \langle Y(t_1) \cdots Y(t_n) \rangle. \quad (2.3)$$

Generalizando o conceito de média para n tempos, pode-se falar em momento n -ésimo:

$$\langle Y(t_1) \cdots Y(t_n) \rangle = \int Y_x(t_1) \cdots Y_x(t_n) P_X(x) dx. \quad (2.4)$$

Na prática as quantidades mais relevantes estão relacionadas ao primeiro e ao segundo momentos. O primeiro momento sendo a própria média ou valor esperado de Y e o segundo momento a variância. Para $t_1 = t_2$ a variância pode ser expressa por $\text{var}\{Y\} \equiv \langle (Y - \langle Y \rangle)^2 \rangle = \langle \langle Y^2 \rangle \rangle$. A raiz quadrada da variância é designada por desvio padrão σ . De interesse particular é a função autocorrelação:

$$\kappa(t_1, t_2) \equiv \langle \langle Y(t_1) Y(t_2) \rangle \rangle = \langle Y(t_1) Y(t_2) \rangle - \langle Y(t_1) \rangle \langle Y(t_2) \rangle, \quad (2.5)$$

onde o duplo braket denota cumulantes*. No caso de variáveis estocásticas com múltiplas componentes Y_i pode-se definir a matriz de correlação:

$$\kappa_{ij}(t_1, t_2) \equiv \langle \langle Y_i(t_1) Y_j(t_2) \rangle \rangle. \quad (2.6)$$

Os elementos da diagonal representam as autocorrelações.

Uma importante classe de processos estocásticos em Física envolve a propriedade de Markov. Alguns exemplos são o movimento Browniano e os processos de nascimento e morte, nos quais o sistema não é afetado por todos os estados em tempos anteriores, bastando conhecer o estado no tempo imediatamente anterior para determinar o comportamento futuro [20, 22]. A propriedade de Markov é formulada em termos de probabilidade

*Os cumulantes são obtidos a partir da expansão em série de potência da função característica. Não existe uma fórmula geral simples para os cumulantes em função dos momentos estatísticos [20, 21]. Os três primeiros cumulantes para uma variável estocástica X são apresentados a seguir:

$$\begin{aligned} \kappa_1 &\equiv \langle \langle X_i \rangle \rangle = \langle X_i \rangle \\ \kappa_2 &\equiv \langle \langle X_i X_j \rangle \rangle = \langle X_i X_j \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle \\ \kappa_3 &\equiv \langle \langle X_i X_j X_k \rangle \rangle = \langle X_i X_j X_k \rangle - \langle X_i X_j \rangle \langle X_k \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j X_k \rangle - \langle X_i X_k \rangle \langle X_j \rangle + 2 \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle \langle X_k \rangle. \end{aligned}$$

des condicionais* para qualquer conjunto de n tempos sucessivos ($t_1 < t_2 < \dots < t_n$) [21]:

$$P(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}; \dots; y_1, t_1) = P(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}), \quad (2.7)$$

onde $P(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1})$ é a probabilidade de transição de um estado do sistema no tempo $n-1$ para outro estado no tempo atual n . Logo, num processo Markoviano a probabilidade de uma dada configuração é representada por:

$$P(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) = P(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}; \dots; y_1, t_1) P(y_1, t_1, \dots, y_{n-1}, t_{n-1}) \quad (2.8)$$

$$= P(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}) P(y_1, t_1, \dots, y_{n-1}, t_{n-1}) \quad (2.9)$$

$$= P(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}) P(y_{n-1}, t_{n-1} | y_{n-2}, t_{n-2}) \dots P(y_2, t_2 | y_1, t_1) P(y_1, t_1). \quad (2.10)$$

Exemplificando para $n = 3$ e integrando (ou somando, se discreto) a equação (2.10) sobre todos os possíveis valores para o estado intermediário y_2 temos:

$$P(y_1, t_1; y_3, t_3) = P(y_1, t_1) \int P(y_3, t_3 | y_2, t_2) P(y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_2. \quad (2.11)$$

Dividindo por $P(y_1, t_1)$, obtemos a equação de Chapman-Kolmogorov:

$$P(y_3, t_3 | y_1, t_1) = \int P(y_3, t_3 | y_2, t_2) P(y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_2. \quad (2.12)$$

A equação (2.12) é uma identidade obedecida pela probabilidade de transição de qualquer processo Markoviano e pode ser facilmente generalizada para n tempos e r componentes da variável estocástica. Além disso, é válida também para valores discretos de y trocando a integração pela somatória. Desse modo, um processo Markoviano é completamente determinado pela probabilidade do estado inicial e as probabilidades de transição, as quais devem obedecer à equação de Chapman-Kolmogorov e à identidade:

$$P(y_2, t_2) = \int P(y_2, t_2 | y_1, t_1) P(y_1, t_1) dy_1. \quad (2.13)$$

Num processo Markoviano estacionário a probabilidade de transição depende apenas do

*Seja uma variável aleatória X com r componentes. A probabilidade de cada componente assumir um valor x_i com $i = 1, \dots, r$ é a probabilidade conjunta. Tomando um subconjunto $s < r$, a probabilidade dessas componentes assumir um valor x_j com $j = 1, \dots, s$ independentemente do valor das demais componentes é a probabilidade marginal ou incondicional. Por outro lado, se forem atribuídos valores fixos às variáveis X_{s+1}, \dots, X_r , então a probabilidade conjunta do subconjunto s , dada essa condição sobre as $s-r$ componentes da variável estocásticas X , é denominada probabilidade condicional e é denotada por $P(s|r-s)$ [21, 23].

intervalo de tempo $\tau = t_2 - t_1$ entre os dois estados:

$$P(y_2, t_2 | y_1, t_1) \equiv P_\tau(y_2 | y_1). \quad (2.14)$$

Nesse caso a equação (2.12) é reescrita da seguinte maneira:

$$P_{\tau+\tau'}(y_3 | y_1) = \int P_{\tau'}(y_3 | y_2) P_\tau(y_2 | y_1) dy_2. \quad (2.15)$$

A equação mestra é uma versão diferencial da equação (2.15), obtida tomando o limite de τ' tendendo a zero [21]:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int \{W(y|y')P(y', t) - W(y'|y)P(y, t)\} dy', \quad (2.16)$$

onde $W(y|y')$ é a probabilidade de transição por unidade de tempo (ou simplesmente taxa de transição) de y' para y . A equação mestra descreve um processo de ganho e perda para as probabilidades dos estados. O primeiro termo do lado direito representa o ganho de estados y devido às transições de outros estados y' para y , e o segundo termo corresponde à perda de estados y em razão das transições de y para outros estados y' . Os termos com $y = y'$ não contribuem para a integral (ou somatória, se estados discretos).

A partir da expansão em série de Taylor da função distribuição de probabilidade e das probabilidades de transição é possível obter a equação de Fokker-Planck associada [22]. Inicialmente a taxa de transição é expressa em função do tamanho do salto $r = y - y'$, de tal modo que o integrando da equação (2.13) possa ser expandido em série de Taylor. Além disso, são assumidas duas hipóteses [21]:

- (i) Somente saltos pequenos ocorrem, ou seja, $W(y'; r) = W(y|y')$ é uma função do tipo δ na variável r , mas que varia lentamente com y' ;
- (ii) A solução $P(y, t)$ da equação (2.16) varia suavemente com y .

Assim, para τ pequeno e retendo apenas os termos de primeira e segunda ordens*, obtém-

*A expansão considerando todos os infinitos termos é conhecida como expansão de Kramers-Moyal [21]. O teorema de Pawula estabelece que, para probabilidades de transição positivas, se qualquer momento par for nulo, então todos os coeficientes de Kramers-Moyal a partir de três serão nulos, logo a expansão pode ser truncada após o primeiro ou o segundo termo da série, sendo que nesse último caso a equação é denominada de Fokker-Planck [22].

se a equação de Fokker-Planck:

$$\frac{\partial P(y,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial y} a_1(y)P(y,t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} a_2(y)P(y,t), \quad (2.17)$$

onde os coeficientes $a_j = \int_{-\infty}^{\infty} r^j W(y;r)dr$ podem ser quaisquer funções reais diferenciáveis com a restrição de que $a_2 > 0$. O primeiro termo do lado direito da equação (2.17) é conhecido como termo convectivo (ou de drift) e o segundo é o termo difusivo (ou de flutuação).

Existe uma relação entre a equação de Fokker-Planck e a equação de Langevin, de tal forma que um processo estocástico possa ser representado tanto por uma quanto por outra equação, mas existem restrições, visto que a equação (2.17) determina completamente o processo estocástico enquanto que a equação de Langevin não vai além dos dois primeiros momentos [21, 24]. As duas equações serão equivalentes se o ruído for do tipo Gaussiano. Por exemplo, a equação de Langevin

$$\frac{dy}{dt} = -\gamma y + \eta(t) \quad (2.18)$$

com ruído Gaussiano branco, isto é, $\langle \eta \rangle = 0$ e $\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \Gamma \delta(t-t')$ é equivalente ao processo Markoviano descrito por:

$$\frac{\partial P(y,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \gamma y P(y,t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Gamma P(y,t), \quad (2.19)$$

que é a equação de Fokker-Planck para o processo de Ornstein-Uhlenbeck [21].

2.2 Evidências experimentais do crescimento de interfaces na Natureza

Um exemplo familiar de crescimento de interfaces é o escoamento de fluidos em meios porosos. Outras aplicações são: crescimento de frentes de cristalização, deposição de material sobre superfícies, corrosão de substratos e expansão de tumores [4, 6, 25]. A colocação da borda de uma folha de papel toalha num recipiente com líquido permite verificar como a interface seco-molhado cresce sobre a folha de papel. Esse experimento serve de protótipo, por exemplo, para escoamento de petróleo em rochas porosas. Outro

exemplo, que vai interessar particularmente nesta pesquisa, é a propagação de frentes de fogo em superfícies. Tomemos o caso de uma folha de papel na horizontal, queimada a partir de uma de suas extremidades. Podemos observar como a fronteira entre o material queimado e o não queimado evolui. O padrão de crescimento desse fenômeno é muito similar a outros encontrados na natureza, de tal modo que abordagens similares possam ser aplicadas, ainda que os fenômenos sejam aparentemente muito díspares.

Zhang e colaboradores [9] realizaram experimentos com folhas de papel de baixa densidade para modelar incêndios florestais. Os autores usaram um fio de energia elétrica para iniciar o fogo numa das bordas do papel e capturaram as imagens da queima com uma filmadora. Após a digitalização das imagens foi possível perceber que a evolução das frentes de fogo no pedaço de papel segue a estatística de escala auto-similar, com expoente de rugosidade $\alpha = 0,71 \pm 0,05$, que difere do valor teórico de $\alpha = 0,5$ e enseja maior investigação. A natureza inhomogênea do papel determina a propagação não uniforme da interface, com as irregularidades na porosidade e na composição química afetando diretamente a velocidade local do processo de queima. Os autores sugerem ainda que a posição da frente de fogo possa ser modelada utilizando uma equação diferencial estocástica não-linear (2.37) conhecida como equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ).

Experimentos em um ambiente melhor controlado para a observação da queima lenta (*smoldering* em inglês) de folhas de papel demonstraram que a interface separando o material queimado do não queimado efetivamente evolui conforme a equação KPZ [10, 26, 27, 28, 29]. Esse grupo de pesquisadores da universidade de Jyväskylä valeu-se de uma câmara de combustão com uma das paredes em vidro, permitindo a gravação da queima por uma câmera com sensor CCD conectada a um computador. O aparato experimental pode ser visualizado na figura 2.1. As folhas de papel tratadas com nitrato de potássio são posicionadas de modo a minimizar a transferência de calor por convecção e assegurando propagação uniforme. As imagens gravadas foram convertidas para um sinal digital utilizando uma escala de cinza com 256 tons, de tal modo que a posição da interface fosse determinada por meio do brilho da frente em cada ponto.

2.3 Dinâmica de crescimento de interfaces

Os métodos para analisar a dinâmica de crescimento de interfaces podem envolver conceitos de escala, experimentos, modelos discretos e equações contínuas [4]. O es-

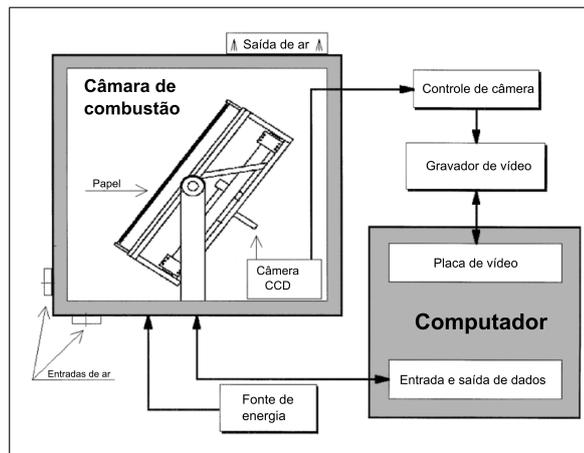


Figura 2.1: Esquema do aparato experimental.
Fonte: Ref. [10].

tudo do processo de enrugamento usando leis de escala leva à definição de classes de universalidade, o que permite conectar sistemas aparentemente bastante distintos. Por exemplo, os expoentes de escala obtidos para o escoamento de fluidos coincidem com os expoentes obtidos para frentes de fogo, apesar da diferença nos mecanismos que levam ao crescimento da interface [4]. O processo de enrugamento das interfaces era um fato experimental pouco explorado, mas passou a ser abordado em um grande número de experimentos. Existem duas classes de experimentos: aqueles que estudam o movimento da interface em meios desordenados, onde as impurezas desempenham papel principal na morfologia, e aqueles relacionados com deposição, para os quais os mecanismos que levam à rugosidade são bem diferentes.

Os modelos discretos usam algoritmos computacionais, tais como autômatos celulares, e representam uma ligação essencial entre teoria e experimentos. Estudos com simulações permitem identificar os ingredientes determinantes para a dinâmica do sistema [4]. Outra ferramenta útil para entender o comportamento de processos de crescimento são as equações diferenciais estocásticas, que descrevem a interface em escalas de comprimento grandes, ou seja, negligenciando detalhes de escala de comprimento pequeno e focando somente nas propriedades assintóticas de grão-grosso. Uma vez obtida uma equação de crescimento, podemos determinar, por exemplo, os expoentes de escala e as funções de escala. Em geral, não é possível encontrar soluções exatas, sendo necessário aplicar várias aproximações para obter o comportamento de escala. Uma ferramenta especialmente útil é o método do grupo de renormalização [4].

A formação de interfaces é influenciada por um grande número de fatores e é quase

impossível distinguir todos. No entanto, é razoável supor que uma pequena quantidade de leis básicas determinem a morfologia e a dinâmica de crescimento. Existem alguns conceitos de escala relevantes para a descrição e resolução de problemas de interfaces. A altura média da superfície $\langle h \rangle$ é dada por:

$$\langle h(t) \rangle \equiv \frac{1}{L_x} \sum_{i=1}^{L_x} h_i(t), \quad (2.20)$$

onde $h_i(t)$ é a altura da célula i no tempo t e L_x é o número de colunas da malha, que dá o tamanho do sistema L . A figura (2.2) demonstra o posicionamento das interfaces em relação aos eixos h e x .

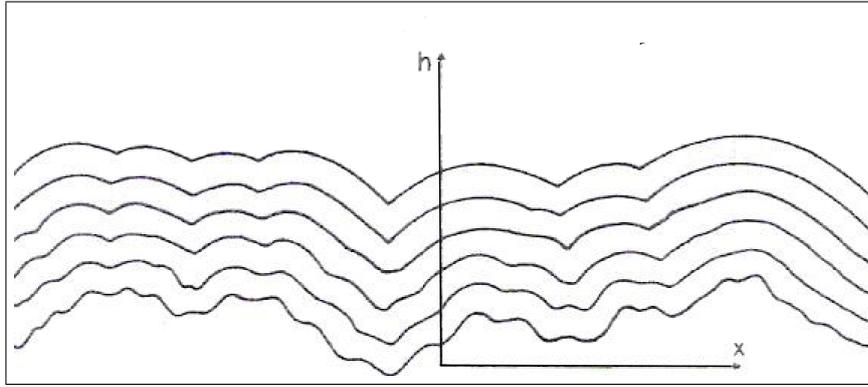


Figura 2.2: Eixos coordenados para descrição de interfaces em 1 + 1 dimensões.

A largura da interface w , que caracteriza a rugosidade da interface, é definida como sendo a flutuação quadrática média da altura:

$$w(L,t) \equiv \sqrt{\frac{1}{L_x} \sum_{i=1}^{L_x} [h_i(t) - \langle h(t) \rangle]^2}. \quad (2.21)$$

Para exemplificar como essas grandezas podem evoluir, tomemos o caso em que o crescimento se inicia a partir de uma linha horizontal, ou seja, no tempo zero a interface é uma linha reta com largura $w = 0$. Um gráfico típico da evolução temporal da largura, mostrado na figura 2.3, tem duas regiões bem definidas cuja fronteira é o tempo de cruzamento t_\times . Inicialmente, a largura aumenta com uma potência do tempo.

$$w(L,t) \sim t^\beta, \quad t \ll t_\times, \quad (2.22)$$

onde β é o expoente de crescimento, que caracteriza a dinâmica do processo de enrugamento. Depois do tempo de cruzamento, segue-se uma região de saturação, na qual a largura atinge um valor w_{sat} . Quando o tamanho do sistema L aumenta, w_{sat} também aumenta com uma lei de potência:

$$w_{sat}(L) \sim L^\alpha, \quad t \gg t_\times, \quad (2.23)$$

onde α é o segundo expoente crítico ou de escala, chamado de expoente de rugosidade, que caracteriza a rugosidade da interface saturada. O próprio tempo de cruzamento obedece a uma lei de potência, que depende do tamanho do sistema:

$$t_\times \sim L^z, \quad (2.24)$$

onde z é o expoente dinâmico.

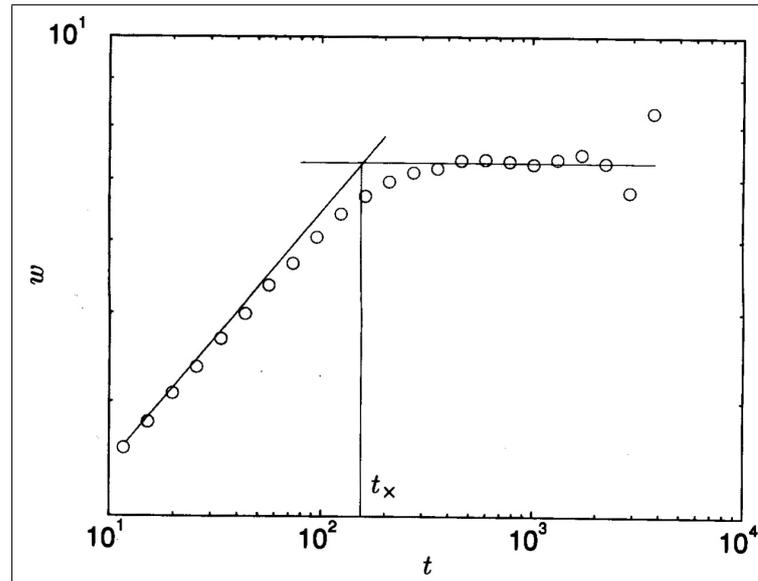


Figura 2.3: Crescimento da largura da interface para o modelo de deposição balística mostrando dois regimes característicos separados pelo tempo de cruzamento t_\times .
Fonte: Ref. [4].

Os expoentes críticos α , β e z não são independentes e caracterizam a classe de universalidade do modelo em estudo [14]. No limite de $t \rightarrow t_\times$ pela esquerda na equação (2.22), temos que $w(t_\times) \propto t_\times^\beta$. No entanto, se o limite for calculado pela direita, obtemos da equação (2.23) que $w(t_\times) \sim L^\alpha$. Usando a equação (2.24), chegamos a:

$$z = \frac{\alpha}{\beta}. \quad (2.25)$$

Essa é uma relação válida para qualquer processo de crescimento* que obedeça à lei de escala de Family-Vicsek [30]:

$$w(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (2.26)$$

onde $f(u)$ é uma função de escala. O fenômeno de saturação constitui um efeito de tamanho finito do sistema e está relacionado com a existência de correlações caracterizadas pelo comprimento de correlação ξ .

2.4 Propriedades de escala

Tipicamente as abordagens utilizadas no estudo do fenômeno de enrugamento cinético das interfaces dizem respeito à determinação da classe de universalidade à qual o processo considerado pertence. Um método direto e bastante usado é medir algumas propriedades de escala, normalmente os expoentes dinâmicos, e compará-las com aquelas obtidas analítica ou numericamente para modelos conhecidos [26].

Um método para identificar classes de universalidade de interfaces obtidas em investigações experimentais usa imagens digitalizadas da superfície em diferentes intervalos de tempo [31]. A hipótese principal é que as velocidades dependentes da inclinação satisfaçam leis de similaridade para a velocidade média. O método particiona uma interface discretizada de tamanho total L em segmentos de comprimento δ e determina a inclinação s para cada segmento i . O procedimento é repetido para a interface capturada num tempo posterior $t + \tau$, de modo a calcular as velocidades locais de cada segmento $u(i, s) = [h(i, t + \tau) - h(i, t)]/\tau$. A velocidade média de todos os segmentos com inclinação s para uma velocidade média da interface v é dada por:

$$u(v, s) = \frac{1}{N(s)} \sum u(i, s), \quad (2.27)$$

*Alguns exemplos são: escoamento em meios porosos, crescimento de colônias de bactérias, imersão de papel em fluido [4]

onde a soma é realizada sobre todos os segmentos com mesma inclinação s e $N(s)$ é a quantidade de tais segmentos. Se o gráfico de $u(v,s)$ em função de s for uma parábola, então há indicação de presença de termo não-linear dependente da inclinação na equação de crescimento. Por fim, traça-se o gráfico de $u(v,s)/v$, o que permite distinguir duas classes de universalidade: isotrópica e anisotrópica. A primeira é obtida se as curvas $u(v,s)$ colapsam em uma só, enquanto que a segunda classe de universalidade advém de uma dependência sistemática de v após o redimensionamento.

Conceitos sobre geometria fractal ajudam a entender melhor o significado das leis de potência. Objetos auto-similares são formados por partes que são similares ao todo, isto é, são invariantes por transformação isotrópica de escala*. As superfícies em geral, porém, pertencem a uma classe maior denominada de fractais auto-afins, que são invariantes sob transformações anisotrópicas. Interessa-nos aqui particularmente uma subclasse de fractais anisotrópicos descritos por funções auto-afins, tais como:

$$h(x) \simeq c^{-\alpha} h(cx), \quad (2.28)$$

onde α é o expoente de rugosidade (também conhecido como expoente de Hölder) e c é um parâmetro. Essa relação mostra que o objeto deve ser reescalado diferentemente na horizontal e na vertical: se $x \rightarrow bx \implies h \rightarrow b^\alpha h$, resultando numa interface que é estatisticamente idêntica à original. Isso implica que a morfologia da interface rugosa possa ser caracterizada por seu expoente de rugosidade [4].

As propriedades de escala de sistemas auto-afins podem ser mensuradas alternativa e complementarmente ao método da seção 2.3 por meio da função correlação de alturas [4, 10, 32]:

$$C(l, \tau) \equiv \left\{ \left\langle [h(x, t) - h(x + l, t + \tau)]^2 \right\rangle_{x, t} \right\}^{1/2}. \quad (2.29)$$

Onde $\langle \cdot \rangle_{x, t}$ significa média sobre os pontos da malha na direção x , sobre os tempos t e sobre eventuais diferentes realizações do processo estocástico.

A equação 2.29 é sensível a viés nos dados, ou seja, se as interfaces apresentarem um inclinação, o comportamento de escala será afetado. Para contornar esse problema,

*Um exemplo familiar é o conjunto de Cantor.

utiliza-se uma variável modificada $\delta h \equiv h - \bar{h}$, que leva em conta as flutuações de altura em torno da interface média \bar{h} . Desse modo, define-se [33]:

$$C(l, \tau) \equiv \left\{ \left\langle [\delta h(x, t) - \delta h(x + l, t + \tau)]^2 \right\rangle_{x, t} \right\}^{1/2}. \quad (2.30)$$

Para calcular o expoente de rugosidade α , tomamos $\tau = 0$ na região saturada e obtemos:

$$C(l, 0) \sim l^\alpha, \quad l \ll \xi, \quad (2.31)$$

onde, ξ é o comprimento de correlação paralela. Por outro lado, se o interesse for determinar o expoente de crescimento β , mede-se a correlação entre interfaces com uma diferença de tempos na fase anterior ao tempo de saturação t_\times :

$$C(0, \tau) \sim t^\beta, \quad t \ll t_\times. \quad (2.32)$$

2.5 Equação KPZ

A primeira equação contínua utilizada no estudo do crescimento de interfaces foi a equação linear de Edwards-Wilkinson (EW) [4]. Posteriormente, guiados por ideias de universalidade, Kardar, Parisi e Zhang [8] estenderam a teoria linear de Edwards-Wilkinson para incluir termos não-lineares na descrição da evolução temporal de interfaces, levando em conta a forma mais simples possível da equação diferencial estocástica não-linear aplicável ao problema de crescimento, desde então conhecida como *equação KPZ*.

Embora não seja possível deduzir de primeiros princípios a equação KPZ, é possível desenvolver um conjunto de argumentos de simetria que levam à teoria linear e depois usar princípios físicos para acrescentar o termo não-linear. O guia é que a equação de movimento seja a mais simples possível e compatível com as simetrias do problema. Propõe-se, então, a seguinte equação geral:

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = G(h, \vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.33)$$

onde G é uma função geral e η é um termo de ruído.

A primeira simetria do problema é a *invariância sob translação temporal*, ou seja, pela transformação $t \rightarrow t + \delta t$. Isso exclui uma dependência explícita de t em G . Também é imposta a *invariância sob translação na direção de crescimento*, isto é, $h \rightarrow h + \delta h$. Assim exclui-se a dependência explícita de h em G , de modo que a equação seja construída a partir de combinações de $\nabla h, \nabla^2 h, \dots, \nabla^n h$. Outra simetria desejada é a *invariância sob translação na direção perpendicular ao crescimento*, $\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \delta \vec{x}$. Portanto, é eliminada a dependência explícita de \vec{x} em G . Impondo também a simetria por *rotação e inversão em torno da direção de crescimento*, excluimos as derivadas ímpares tais como $\nabla h, \nabla(\nabla^2 h)$ e ordens superiores. Considerando essas simetrias e uma interface em equilíbrio, que equivale à simetria acima/abaixo ($h \rightarrow -h$), chegamos à mais simples equação para descrever as flutuações de uma interface em equilíbrio:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v\nabla^2 h + \eta, \quad (2.34)$$

que é justamente a equação linear EW.

A simetria acima/abaixo pode ser quebrada por uma força aplicada perpendicularmente à interface, que seleciona uma direção particular de crescimento para a interface [4]. Além disso, o crescimento lateral implica usualmente na presença de não-linearidades. A equação EW apresenta um mecanismo de translação uniforme para avançar uma superfície, negligenciando os efeitos adicionais associados com os termos de ruído e de difusão [6], conforme ilustrado na figura 2.4. Para compensar esse efeito é necessária a adição de um termo não-linear à equação (2.34). Desse modo, a translação global efetiva decorre da propagação localmente normal.

A velocidade de crescimento v é local e normal à interface, gerando um aumento δh ao longo do eixo h (vide figura 2.5). Assim:

$$\delta h = \sqrt{(v\delta t)^2 + (v\delta t\nabla h)^2} = v\delta t\sqrt{1 + (\nabla h)^2}. \quad (2.35)$$

Se $|\nabla h| \ll 1$, podemos fazer a seguinte expansão:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v + \frac{v}{2}(\nabla h)^2 + \dots, \quad (2.36)$$

sugerindo que um termo não-linear proporcional a $(\nabla h)^2$ deve estar presente na equação

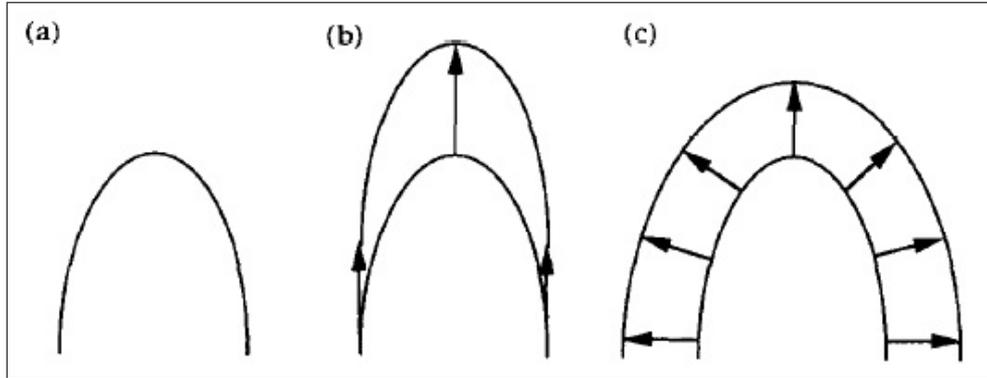


Figura 2.4: (a) Segmento de uma superfície cineticamente enrugada (b) Avanço do segmento pelo mecanismo de translação uniforme. (c) Hipótese de crescimento localmente normal.

Fonte: Ref. [6].

de crescimento, refletindo a situação em que ocorre crescimento lateral. Adicionando esse termo à equação (2.34), obtemos a equação Kardar-Parisi-Zhang (KPZ):

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\vec{x}, t). \quad (2.37)$$

O primeiro termo do lado direito descreve a relaxação da interface devida à tensão superficial ν . O segundo termo é o termo não-linear de mais baixa ordem possível. O ruído $\eta(\vec{x}, t)$ tem uma distribuição Gaussiana com média nula $\langle \eta(\vec{x}, t) \rangle = 0$ e é decorrelacionado espacial e temporalmente:

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle = 2D \delta^d(\vec{x} - \vec{x}') \delta(t - t'). \quad (2.38)$$

Um eventual termo de velocidade inicial pode ser removido com a escolha apropriada de um sistema de coordenadas em movimento. Desse modo, a equação KPZ é reescrita como:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = c + \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.39)$$

onde c é uma constante de velocidade.

A equação (2.37) pode ser mapeada em outras formas conhecidas, tais como a equação de Burgers com ruído para um campo de velocidades sem vórtices ($\nabla \times \vec{v}$), por meio da transformação $\vec{v} = -\nabla h$:

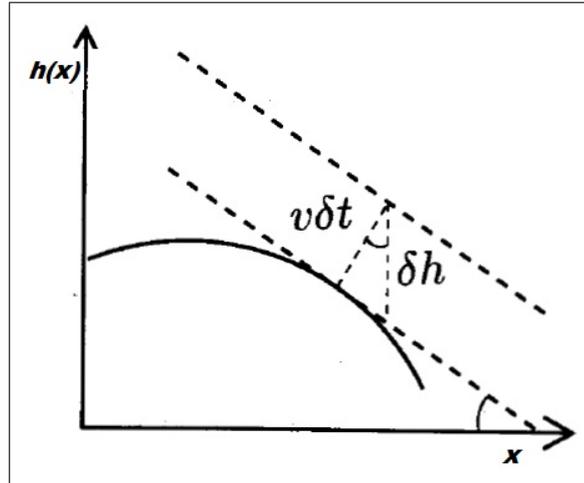


Figura 2.5: Indicação de como ocorre o crescimento localmente ao longo da normal à interface, dando origem ao termo não-linear da equação KPZ a partir de perfis sucessivos de um processo de crescimento seguindo a equação (2.39).

Fonte: Ref. [4].

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \lambda \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} = \nu \nabla^2 \vec{v} - \nabla \eta(\vec{x}, t), \quad (2.40)$$

onde \vec{v} é a velocidade do fluido, ν é a viscosidade e $\nabla \eta$ é uma força aleatória. Observamos dessa maneira uma conexão entre a Hidrodinâmica e padrões de crescimento. Isso induz ao uso do formalismo de grupo de renormalização para o estudo da escala de flutuações dependentes do tempo, uma vez que já fora aplicado por Foster, Nelson e Stephen [34] para o caso da equação (2.40) com sucesso. A transformação do grupo de renormalização consiste na operação de grão-grosso (*coarse-graining*) seguida por uma transformação de escala (*rescaling*) [35].

Em decorrência da natureza dinâmica do processo de crescimento, o sistema não está em equilíbrio. Desse modo, para aplicar o grupo de renormalização à equação KPZ, o método deve ser generalizado [4]. A ideia é resolver perturbativamente a equação KPZ, a partir do conhecimento da solução para o problema linear. O comportamento dos expoentes críticos ou de escala, conforme definidos na seção (2.3), é então determinado para diferentes dimensões d do sistema. Para $d = 1$ encontramos $z = 3/2$ e $\alpha = 1/2$ como valores exatos em consequência do teorema de dissipação-flutuação e da invariância Galileana [8, 4]. Resultados experimentais para queima de papel [9], no entanto, revelaram discrepâncias com relação ao valor do expoente de rugosidade e serão melhor explorados nesta pesquisa. A dimensão $d = 2$ é a dimensão crítica do modelo. O ponto fixo

determinando o comportamento de acoplamento forte não é acessível por uma teoria da perturbação padrão. Para $d \geq 3$ a constante de acoplamento λ é irrelevante e assintoticamente é esperada uma superfície plana ideal com $z = 2$ [8].

2.6 Crescimento de interfaces em meios aleatórios

Vamos considerar agora casos em que não há deposição ou remoção aleatória de partículas sobre um substrato, mas sim, uma interface que se move num meio desordenado. Em um meio inhomogêneo, a velocidade da interface é afetada pela aleatoriedade do substrato. A resistência do meio à propagação da interface varia de ponto a ponto, dando origem a um ruído independente do tempo* $\eta(\vec{x}, h)$. A investigação do problema de uma interface movendo-se em um meio inhomogêneo leva à introdução de novos expoentes críticos e apresenta um grande número de questões ainda sem resposta devido à riqueza e à diversidade do fenômeno [4].

A equação mais geral descrevendo o movimento de uma interface num meio poroso é a equação KPZ [4]. No entanto, num meio desordenado, mais importante do que o ruído térmico, que está sempre presente, é o ruído independente do tempo gerado pela própria desordem. É assumido que esse ruído tenha média nula $\langle \eta(\vec{x}, h) \rangle = 0$ e correlações da forma:

$$\langle \eta(\vec{x}, h) \eta(\vec{x}', h') \rangle = \delta^d(\vec{x} - \vec{x}') \Delta(h - h'), \quad (2.41)$$

onde, $\Delta(u) = \Delta(-u)$ é uma função monótona decrescente para $u > 0$ e decai rapidamente para zero para além duma distância finita a . Logo, $\Delta(u) = \delta(u)$ para $a = 0$ é um caso especial.

Considere a situação geral de uma interface num meio poroso sob a ação de uma força externa F . A equação KPZ com ruído independente do tempo (QKPZ)

$$\frac{\partial h}{\partial t} = F + v \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, h), \quad (2.42)$$

que descreve o movimento da interface, apresenta três regimes:

- (i) Se a desordem do meio trava o avanço da interface, então ela está na fase *pinada* ou travada. Nesta fase a força aplicada F não consegue superar a resistência do meio.

*Do inglês *quenched noise* em oposição ao ruído que varia com o tempo denominado *thermal noise*.

- (ii) Se a força aplicada é aumentada acima de um valor crítico F_c e consegue superar a força de travamento, então a interface inicia um movimento irregular*. Nesta fase de transição são definidos dois novos expoentes críticos. A velocidade média da interface obedece a $v \sim f^\theta$, com $f \equiv (F - F_c)/F_c$ e θ o expoente de velocidade. Ao comprimento de correlação, equivalente ao tamanho característico do domínio pinado, também está associada uma lei de escala: $\xi \sim (F - F_c)^{-\phi}$, onde ϕ é o expoente de correlação.
- (iii) No regime de grandes velocidades, no qual $F \gg F_c$, a velocidade da interface aumenta linearmente com F e o movimento pode ser descrito novamente pela equação KPZ (2.37). O ruído independente do tempo torna-se assintoticamente irrelevante e o ruído térmico é recuperado [10]. O comprimento de correlação iguala-se ao espaçamento da rede.

A aleatoriedade do meio, que gera um ruído independente do tempo, produz efeitos não triviais sobre o movimento e a morfologia da interface. No regime crítico dois novos expoentes (θ, ϕ) são introduzidos para obter uma descrição completa do sistema. Esse ruído altera os expoentes de escala. Experimentos de escoamento em meios porosos [36] e propagação de interfaces em folhas de papel [37, 38] resultaram em expoentes de rugosidade acima do valor teórico esperado. Por outro lado, experimentos cuidadosos mais recentes [10, 39] resultaram em $\alpha \simeq 1/2$.

Interfaces em meios aleatórios podem ser agrupadas em duas classes: modelos que produzem interfaces auto-afins e modelos que levam a interfaces auto-similares. Nosso interesse reside nas interfaces auto-afins, que podem ser subdivididas em duas classes de universalidade principais, a depender da relevância do termo não linear na equação 2.42. Alguns modelos apresentam $\lambda \rightarrow \infty$ (DPD[†]) e outros $\lambda \rightarrow 0$ (RFIM[‡]). Ambos são descritos nas vizinhanças da região crítica pela equação QKPZ.

A existência do termo não linear para um dado modelo pode ser determinada medindo-se a velocidade dependente da inclinação $v(m)$, a qual forma uma parábola para $\lambda \neq 0$. Esse método é utilizado em situações nas quais seja difícil obter os expoentes de escala devido a efeitos de tamanho finito do sistema. A determinação do coeficiente λ é de inte-

*O ruído térmico afeta o movimento da interface na região próxima da transição, fazendo com que a interface mova-se mesmo com $F < F_c$.

[†]Directed percolation depinning model.

[‡]Random field Ising model.

resse especial, pois, quando presente, controla as propriedades de escala da interface [4]. Considerando uma interface crescendo de acordo com a equação KPZ, a velocidade dependente da inclinação da interface $m \equiv \langle \nabla h \rangle$ é dada por:

$$v(m) = v_0 + \frac{\lambda}{2} \int_0^L (\nabla h)^2 + \frac{\lambda}{2} m^2, \quad (2.43)$$

onde, v_0 é a velocidade de fluxo (*drift*), contribuição de uma força externa.

Um fenômeno promissor para ser descrito utilizando o conceito de rugosidade cinética é o processo de queima em meios aleatórios. Sendo esse o foco desta pesquisa, o capítulo seguinte é dedicado a caracterizar qualitativa e quantitativamente os processos de propagação de fogo.

3 *DINÂMICA DE INCÊNDIOS*

Uma das aplicações mais importantes da dinâmica de crescimento de interfaces é o modelamento da propagação de frentes de fogo. Fogo é uma reação de combustão envolvendo um material combustível e um oxidante, frequentemente o ar atmosférico, com liberação de energia suficiente para sensibilizar a pele. Estipula-se a taxa mínima de liberação de energia para se considerar a reação como fogo no patamar de $1000 \text{ kW}/\text{m}^3$ [40]. O incêndio é o fogo fora de controle, que queima aquilo que a ele não é destinado queimar, sendo capaz de produzir danos à vida e ao patrimônio por ação das chamas, do calor e da fumaça [41].

Segundo Quintiere [40] 2,5 milhões de incêndios ocorrem nos Estados Unidos a cada ano, provocando cerca de 5000 mortes. Considerando a população da época (1995) naquele país, tem-se a frequência de morte por incêndio de 1 pessoa em cada grupo de 700. Obviamente o risco de morte por incêndio não é tão alto quanto o risco de morte por acidentes de trânsito, por exemplo. Porém, os prejuízos advindos do incêndio e seus impactos na sociedade (vejam-se os casos do incêndio florestal do Parque Nacional de Brasília em 2007, incêndios do prédio do INSS em Brasília no ano de 2005 e do edifício Joelma em São Paulo em 1974) justificam o investimento e a pesquisa na prevenção, no combate e na investigação de tais sinistros.

O estudo do fogo envolve uma multiplicidade de áreas do saber, tais como a Física, a Química e as Engenharias. Partes importantes da termodinâmica, da mecânica dos fluidos, da transferência de calor e da cinética química são necessárias para descrever o tema.

Devem coexistir quatro elementos para que o fenômeno do fogo ocorra e se mantenha. São eles: combustível, comburente (geralmente, o oxigênio do ar atmosférico), fonte de energia (ou agente ígneo) e reação em cadeia. Esse é o chamado tetraedro (ou quadrado) do fogo.

O processo de queima em um incêndio ocorre em estágios ou fases claramente de-

finidos, seja de um incêndio estrutural ou florestal. O crescimento do incêndio pode ser qualitativamente bem caracterizado pela temperatura como função do tempo, onde são distinguíveis quatro etapas: fases inicial, crescente, totalmente desenvolvida e final [41].

Na fase inicial ocorre a ignição do material combustível na presença de oxigênio abundante do ar atmosférico. Nessa fase, o fogo está restrito ao objeto inicialmente em queima e às suas proximidades (foco do incêndio). É necessário que as perdas de calor do objeto sejam menores que a soma de calor proveniente da fonte externa e do calor gerado no processo de combustão. Nesse sentido, se a fonte de calor for pequena, ou a massa do material a ser queimado for grande, ou ainda, se a sua temperatura de ignição for muito alta, somente irão ocorrer danos locais, sem a evolução para um incêndio de maiores proporções. A duração da fase inicial pode variar de alguns minutos a vários dias.

Na segunda fase, a propagação das chamas em direção aos materiais presentes nas proximidades, por meio de condução, convecção ou radiação, dá origem a uma elevação rápida da temperatura do ambiente e o desenvolvimento de fumaça e outros gases inflamáveis. Esse aumento de temperatura faz com que os materiais ao redor sofram pirólise e atinjam sua temperatura de ignição. Durante a fase crescente, o ar rico em oxigênio é arrastado para dentro da zona de queima, num processo chamado de chama difusa. Durante a fase crescente o fogo em edificações pode apresentar um comportamento extremo, denominado *flashover* (ou generalização do incêndio). Os materiais presentes no ambiente aquecerão até atingir seu ponto de ignição simultaneamente, ocasião em que haverá uma queima instantânea e generalizada desses produtos, ficando toda a área envolvida em chamas.

A fase totalmente desenvolvida é aquela em que ocorre uma queima estável. Continuará ocorrendo a reação entre os gases combustíveis liberados pelo aquecimento dos materiais e o oxigênio do ar ambiente. Porém, pode existir limitação da disponibilidade de quantidade de material combustível ou de concentração de oxigênio no ar. Quando não há mais material combustível suficiente para sustentar a queima ou a concentração de oxigênio é muito baixa, passa-se à fase seguinte, a fase final ou de resfriamento.

Na fase final, as chamas podem deixar de existir se não houver ar suficiente para mantê-las (abaixo de 15% de oxigênio) e o fogo é reduzido a brasas. No caso de incêndio estrutural, pode ocorrer outro fenômeno extremo do fogo, denominado *backdraft* (ou explosão de fumaça), que ocorre devido a uma ventilação inadequada no ambiente em que

se dava uma combustão incompleta. Quando o recinto aquecido é suprido perigosamente com oxigênio, reinicia-se violentamente a combustão.

A caracterização quantitativa do crescimento do incêndio é feita pelo estudo da *ignição, propagação de chamas e taxa de queima*. A ignição informa quando o fogo começa a crescer. A propagação das chamas permite definir as fronteiras da área de queima e a taxa de queima fornece a quantidade de energia liberada na região de interesse.

3.1 Ignição

A ignição pode ser definida como um processo no qual uma rápida reação exotérmica é iniciada, que se propaga e provoca uma mudança no material envolvido, produzindo temperaturas muito mais elevadas do que a ambiente [42]. Existem diferentes mecanismos de ignição para combustíveis gasosos, líquidos e sólidos. No entanto, como a reação de queima ocorre geralmente na fase gasosa, é importante iniciar o estudo pela ignição de misturas inflamáveis de vapor/ar. A ignição pode ocorrer de forma espontânea, autoignição, ou induzida por uma chama piloto, ignição induzida. A chama piloto é uma fonte externa de calor, que na prática pode ser uma faísca, uma centelha, uma superfície aquecida ou, ainda, as chamas do fogo.

Embora seja comum falar em gases ou líquidos inflamáveis, na verdade, as misturas só queimarão em determinadas faixas de concentração de combustível no ar. Essas concentrações são denominadas *limites superior e inferior de inflamabilidade*. O aumento de temperatura faz com que os limites sejam alargados (vide figura 3.1). Para uma dada temperatura, dentro dos limites de inflamabilidade de um material, uma pequena fonte de energia inicia uma queima que se sustenta na mistura mesmo depois de retirada a fonte de calor. Essa temperatura é conhecida como *ponto de ignição* (ou *firepoint*). Se a temperatura for reduzida, o vapor se condensará e ainda assim terá limites superior e inferior de inflamabilidade. A temperatura do limite inferior da fronteira da pressão de vapor saturado é chamada de *ponto de fulgor* (ou *flashpoint*). Nessa temperatura, a chama inicia-se ao entrar em contato com uma fonte de calor externa, mas não se sustenta. No outro extremo de temperatura está o *ponto de autoignição*, que é a temperatura a partir da qual a queima ocorre mesmo sem entrar em contato com uma chama piloto.

Um importante fator a ser considerado no estudo da dinâmica de incêndios é se a mistura oxigênio-combustível se dá antes da ignição ou se ocorre na zona de queima. No

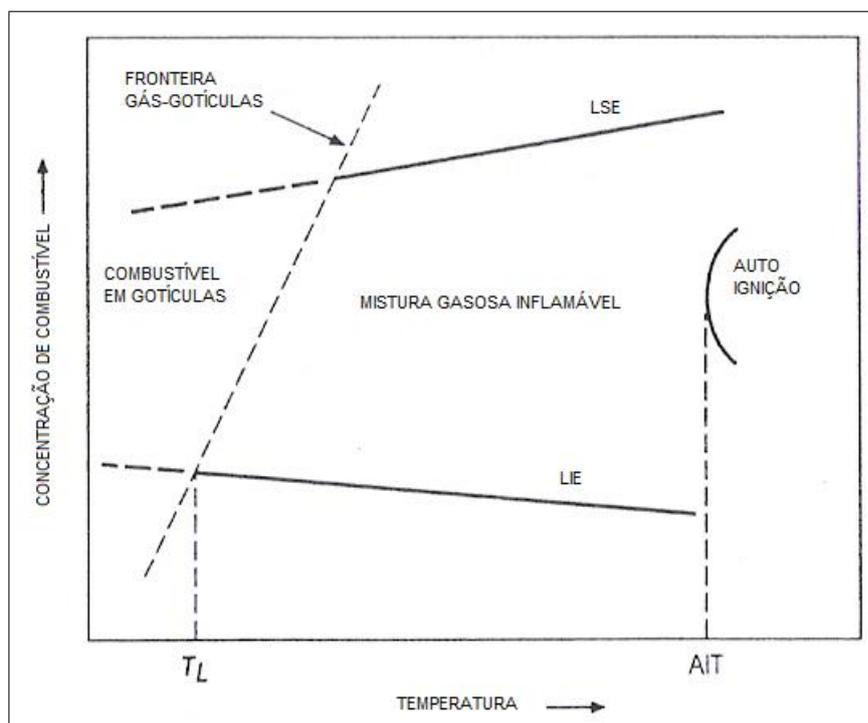


Figura 3.1: Limites de inflamabilidade.

Fonte: Ref. [40].

primeiro caso temos a chama pré-misturada, que pode ser obtida num bico de Bunsen ou na boca de um fogão. O segundo caso é o da chama difusa, que é típico de incêndios naturais. A chama difusa é o processo de combustão no qual o combustível e o oxigênio são transportados para a zona de queima em decorrência da diferença de concentração [40]. Esse processo de transporte é chamado de difusão e é governado pela lei de Fick, que estabelece que uma dada espécie se move de uma região de alta para outra de baixa concentração.

A maior parte dos combustíveis sólidos passa para a fase vapor antes de alcançar a ignição, mediante pirólise. Exemplos de exceção dessa regra são: o enxofre, os metais alcalinos, a cânfora e a naftalina, que queimam diretamente em sua forma sólida [41]. Da mesma forma, os combustíveis líquidos não entram em combustão diretamente, somente após a vaporização ou sua dissolução em pequenas gotas (atomização) que ocorre a queima. A taxa de evaporação é controlada pela temperatura do líquido e pela pressão. Na superfície de um líquido evaporando, a concentração de vapor está em equilíbrio e é máxima para aquela temperatura. Aumentando a temperatura chega-se à temperatura de ebulição. No entanto, não é preciso que se chegue a tal temperatura para que ocorra a queima, bastando chegar ao ponto de fulgor ou ao ponto de ignição.

A temperatura do ponto de fulgor para líquidos pode ser medida com boa precisão e também ser computada teoricamente. Para tanto usa-se o aparato de taça fechada de Pensky-Martens: o líquido é aquecido lentamente ($5-6^{\circ}\text{C}$ por minuto) num vaso fechado e uma pequena chama piloto é introduzida na parte do recipiente com vapor. O ponto de fulgor é anotado quando ocorre a ignição da mistura. A proporção de vapor no ar pode ser calculada a partir da pressão de vapor de equilíbrio do líquido por meio da equação de Clapeyron-Clausius [42]. A classificação dos combustíveis líquidos por meio do ponto de fulgor é uma forma conveniente de quantificar os riscos de incêndio da substância. Líquidos com baixo ponto de fulgor representam maior risco, pois à temperatura ambiente podem queimar facilmente na presença de uma chama piloto. Já os líquidos com temperaturas de ponto de fulgor mais elevadas somente queimarão se passarem do ponto de ignição.

A temperatura de ignição de sólidos não é tão precisamente determinada como a dos líquidos. O ponto de ignição dos sólidos depende da concentração de combustível volatilizado e da forma como o material é aquecido. A formação de voláteis inflamáveis envolve decomposição química do sólido, que é um processo irreversível. Para os sólidos não existe equivalente à pressão de vapor de equilíbrio que possa ser usado para calcular o ponto de fulgor como no caso dos líquidos. No entanto, é razoável assumir que valham os mesmos princípios anteriormente empregados, isto é, que o ponto de fulgor esteja associado a condições mínimas para que a pirólise atinja o limite inferior de inflamabilidade e que o ponto de ignição corresponda a uma mistura próxima da estequiométrica ideal junto à superfície.

A ignição dos combustíveis sólidos possui um parâmetro chave, que é a temperatura da superfície. Se e quando a superfície atinge a temperatura de ignição é a chave para encontrar o tempo de ignição. Isso dependerá da forma como se dá o aquecimento e das propriedades do material, bem como da sua espessura. Por exemplo, madeira aquecida por um fluxo de ar quente ignifica a aproximadamente 200°C , enquanto que se for aquecida por fluxo de calor radiativo sua temperatura de ignição varia entre 300 e 400°C [40]. O fluxo de calor radiativo crítico é muitas vezes usado como critério para o alcance da ignição induzida embora seja sensível a mudanças nas perdas de calor da superfície e, portanto, dependente da geometria e orientação da superfície. A partir dos estudos de Lawson e Simms [43] e outros dados, encontrou-se, por exemplo, um fluxo mínimo de 12 KW/m^2 para a ignição induzida da madeira [42].

Um sólido atingirá sua temperatura de ignição se o fluxo de calor líquido* \dot{q}'' for suficientemente convertido em energia interna, capaz de aumentar a temperatura. Quão rápido se dá esse processo depende da capacidade de armazenamento de energia do material, que é medida em termos da densidade ρ , do calor específico c e da espessura l . Um caso de aquecimento radiativo de uma placa fina infinita com propriedades térmicas uniformes e independentes da temperatura pode ilustrar a situação. O tempo t para se alcançar a temperatura de ignição T_{ig} a partir de uma temperatura inicial T_0 é dada por [40]:

$$t_{ig} = \frac{\rho cl}{\dot{q}''} (T_{ig} - T_0). \quad (3.1)$$

Analogamente, obtém-se o tempo de ignição para materiais espessos pela relação [42]:

$$t_{ig} = \kappa \rho c \left(\frac{T_{ig} - T_0}{\dot{q}''} \right)^2. \quad (3.2)$$

No entanto, essas fórmulas aplicam-se bem somente para taxas elevadas de aquecimento e curtos períodos de tempo. A figura 3.2 mostra um exemplo do comportamento mais completo. É de se reparar que uma baixa taxa de aquecimento pode não levar à ignição do material. Esse é um comportamento válido para determinadas condições e não pode ser extrapolado linearmente para outras situações. As perdas de calor para a vizinhança foram ignoradas na obtenção das equações (3.1) e (3.2). Para tempos longos (de 5 a 10 min), quando não se pode ignorar os efeitos das perdas de calor, o comprimento característico de condução térmica pode ser usado como indicador da profundidade de penetração da ação térmica. Desse modo, materiais com $l > 4\sqrt{\alpha t}$ são ditos “espessos” e materiais com $l < \sqrt{\alpha t}$ são ditos “finos”, onde $\alpha = \kappa/\rho c$ é a difusividade térmica.

3.2 Propagação de chamas

Após a ignição vem a *propagação das chamas*, definida como o processo no qual o perímetro do fogo cresce [40]. Especificamente interessa a extensão da região de pirólise

*A simbologia adotada neste capítulo utiliza o ponto para derivada temporal $\dot{q} \equiv \frac{\partial q}{\partial t}$ e o apóstrofo para derivada espacial $q' \equiv \frac{\partial q}{\partial x}$.

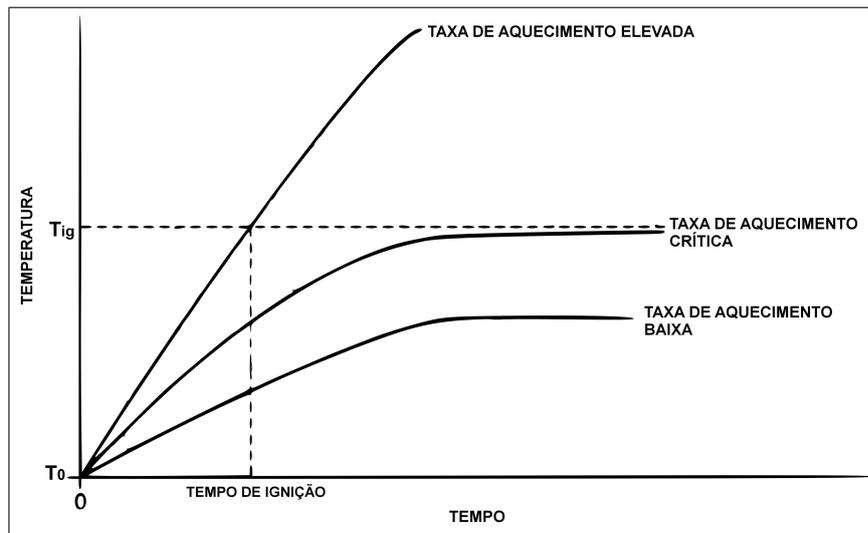


Figura 3.2: Comportamento da ignição de acordo com a taxa de aquecimento do material. Fonte: Ref. [40].

da fase condensada. De forma mais geral pode-se falar em *propagação do fogo*, que se aplica ao processo de crescimento da combustão, incluindo a propagação superficial de chamas e o crescimento da incandescência. Nesse avanço da frente de fogo, as fronteiras da chama agem como fonte de aquecimento do material ainda não queimado à sua frente e envolve problemas não-estacionários de transferência de calor.

A velocidade de propagação das chamas v é definida como a taxa de variação temporal da posição da fronteira do fogo x_p , que denota a região de pirólise na figura 3.3. Na posição x_p atinge-se a temperatura de ignição T_{ig} , com uma região de influência rotulada por δ_f , onde a temperatura diminui até se chegar à temperatura inicial da superfície T_s [44]. Logo, uma definição para a velocidade de propagação é $v = \frac{\delta_f}{t_{ig}}$. No entanto, essa equação não tem aplicação prática.

A equação fundamental da velocidade de propagação das chamas é usada para permitir a determinação de v nos casos concretos. Ela estabelece que a taxa de energia requerida para aquecer o material combustível à frente da região pirolisada, até sua temperatura de ignição, é igual ao fluxo de calor líquido \dot{q}'' a partir da região de queima [40]:

$$\dot{q}'' = \rho v \Delta h, \quad (3.3)$$

onde $\Delta h = c(T_{ig} - T_0)$ é a variação na entalpia por unidade de massa do combustível ao ser aquecido da temperatura inicial até a temperatura de ignição. A determinação do fluxo

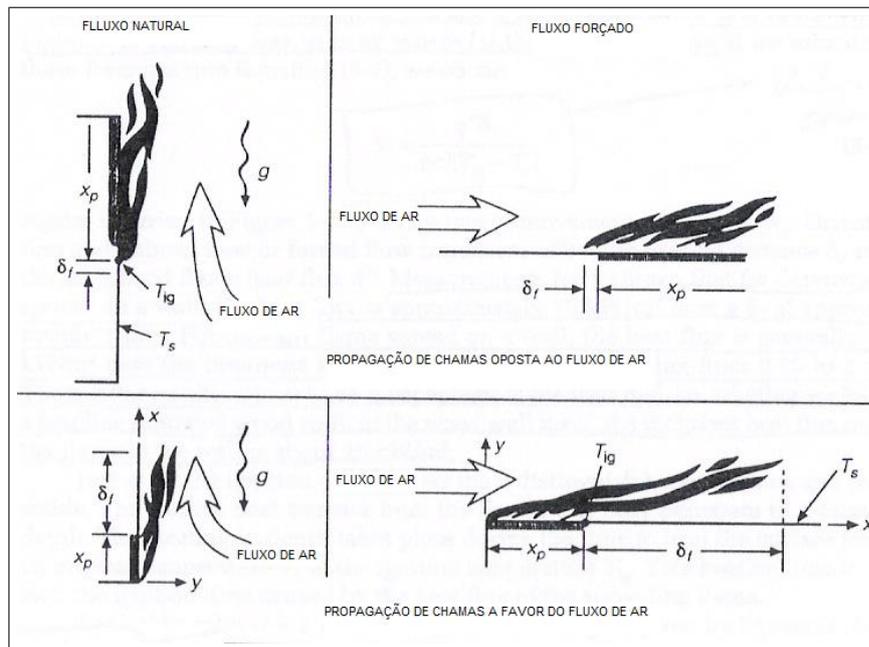


Figura 3.3: Modos de propagação de chamas.

Fonte: Ref. [40].

de calor \dot{q}'' a partir de primeiros princípios é um problema complexo, que ainda limita a capacidade de predição da velocidade de propagação de chamas, exceto para alguns casos bastante particulares. Considerando a espessura crítica dada pela equação (3.6) e a região de influência do fluxo de calor das chamas δ_f na equação (3.3), obtém-se da equação (3.1) a velocidade de propagação de fogo para materiais finos [44]:

$$v \propto (\rho c l)^{-1} \left(\frac{T_{ig} - T_0}{\dot{q}''} \right). \quad (3.4)$$

Analogamente, para materiais espessos, tipicamente acima de 2 mm de espessura, obtém-se:

$$v \propto (\kappa \rho c)^{-1} \left(\frac{T_{ig} - T_0}{\dot{q}''} \right)^2. \quad (3.5)$$

Em alguns casos, a condutividade térmica κ é proporcional à densidade ρ . Isso faz com que a taxa de propagação das chamas seja altamente sensível à relação massa/volume do material combustível e explica em parte o motivo pelo qual plásticos esponjosos e outros materiais de baixa densidade propagam chama e queimam tão rapidamente.

A propagação superficial das chamas pode ser influenciada por fatores físicos, quí-

micos e ambientais. São eles: composição do combustível, presença de retardantes, temperatura inicial da superfície, orientação da superfície, direção de propagação, espessura, capacidade térmica, condutividade térmica, densidade, geometria e continuidade do material, composição da atmosfera, pressão atmosférica, temperatura ambiente, fluxo de calor imposto e velocidade do ar [42].

A propagação das chamas nos combustíveis líquidos tem mecanismos similares aos dos combustíveis sólidos. Entretanto, no líquido, a propagação de chamas pode induzir movimentos convectivos. A variação da tensão superficial é o principal mecanismo que faz diferir a propagação de chamas em líquidos e sólidos. Uma vez que a tensão superficial decresce com a temperatura, o líquido mais frio à frente da chama tem tensão superficial maior, que arrasta a chama para essa região mais fria do líquido. Desse modo, velocidades de propagação em líquidos são maiores do que aquelas esperadas em sólidos por causa dos fluxos devidos ao empuxo e à variação da tensão superficial.

Dentre os fatores que influem na taxa de propagação de chamas, destacam-se a orientação da superfície e a direção de propagação. A propagação para baixo é mais lenta e menos sensível à orientação da superfície, ficando em torno de 1,3 mm/s para ângulos entre -90° e -30° (vide figura 3.4). Variações de -90° a $+90^\circ$ na superfície produzem taxas de propagação até 50 vezes maiores. Isso se deve à forma como a entrada de ar ocorre na zona de queima. Os fluxos resultantes do empuxo e do vento natural da atmosfera podem ajudar a propagação das chamas caso estejam no mesmo sentido, denominando-se *a favor do fluxo de ar*, ou podem dificultar a propagação se estiverem em sentido contrário, denominando-se *contra o fluxo de ar*. O vento a favor aumenta a taxa de propagação das chamas exponencialmente até um certo limite, onde ocorre a extinção. O vento no sentido oposto, a baixas velocidades, favorece a propagação por promover a mistura ar-combustível. Porém, a altas velocidades há uma tendência de diminuição da taxa de propagação em decorrência do resfriamento do combustível não queimado.

Exemplificando a diferença entre os dois tipos de propagação, tomemos o caso da propagação vertical para baixo. Nessa situação os gases da chama fluem para longe da área não-queimada, impossibilitando a transferência de calor por convecção e radiação. Desse modo, a condução na fase gasosa é o mecanismo predominante para combustíveis finos e a condução na fase sólida é dominante para combustíveis espessos, ou seja, a espessura do material é um fator a ser considerado. Nos combustíveis finos a queima ocorre de ambos os lados do objeto, contribuindo para maiores taxas de propagação entre

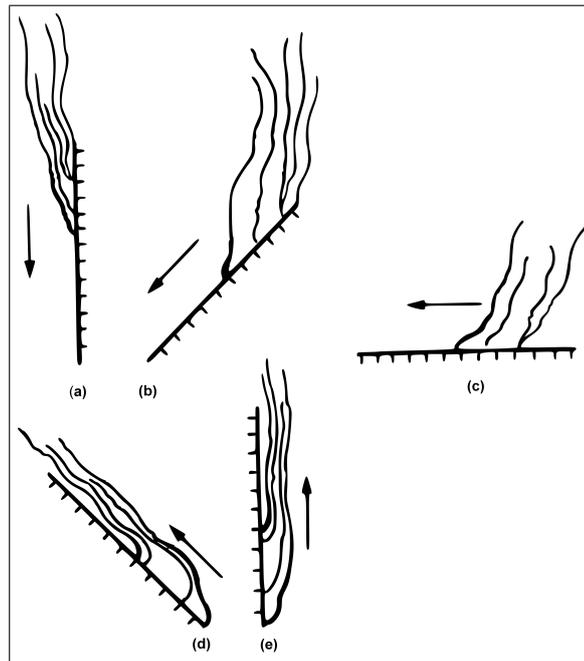


Figura 3.4: Influência da inclinação da superfície na taxa de propagação de chamas: (a)-90°; (b)-45°; (c) 0°; (d)+45°; (e)+90°.

Fonte: Ref. [42].

-30° e 0°.

Ainda que a propagação de chamas possa ser tratada como um problema de estado quasi-estacionário, ele envolve processos de transferência de calor transiente. A frente de fogo representa uma fronteira entre material queimado e não-queimado. Assim como na ignição, a transferência de calor da superfície para o interior do combustível influencia o processo significativamente. Desse modo, se o combustível é muito fino ele pode ser tratado pelo modelo da capacidade térmica total (*lumped*), no qual não há gradiente de temperatura entre as faces do objeto. Nesse caso, a taxa de propagação é inversamente proporcional à espessura do material. Para combustíveis espessos, a propagação da chama é independente da espessura, chegando a anular-se para espessuras muito elevadas, como por exemplo, papel com espessura superior a 8,4 mm [42]. A espessura crítica que define materiais termicamente espessos e finos está relacionada com a raiz quadrada da difusividade térmica:

$$l_{cr} \propto \sqrt{\alpha t_{ig}} = \sqrt{\frac{\kappa}{\rho c} t_{ig}}. \quad (3.6)$$

A largura w do objeto tem pouco ou nenhum efeito sobre a taxa de propagação para

baixo. No entanto, para cima observou-se experimentalmente que $v \propto \sqrt{w}$ [42]. Esse resultado, válido para $6 < w < 100$ mm, está relacionado com o aumento da altura da chama a partir do aumento da área de queima. Isso ilustra a dificuldade de realizar testes em pequenas escalas para acessar o comportamento do fogo. Além disso, há o fato de que alguns materiais passam da fase sólida para a líquida enquanto queimam, dificultando as análises. Para combustíveis sólidos espessos com largura apreciável, espera-se que o mecanismo de transferência de calor radiativo à frente da chama seja o principal mecanismo de propagação do fogo devido ao tamanho desta.

A composição da atmosfera influencia pela proporção de oxigênio presente, entenda-se atmosfera rica em oxigênio como sendo aquela em que a pressão parcial de O_2 é maior do que a normal, isto é, 160 mmHg. A taxa de propagação das chamas nesse caso é maior porque sua temperatura é maior e aumenta a transferência de calor para o combustível ainda não queimado. Taxas elevadas de propagação são observadas em regiões de alta pressão atmosférica por causa do enriquecimento de oxigênio, que aumenta a estabilidade da chama na superfície. Nota-se também que essa dependência é muito menor para combustíveis finos do que para espessos [42].

A temperatura do combustível altera a taxa de propagação pois, quanto maior a sua temperatura, menor será a quantidade de calor necessária para elevar o combustível ao ponto de ignição. A existência de um fluxo de calor radiativo imposto externamente à região de queima aumenta a taxa de propagação, primeiramente por pré-aquecer o combustível não queimado e também por prover chamas mais fortes, devido à taxa de queima maior atrás das chamas. Os dois fatores juntos fornecem mais calor à frente da linha de fogo.

3.3 Taxa de queima

Taxa de queima é definida como a massa de combustível sólido ou líquido consumida por unidade de tempo. Salienta-se que não necessariamente todo combustível vaporizado será queimado, isto é, reagirá com o oxigênio. Por exemplo, grandes incêndios estruturais podem alcançar uma situação de ventilação deficiente e, assim, nem todo combustível pirolizado irá queimar. A taxa de suprimento de voláteis a partir da superfície do combustível está diretamente relacionada à taxa de transferência de calor da chama para a superfície do material. A fórmula preditiva geral para a taxa de queima \dot{m}'' é:

$$\dot{m}'' = \frac{\dot{q}''}{L_v}, \quad (3.7)$$

onde L_v é o calor requerido para produzir voláteis (calor de vaporização), que é uma propriedade termodinâmica expressa com boa acurácia para combustíveis líquidos. No entanto, para os combustíveis sólidos, especialmente aqueles que queimam deixando resíduos, o calor de vaporização é uma propriedade média aproximada, que pode variar com o tempo.

O fluxo de calor líquido \dot{q}'' é principalmente devido às chamas acima da superfície do material incendiado, mas pode ser aumentada por fontes externas de calor radiativo. Esse fluxo de calor da chama para a superfície está relacionado com a taxa de liberação de energia dentro da chama e envolve as três formas de transferência de calor: condução, convecção e radiação. Desse modo, podemos explicitar o termo \dot{q}'' assim:

$$\dot{q}'' = \dot{q}_F'' + \dot{q}_E'' - \dot{q}_L'', \quad (3.8)$$

onde \dot{q}_F'' é o fluxo de calor a partir da chama, que pode ser decomposto em três parcelas referentes a cada forma de transferência de calor, \dot{q}_E'' é o fluxo de calor radiativo externo e \dot{q}_L'' , as perdas de calor pela superfície.

A equação (3.7) é uma ferramenta simples, porém, apropriada para estimar a taxa de queima, ainda que L_v seja apenas uma média aproximada para combustíveis que carbonizam e que o fluxo de calor líquido não seja prontamente acessível. Na verdade \dot{q}'' não pode ser firmemente definido sem medidas experimentais específicas. Valores típicos do fluxo da taxa de queima vão de 5 a 50 g/m²s. A extinção do fogo pode ocorrer para valores inferiores a 5 g/m²s quando o oxigênio é reduzido e também se a formação de vapor d'água é suficiente para consumir grande parte do fluxo de calor para a superfície.

A taxa de liberação de energia \dot{Q} é o fator isolado mais importante para caracterizar o comportamento do fogo [42]. Ela, mais do que qualquer outro fator, representa o tamanho do fogo e seu potencial para causar danos. A taxa de liberação de energia está relacionada à taxa de queima da seguinte maneira:

$$\dot{Q} = \dot{m}'' A_f \Delta H_c, \quad (3.9)$$

onde A_f é a área superficial do combustível e ΔH_c é o calor de combustão efetivo.

O calor de combustão efetivo difere do teórico, sendo aplicável durante a porção flamejante do fogo. O calor de combustão representa a energia química liberada por unidade de massa de combustível vaporizado durante a reação de combustão. É possível medir esse valor para combustíveis sólidos usando um aparelho chamado bomba de oxigênio. Medidas típicas de ΔH_c teórico para a madeira é de 19,5 kJ/g, no entanto, para a fase flamejante do fogo obtém-se 13 kJ/g enquanto que para a fase de incandescência (brasa) chega-se a 30 kJ/g [40]. A taxa de liberação de energia pode ser acessada experimentalmente por meio do cone calorímetro. Quase todo combustível sólido requer decomposição química (pirólise) para produzir os vapores combustíveis que irão desprender-se da superfície e queimar na chama. A descrição da pirólise é bastante complexa, porém, essa dificuldade pode ser contornada com o uso de dados empíricos de testes realizados em cone calorímetro, os quais permitem identificar os riscos de incêndio de um dado material.

Das equações (3.7) e (3.9) percebe-se que a taxa de liberação de energia de um material em chamas é fortemente dependente da razão de combustibilidade, $\Delta H_c/L_v$. Para combustíveis sólidos essa razão varia de 3 a 30, enquanto que para líquidos inflamáveis, como o heptano, pode-se chegar a 93 [42]. Exame detido das equações acima revela que existem muitos fatores contribuintes que determinam a taxa de liberação de energia. Além disso, incluem propriedades não somente relacionadas com o material em si, mas também com o processo de combustão dentro da chama e as formas de transferência de calor.

3.4 Incêndio em vegetação

As seções anteriores trataram da queima de materiais combustíveis considerando a propagação sobre uma superfície contínua, porém, de igual importância é o comportamento do incêndio em materiais descontínuos. Estão nessa categoria os incêndios em vegetação, em materiais porosos e até mesmo os grandes incêndios em aglomerados residenciais urbanos. Uma particularidade dessa categoria de incêndio é que o material está repleto de vazios, logo o fluxo de calor responsável pela propagação das chamas ocorre internamente ao volume do material e não apenas sobre (externamente) a superfície. Outra consequência desses vazios é ter de se considerar não mais a densidade do material,

mas sim uma densidade média* ρ_b definida como a razão entre a massa de material combustível e o volume total ocupado, incluindo os vazios [40].

Se os elementos do material combustível puderem ser considerados finos, então a equação (3.4) permanece válida. Uma vez que o fluxo de calor e as propriedades térmicas sejam considerados constantes, então, a velocidade de propagação v é inversamente proporcional à densidade média:

$$v = \frac{C}{\rho_b}, \quad (3.10)$$

onde a constante C é aproximadamente $0,07 \text{ kg/m}^3$ no caso de combustíveis florestais e $0,05 \text{ kg/m}^3$ no caso de engradados de madeira com elementos de 3 cm de diâmetro [40]. Thomas [45] reporta ainda outra equação considerando a propagação de chamas em ambientes abertos com vento a favor:

$$v = (1 + U_\infty) \frac{C}{\rho_b}, \quad (3.11)$$

onde U_∞ é a velocidade do vento.

3.5 Modelagem computacional do fogo

Em razão da grande complexidade dos fenômenos envolvidos num incêndio e da dificuldade de controlar todas as variáveis em experimentos de escala real, foram desenvolvidos modelos computacionais para descrever o incêndio. Esses modelos evoluíram fortemente com o aumento do poder computacional. Contudo, o uso de tais modelos requer conhecimento dos fundamentos físicos e químicos da dinâmica de incêndios para acessar e interpretar os resultados, determinando sua validade e acurácia. A modelagem computacional de incêndios pode utilizar dois métodos: o *método probabilístico* e o *método determinístico* [18]. No método probabilístico não se faz uso direto dos princípios físicos e químicos envolvidos no fogo, mas sim, de previsões estatísticas sobre a transição de um estágio para outro do crescimento do incêndio. Envolve a distribuição de probabilidades de determinados eventos ocorrerem a partir de um cenário especificado. As probabilidades de evolução do fogo de uma fase para outra são determinadas a partir

*Do inglês *bulk density*.

do conhecimento de dados experimentais e de dados estatísticos de ocorrências reais.

O método determinístico utiliza princípios físicos e químicos sobre a natureza do incêndio. Este método divide-se em diversas categorias, de acordo com o tipo de problema a ser investigado: transporte de calor e de fumaça, ativação de sistemas automáticos de combate (*sprinklers*) e de detectores de incêndio, evacuação de pessoas e perfis de temperatura em elementos estruturais, entre outros. Especificamente, quanto ao transporte de calor e de fumaça no incêndio, são usadas duas classes de modelamentos computacionais: modelos de camadas (ou duas zonas) e modelos de campos ou CFD (*computational fluid dynamics*).

Os métodos probabilísticos podem ser combinados com os métodos determinísticos para dar origem a métodos híbridos. Neste caso, o fogo é considerado determinístico uma vez que ele é totalmente definido, mas as entradas de dados são tratadas como variáveis aleatórias (probabilísticas). Esse método é aplicado na avaliação de riscos e análise de incertezas nos métodos determinísticos [18].

3.5.1 Métodos probabilísticos

Nos métodos probabilísticos o curso do incêndio é descrito como uma série de estágios discretos que resumizam a natureza do fogo. Existem três formas básicas de modelos puramente probabilísticos: modelo de *rede* (*network*), *estatístico* e de *simulação* [18].

Os modelos de rede usam representações gráficas de trajetórias pelas quais os objetos (energia, informação) podem se mover de um ponto a outro. Existem as árvores de decisão e as árvores de evento, que associam às relações de causalidade parâmetros lógicos de escolha entre dois ou mais possíveis caminhos a serem seguidos.

Os modelos estatísticos envolvem a descrição do fenômeno aleatório por meio de uma distribuição de probabilidade apropriada, enquanto que os modelos de rede atribuem probabilidade univariada para cada evento. A distribuição de probabilidade pode usar dados históricos ou cálculos de engenharia.

O termo modelos de simulação é usado para descrever simulações computacionais onde diferentes conjuntos de condições são testadas um grande número de vezes para determinar como os dados de saída são afetados.

3.5.2 Métodos determinísticos

Os métodos determinísticos, por utilizarem princípios físicos e químicos na determinação da evolução do incêndio, serão vistos em maior detalhe nesta seção. Iniciaremos o estudo pelo modelo de camadas e depois apresentaremos o modelo de campos.

O modelo em camadas (ou zonas) divide o ambiente incendiado em duas partes uniformes: uma camada superior com gases quentes e outra camada inferior fria, resultante da estratificação térmica, devida ao empuxo. O fogo é considerado uma fonte de energia e de massa. Estas camadas interagem por meio da troca de calor e de massa. As leis de conservação de massa e de energia são aplicadas a cada camada. Deste modo, os modelos de camadas são entendidos como problemas de valor inicial para um sistema de equações diferenciais [46].

As equações do modelo de camadas são derivadas da aplicação da equação de continuidade, da primeira lei da termodinâmica e da equação de estado para gases ideais, além das definições de densidade e energia interna para cada camada. A conservação de momento é ignorada. São onze equações-chave [47]. Usando a primeira lei da termodinâmica, podemos escrever equações para a pressão, a energia interna, o volume, a densidade e a temperatura em cada camada. Assumimos que as taxas de calor e de massa podem ser calculadas a partir das propriedades de cada camada, tais como temperatura, densidade e outras [46]. Portanto, expressões adicionais para essas taxas de fluxo devem ser obtidas.

Além das 11 equações, temos 7 vínculos: a definição de densidade, a definição de energia interna e a aplicação da lei dos gases ideais em cada camada, bem como o fato de que o volume total das camadas é fixo. Como existem mais equações do que variáveis, esse é um sistema superdeterminado, bastando resolver quatro equações (11 equações com 7 vínculos). Cada sistema computacional baseado no modelo de camadas utiliza um algoritmo conveniente.

Os modelos computacionais determinísticos mais sofisticados são os modelos de campos, que utilizam a técnica de modelamento via dinâmica de fluidos computacional (CFD). Ela é baseada na solução completa, tri-dimensional e dependente do tempo das equações fundamentais de conservação de massa, de energia e de momento [18]. O uso de modelos CFD permite descrever incêndios em geometrias complexas e incorporar uma grande variedade de fenômenos físicos [48].

No modelo de campos, o ambiente incendiado é dividido em subvolumes (células)

e as equações de conservação são aplicadas a cada célula. Nesse modelo, a conservação de momento é explicitamente imposta. Assim, variáveis adicionais (as componentes da tensão viscosa devida ao escoamento do fluido) surgem no conjunto de equações. A substituição dessas na equação de conservação de momento (segunda lei de Newton aplicada ao escoamento do fluido) resulta nas equações de Navier-Stokes e a solução destas é central para qualquer algoritmo de CFD [49].

Os códigos para modelamento via CFD são aplicáveis a diversas áreas como transporte de calor e de fumaça, mudança de fase, escoamento multifásico, reações químicas entre outras. No entanto, cada aplicação envolve particularidades que implicam em algoritmos diferentes. Desse modo, o modelamento CFD para incêndio envolve submodelos. Os submodelos mais importantes são: o modelamento da turbulência, o modelamento da fuligem e da radiação e o modelamento da combustão [18].

O modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$ pode ser baseado na forma média de Reynolds das equações de Navier-Stokes (RANS - *Reynolds-averaged form of the Navier-Stokes equations*). Duas equações diferenciais parciais de transporte são resolvidas, uma para a energia cinética turbulenta κ e outra para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta ϵ . A principal desvantagem desse modelo é considerar que a turbulência não tem direção privilegiada, enquanto que no caso real de incêndio a gravidade atua na direção vertical. Outro meio de modelar a turbulência é por meio da simulação de grande escala (LES - *large eddy simulation*). A aplicação da técnica de LES aos incêndios garante maior fidelidade espacial e temporal às simulações, porém, às expensas de maior poder computacional. LES refere-se à descrição da turbulência como uma mistura dos gases combustíveis e dos produtos da combustão com a atmosfera da vizinhança do fogo. A idéia básica por trás da técnica de LES é que os vórtices importantes para a maior parte das misturas são grandes o suficiente para serem calculados com razoável acurácia a partir das equações da dinâmica dos fluidos [17].

As equações que descrevem o transporte de massa, momento e energia em escoamentos induzidos pelo fogo (termicamente) foram deduzidas por Rehm e Baum [50]. Essas equações da combustão para números de Mach baixos descrevem o movimento a baixa velocidade de um gás dirigido pela liberação de calor e pelas forças de empuxo [48]. Esse conjunto de equações de conservação de massa, momento e energia para um fluido Newtoniano, conforme aproximações de Anderson *et al.* [49] é adotado para o simulador de dinâmica de incêndios (FDS - *Fire Dynamics Simulator*), que é um modelo CFD desen-

volvido pelo Instituto Nacional de Padrões e Tecnologia dos Estados Unidos da América (NIST), e utilizado para simular cenários de incêndio nesta pesquisa. A conservação de massa é dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} = \dot{m}_b''', \quad (3.12)$$

onde \vec{u} é o vetor velocidade e \dot{m}_b''' , a taxa de produção de massa por unidade de volume. A conservação de momento é expressa por:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} \vec{u} + \nabla p = \rho \vec{g} + \vec{f}_b + \nabla \cdot \tau_{ij}, \quad (3.13)$$

onde p é a pressão e $\vec{g} = (0, 0, -g)$ é a aceleração da gravidade, $\vec{u} \vec{u}$ é uma matriz 3x3 formada pela multiplicação de $\vec{u}^T \vec{u}$ e \vec{f} representa as forças externas. O tensor tensão τ_{ij} envolve tensões tangenciais e normais e é definido por:

$$\tau_{ij} = \mu \left[2\vec{S}_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla \cdot \vec{u}) \right], \quad (3.14)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica do fluido, δ_{ij} é o delta de Kronecker e $\vec{S}_{ij} = (1/2)(\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i)$ é o tensor deformação, com $i, j = 1, 2, 3$. Por sua vez a conservação de energia é adotada da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot \rho h \vec{u} = \frac{Dp}{Dt} + \dot{q}''' - \dot{q}_b''' - \nabla \cdot \dot{q}'' + \Phi, \quad (3.15)$$

onde $h = h(T)$ é a entalpia e $\Phi \equiv \tau_{ij} \cdot \nabla \vec{u}$, a função dissipação, que é a taxa na qual a energia cinética é convertida em energia térmica devido à viscosidade do fluido. A derivada material é usada no primeiro termo do lado direito e é definida como:

$$\frac{D}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla, \quad (3.16)$$

e o segundo termo do lado direito da equação (3.15) representa a taxa de liberação de calor da reação química por unidade de volume. O terceiro termo \dot{q}_b''' representa a energia transferida para as gotículas que se evaporam, enquanto que \dot{q}'' é o fluxo de calor radiativo e condutivo.

As equações (3.12), (3.13) e (3.15) juntamente com a equação de estado para gases perfeitos são usadas para modelos de campos. Algumas simplificações devem ser adotadas para o algoritmo do sistema computacional. São elas: tratar com gases perfeitos (ou ideais), fluidos Newtonianos (deformação proporcional à tensão), condução de calor dada pela lei de Fourier e dissipação desprezível. Além disso, efeitos de compressibilidade e ondas de choque são negligenciados, bem como a pressão é considerada constante.

O FDS trata cada objeto simulado como um sólido multicamada. De tal modo que os materiais modelados são apenas aproximações numéricas das propriedades reais de cada material. As propriedades térmicas, tais como condutividade, calor específico e densidade, podem ser encontradas em livros-texto. No entanto, o comportamento de queima dos materiais com diferentes fluxos de calor é mais intrincado de descrever e as propriedades mais difíceis de encontrar na literatura. O aplicativo calcula a temperatura, a densidade, a pressão, o fluxo de calor e a taxa de perda de massa em cada célula. O usuário deve selecionar no arquivo de entrada os dados de saída requeridos. Existem dados disponíveis para a fase gasosa e para a fase sólida. A partir da simulação de queima dos gases oriundos da pirólise dos materiais combustíveis, são obtidas algumas quantidades, tais como:

- Temperatura superficial dos objetos;
- Temperatura dos gases;
- Velocidades dos gases;
- Concentração dos gases componentes da fumaça;
- Taxa de liberação de energia.

Existe também disponível uma ferramenta gráfica para visualização dos resultados gerados pelo FDS, o *Smokeview* (SMV). Esse aplicativo permite produzir animações e capturar imagens realísticas das simulações.

4 *MODELOS DISCRETOS NA CLASSE DE UNIVERSALIDADE KPZ*

A análise das propriedades de escala de modelos discretos permite identificar a classe de universalidade dos respectivos sistemas. É sabido que os modelos discretos de Eden [30, 51], de deposição balística (BD) [4, 52] e de sólido-sobre-sólido com restrição (RSOS) [53, 54] apresentam propriedades de escala compatíveis com a classe de universalidade KPZ [55, 56]. Uma questão natural que surge daí é saber se é possível fazer uma derivação analítica dos coeficientes da equação KPZ contínua para o respectivo modelo discreto. A resposta à questão é positiva. A abordagem consiste em [55, 56, 57, 58, 59]:

- (i) Derivar a equação de Langevin discreta para o modelo a partir da equação mestra usando o formalismo de Fokker-Planck; e
- (ii) Realizar a passagem da equação de Langevin discreta para o limite contínuo por meio de técnicas de regularização e adoção de alguma representação analítica da função degrau.

Nas seções seguintes serão abordados três modelos discretos na classe de universalidade KPZ e o método da equação mestra para determinação dos coeficientes da respectiva equação estocástica de evolução do sistema.

4.1 Modelo RSOS

O conjunto de modelos discretos denominados coletivamente de sólido-sobre-sólido tem duas características principais: (i) consideram interfaces univaloradas, isto é, sem *overhangs*; (ii) limitam a diferença de altura entre sítios vizinhos de modo a evitar grandes

desníveis. Assim, eles permitem calcular acuradamente os expoentes de escala não só em 1+1 dimensões como também em dimensões superiores.

No modelo de passo unitário, no tempo $t = 1$ a interface tem um formato ranhurado com alturas $h_{2i} = 0$ e $h_{2i+1} = 1$, com $i = 0, 1, \dots, L/2$. A evolução da interface ocorre com probabilidade $p_+(p_-)$ nos mínimos locais (máximos locais), resultando em $h_i(t+1) = h_i(t) + 2$ nos mínimos locais e $h_i(t+1) = h_i(t) - 2$ nos máximos locais. Portanto, sempre se mantém a diferença de altura entre vizinhos limitada à unidade. Existem duas possibilidades de iterar o modelo. Na atualização sequencial, um sítio é escolhido aleatoriamente e o crescimento (diminuição) ocorre com probabilidade $p_+(p_-)$. Na atualização paralela, todos os sítios em mínimos locais (máximos locais) crescem (diminuem) simultaneamente com probabilidade $p_+(p_-)$. Esse modelo permite obter alguns parâmetros analiticamente por meio de mapeamento para um modelo de Ising.

O modelo de sólido-sobre-sólido com restrição (RSOS) [53] permite a investigação sistemática dos expoentes de escala também para dimensões mais elevadas. O algoritmo de crescimento consiste em selecionar aleatoriamente uma célula da interface e permitir que ela avance ($h_i \rightarrow h'_i = h_i + 1$) desde que a diferença de altura entre vizinhos não ultrapasse um certo limite $|\Delta h| \leq a$. Na maior parte das situações, adota-se $a = 1$ e condições de contorno periódicas. A configuração inicial é uma superfície lisa ($h_i = 0$) e a evolução temporal forma um aglomerado (*cluster*) compacto sem vacâncias ou *overhangs* e com pequenos desníveis.

Cada configuração, ou seja, cada interface, é representada por uma coleção de variáveis de altura para cada coluna da malha numérica $\mathbf{H} = \{h_i\}$. A equação mestra de evolução da distribuição de probabilidade $P(\mathbf{H}; t)$ de o sistema apresentar a configuração \mathbf{H} no tempo t é dada por [57]:

$$\frac{\partial P(\mathbf{H}; t)}{\partial t} = \sum_{\mathbf{H}'} [W(\mathbf{H}', \mathbf{H})P(\mathbf{H}'; t) - W(\mathbf{H}, \mathbf{H}')P(\mathbf{H}; t)] \quad (4.1)$$

onde $W(\mathbf{H}, \mathbf{H}')$ é a taxa de transição da configuração \mathbf{H} para a configuração \mathbf{H}' e a soma é efetuada sobre todas as alturas em cada sítio da rede. A taxa de transição do modelo RSOS só é não nula quando o incremento de altura da célula aleatoriamente selecionada é igual à constante da rede a e os demais sítios permanecendo inalterados, logo, tem-se para $a = 1$ [55]:

$$W(\mathbf{H}, \mathbf{H}') = \frac{1}{\tau} \sum_{i=1}^L \left[\Theta(h_{i+1} - h_i) \Theta(h_{i-1} - h_i) \delta(h'_i, h_i + 1) \prod_{i \neq j} \delta(h'_j, h_j) \right], \quad (4.2)$$

onde L é o tamanho do sistema e τ é o tempo de deposição por camada*. A função degrau $\Theta(x)$ é definida[†] por [57]:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0; \\ 0, & x < 0. \end{cases} \quad (4.3)$$

A equação mestra (4.1) pode ser reescrita na forma da equação de Fokker-Planck seguinte [21]:

$$\frac{\partial P(H; t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial h_i} (K_i^{(1)} P) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial h_i \partial h_j} (K_{ij}^{(2)} P), \quad (4.4)$$

onde $K_i^{(1)}$ e $K_{ij}^{(2)}$ são, respectivamente, o 1º e o 2º momentos da taxa de transição. No caso do modelo RSOS, temos [57]:

$$K_i^{(1)} = \sum_{H'} (h'_i - h_i) W(\mathbf{H}, \mathbf{H}') = \frac{1}{\tau} \Theta(h_{i+1} - h_i) \Theta(h_{i-1} - h_i), \quad (4.5)$$

$$K_{ij}^{(2)} = \sum_{H'} (h'_i - h_i)(h'_j - h_j) W(\mathbf{H}, \mathbf{H}') = \frac{1}{\tau} \Theta(h_{i+1} - h_i) \Theta(h_{i-1} - h_i) \delta_{ij}. \quad (4.6)$$

Se o sistema for suficientemente grande e as flutuações intrínsecas não forem muito grandes, a equação (4.4) torna-se equivalente à seguinte equação de Langevin discreta [24]:

$$\frac{\partial h_i}{\partial t} = K_i^{(1)} + \eta_i, \quad (4.7)$$

onde, η_i é um ruído branco Gaussiano com média nula e correlação dada por:

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = K_{ij}^{(2)} \delta(t - t'). \quad (4.8)$$

*A altura média da interface \bar{h} é linear em τ e pode ser utilizada como uma medida do tempo [53].

[†]Note que o valor da função em $x = 0$ é definido unicamente para o intervalo positivo.

O passo seguinte consiste em aplicar uma técnica de regularização para realizar a passagem da equação de Langevin discreta (4.7) para seu limite contínuo. Isso pode ser realizado aproximando a função degrau por uma função analítica, como a tangente hiperbólica [55, 57, 60] ou a função de máximo [61], e expandindo-a em série de Taylor:

$$\Theta(x) \approx \sum_{k=0}^{\infty} A_k x^k. \quad (4.9)$$

Substituindo (4.5) e (4.9) em (4.7) e retendo termos até segunda ordem, obtém-se:

$$\frac{\partial h_i}{\partial t} \approx \frac{1}{\tau} \left[A_0 + A_1 \Delta h_i^+ + A_2 (\Delta h_i^+)^2 \right] \cdot \left[A_0 + A_1 \Delta h_i^- + A_2 (\Delta h_i^-)^2 \right] + \eta_i, \quad (4.10)$$

onde $\Delta h_i^{\pm} \equiv h_{i\pm 1} - h_i$. Os valores de altura da interface h_i são substituídos por uma função contínua $\Psi(x, t)$, que interpola todos os pontos da malha e é expandida em série de potências, mantendo a separação lateral entre vizinhos a finita, como segue [59]:

$$\Delta h_i^{\pm} = \Psi(x \pm 1) - \Psi(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\partial^k \Psi}{\partial x^k} \right) \frac{(\pm 1)^k}{k!}. \quad (4.11)$$

Então, a equação diferencial estocástica contínua que descreve o modelo RSOS é determinada substituindo a eq. (4.11) em (4.10) até derivadas de ordem 2 pode ser escrita da seguinte forma [55]:

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = c + v \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right)^2 + \eta(x, t), \quad (4.12)$$

com

$$c = \frac{1}{\tau} A_0^2, \quad (4.13)$$

$$v = \frac{1}{\tau} A_0 A_1, \quad (4.14)$$

$$\lambda = \frac{2}{\tau} (2A_0 A_2 - A_1^2). \quad (4.15)$$

Essa é a equação KPZ com os parâmetros c , v e λ determinados em função dos coeficientes A_0 , A_1 e A_2 da expansão da função de regularização da função degrau. Portanto,

aproximando a função degrau pela tangente hiperbólica [55], isto é

$$\Theta(x) \approx \frac{1}{2} [1 + \tanh(\gamma x)], \quad (4.16)$$

onde γ é uma constante arbitrária positiva, temos $A_0 = 1/2$, $A_1 = \gamma/2$ e $A_2 = 0$. Consequentemente, os parâmetros da equação KPZ ficam assim determinados:

$$c = \frac{1}{4\tau}, \quad (4.17)$$

$$v = \frac{\gamma}{2\tau}, \quad (4.18)$$

$$\lambda = -\frac{2\gamma^2}{\tau}. \quad (4.19)$$

No entanto, parte da literatura [55, 57] adota $A_0 = 1$, apesar de outras escolhas no intervalo entre 1/2 e 1 também serem válidas [60]. Por exemplo, se adotarmos a função tangente hiperbólica deslocada por a :

$$\Theta(x) \approx \frac{1}{2} [1 + \tanh(\gamma(x+a))], \quad (4.20)$$

teremos $A_0 \in (1/2, 1)$, $A_1 > 0$ e $A_2 < 0$. Os coeficientes da equação KPZ determinados pelo método da equação mestra dependem, portanto, do procedimento de regularização, uma vez que escolhas diferentes conduzem a resultados numéricos diferentes.

4.2 Deposição balística

O modelo de deposição balística (BD) gera interfaces fora do equilíbrio que exemplificam muitas das propriedades essenciais de um processo de crescimento na classe de universalidade KPZ. Esse modelo foi desenvolvido no contexto de agregados coloidais [62].

No modelo BD com vizinhos mais próximos (NN), uma partícula é liberada de uma posição aleatória acima da altura máxima da rede de tamanho $L \times H_{max}$ e segue em linha reta até aderir vertical ou lateralmente ao primeiro sítio ocupado (figura (4.1)), passando a fazer parte da interface. Existem variações do modelo BD-NN. Por exemplo, se for permitido à partícula aderir também a um sítio vizinho ocupado na diagonal, então, denomina-se

esse modelo de BD-NNN (*next-nearest neighbor*). Outra variante consiste em inclinar a interface inicial, originando agregados mais porosos, conseqüentemente com termo não-linear λ ainda maior. A origem de λ nesses modelos está na possibilidade de adesão lateral de partículas, formando vazios.

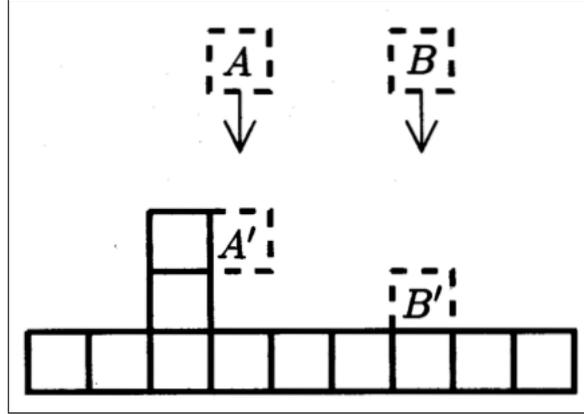


Figura 4.1: Modelo de deposição balística (BD-NN).

Fonte: Ref. [4].

No modelo BD-NN a atualização do algoritmo para o sítio i com altura h_i no passo de tempo $t + 1$ é expresso da seguinte maneira [58]:

$$h_i(t + 1) = \max(h_{i-1}(t), h_i(t) + 1, h_{i+1}(t)), \quad (4.21)$$

onde, t é medido pelo número de partículas depositadas e a função $\max(x, y, z)$ retorna o maior dos valores dentre os argumentos de entrada. Pela aproximação da equação mestra [57] a equação de Langevin discreta (4.7) estatisticamente equivalente à equação mestra do modelo é escrita em termos dos momentos da taxa de transição, que para o modelo BD-NN resultam em [58]:

$$K_i^{(1)} = w_i^{(1)} + (h_{i-1} - h_i) w_i^{(2)} + (h_{i+1} - h_i) w_i^{(3)}, \quad (4.22)$$

$$K_{ij}^{(2)} = \left[w_i^{(1)} + (h_{i-1} - h_i)^2 w_i^{(2)} + (h_{i+1} - h_i)^2 w_i^{(3)} \right] \delta_{ij}, \quad (4.23)$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker, $w_i^{(1)}$ é a taxa de transição local para aumentar h_i por uma unidade, $w_i^{(2)}$ é a taxa de transição para aumentar h_i para h_{i-1} e $w_i^{(3)}$ é a taxa de transição para aumentar h_i para h_{i+1} , as quais são dadas por [58]:

$$w_i^{(1)} = \Theta_{i,i-1}\Theta_{i,i+1}, \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} w_i^{(2)} &= (1 - \Theta_{i,i-1})\Theta_{i,i+1} + (1 - \Theta_{i,i-1})(1 - \Theta_{i,i+1})(1 - \Theta_{i+1,i-1}) + \\ &+ \frac{1}{2}(1 - \Theta_{i,i-1})(1 - \Theta_{i,i+1})(\Theta_{i+1,i-1} + \Theta_{i-1,i+1} - 1), \end{aligned} \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} w_i^{(3)} &= (1 - \Theta_{i,i+1})\Theta_{i,i-1} + (1 - \Theta_{i,i+1})(1 - \Theta_{i,i-1})(1 - \Theta_{i-1,i+1}) + \\ &+ \frac{1}{2}(1 - \Theta_{i,i+1})(1 - \Theta_{i,i-1})(\Theta_{i-1,i+1} + \Theta_{i+1,i-1} - 1), \end{aligned} \quad (4.26)$$

onde $\Theta_{i,j} \equiv \Theta(h_i - h_j)$ é a função degrau definida em (4.3). Uma representação consistente para a função Θ é [63]:

$$\Theta(x; b) = \frac{1}{b} [\max(x + b, 0) - \max(x, 0)], \quad (4.27)$$

onde $0 < b \leq 1$. Com o intuito de obter o limite contínuo da equação de Langevin discreta, introduz-se uma função contínua $\Psi(x, t)$, tal que [64]

$$h_{i \pm n} - h_i = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\partial^k \Psi}{\partial x^k} \right) \frac{(\pm an)^k}{k!}. \quad (4.28)$$

A regularização da função degrau é dada por [58]:

$$\Theta(x; \delta) = \frac{1}{2b} \int_{-\infty}^x \{\operatorname{erf}[(s + b)\delta] - \operatorname{erf}(s\delta)\} ds, \quad (4.29)$$

onde $\delta > \delta_0 \approx 10$ [65] e $\operatorname{erf}(x)$ é a função erro. Analogamente ao que foi feito anteriormente (seção 4.1) substitui-se a expansão em série de Taylor de Ψ e Θ na equação (4.7) com os momentos da taxa de transição dados por (4.22)-(4.26), resultando na equação de Langevin contínua para o modelo BD (4.12) com os coeficientes:

$$c = \frac{1}{\tau} A_0^2, \quad (4.30)$$

$$v = \frac{a^2}{2\tau} (1 - A_0^2 - 2A_0A_1), \quad (4.31)$$

$$\lambda = \frac{2a^2}{\tau} (4A_0^2A_1 - 8A_0A_1 + 2A_0A_2 - A_1^2 + 6A_1). \quad (4.32)$$

Os valores de A_0 , A_1 e A_2 são calculados* usando a regularização adotada (4.29), resultando em:

$$A_0 = \frac{1}{2b\delta\sqrt{\pi}} \left[b\delta\sqrt{\pi}(1 + \operatorname{erf}(b\delta)) - 1 + e^{-b^2\delta^2} \right], \quad (4.33)$$

$$A_1 = \frac{1}{2b} \operatorname{erf}(b\delta), \quad (4.34)$$

$$A_2 = \frac{\delta}{2b\sqrt{\pi}} \left(e^{-b^2\delta^2} - 1 \right). \quad (4.35)$$

4.3 Autômatos celulares estocásticos

Nesta seção é introduzido um modelo discreto original para a propagação de interfaces usando autômatos celulares estocásticos. Diferentemente de outras abordagens [45, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72], aqui o foco do modelo está na propagação das frentes de fogo e não no comportamento de tempo longo em que o material combustível pode inclusive se regenerar.

Autômatos celulares são modelos que representam sistemas reais assumindo que o espaço, o tempo e os estados das células possam ser discretizados. As regras de atualização dos estados de cada célula na malha são locais, ou seja, requerem apenas o conhecimento do estado das células em sua vizinhança. Se essas regras para as transições de estados forem realizadas por meio de probabilidades diz-se que o autômato celular é estocástico [73, 74]. A propagação de frentes de fogo, como já discutido no capítulo 3, é governada pela transferência de calor da região afetada pelas chamas para aquelas ainda não queimadas [40]. Esse fenômeno é influenciado por aspectos ambientais e por propriedades físico-químicas do material combustível [42, 69, 70]. A estocasticidade introduzida no algoritmo é usada para modelar a heterogeneidade do combustível e o processo de ignição.

*Os coeficientes da expansão da função degrau também podem ser calculados por meio da seguinte representação da função máximo [61]:

$$\max(x, y) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[\varepsilon \ln(e^{x/\varepsilon} + e^{y/\varepsilon}) \right],$$

resultando em $\Theta(x, \varepsilon) \simeq A_0 + A_1 \frac{x}{2} - A_2 \frac{x^2}{8\varepsilon}$ com $A_0 = \varepsilon \ln \left[\frac{1}{2}(1 + e^{1/\varepsilon}) \right]$, $A_1 = \frac{e^{1/\varepsilon} - 1}{e^{1/\varepsilon} + 1}$ e $A_2 = A_1^2$.

A propagação de chamas sobre superfícies pode ser modelada por autômatos celulares estocásticos utilizando as regras de atualização dos estados das células queimando e sua vizinhança para governar a evolução das frentes de fogo [68]. Drossel e Schwabl (DS) propuseram um modelo de incêndio florestal para sistemas não conservativos exibindo criticalidade auto-organizada [66]. O modelo DS foi explorado e generalizado na tentativa de esclarecer as leis de escala observadas nos dados de incêndios florestais. Um desses trabalhos [67] cumpre esse objetivo adicionando heterogeneidade ao ambiente florestal, a qual é representada por árvores com resistência à queima maior do que outras em contraste com uma população uniforme de árvores susceptíveis.

O presente modelo de autômatos celulares estocásticos (SCA) é definido numa rede de tamanho $L_x \times L_y$ com condições de contorno periódicas e vizinhança de Moore [75]. O código fonte para implementação do algoritmo em linguagem C é apresentado no apêndice A. As células na rede podem assumir quatro diferentes estados: susceptível (S), resistente (R), vazia (E) ou queimando (B). Uma configuração inicial com células do tipo S, R e E é especificada no algoritmo de entrada a partir das probabilidades iniciais de cada estado. Especifica-se a probabilidade P_0 de um determinado sítio da rede ser preenchido com células do tipo S ou R e a probabilidade $1 - P_0$ de não haver células (E). A proporção inicial de células S relativamente às células R é S'_0 . A queima inicia-se com uma frente de células B a partir da borda inferior em $y = 0$. Neste trabalho a frente pode ser uma linha reta ou uma parábola*. A cada passo de tempo todas as células da malha são atualizadas de acordo com as seguintes regras:

- (i) Uma célula susceptível S com no mínimo n_S células B queimando em sua vizinhança sofre ignição com probabilidade p .
- (ii) Uma célula resistente R com no mínimo n_R células B queimando em sua vizinhança sofre ignição com probabilidade q .

Para aplicar a abordagem da equação mestra ao modelo SCA é preciso definir inicialmente o número de vizinhos da i -ésima célula:

*O algoritmo pode ser facilmente adaptado para incorporar outras geometrias para a frente inicial.

$$\begin{aligned}
N_i &= [\Theta(\Delta h_i^+) - \Theta(\Delta h_i^+ - 3)] (\Delta h_i^+ + 1) + 3 \cdot \Theta(\Delta h_i^+ - 3) \\
&+ [\Theta(\Delta h_i^-) - \Theta(\Delta h_i^- - 3)] (\Delta h_i^- + 1) + 3\Theta(\Delta h_i^- - 3) + 1, \quad (4.36)
\end{aligned}$$

onde $\Delta h_i^\pm \equiv h_{i\pm 1} - h_i$ e $\Theta(x)$ é a função degrau definida como $\Theta(x) = 1$ se $x \geq 0$ ou $\Theta(x) = 0$ se $x < 0$. Desse modo a taxa de transição $W(\mathbf{H}, \mathbf{H}')$ por unidade de tempo $\tau = 1$ correspondente a $L = L_x$ tentativas de crescer a interface de \mathbf{H} para \mathbf{H}' é:

$$\begin{aligned}
W(\mathbf{H}, \mathbf{H}') &= \prod_{i=1}^L \left\{ 1 - (h'_i - h_i) + 2 \cdot \left(h'_i - h_i - \frac{1}{2} \right) \cdot [S_0 \Theta(N_i - n_S) \cdot p \right. \\
&+ \left. (1 - S_0) \Theta(N_i - n_R) \cdot q \right\}, \quad (4.37)
\end{aligned}$$

onde $S_0 \equiv P_0 \times S'_0$ é a probabilidade de o sítio i possuir uma célula do tipo S. O primeiro e o segundo momentos da taxa de transição são dados por:

$$K_i^{(1)} = pS_0 \Theta(N_i - n_S) + q(1 - S_0) \Theta(N_i - n_R) \quad (4.38)$$

$$\begin{aligned}
K_{ij}^{(2)} &= [pS_0 \Theta(N_i - n_S) + q(1 - S_0) \Theta(N_i - n_R)] \\
&\times [pS_0 \Theta(N_j - n_S) + q(1 - S_0) \Theta(N_j - n_R)]. \quad (4.39)
\end{aligned}$$

O próximo passo no sentido de obter uma formulação contínua para a equação de Langevin discreta (4.7) é adotar uma representação consistente para a função degrau na equação (4.38). Duas possibilidades já foram apresentadas nas seções anteriores, as equações (4.27) e (4.16). Adotando-se a regularização dada por (4.29) e introduzindo a variável espacial contínua $\Psi(x, t)$, cuja expansão é dada por (4.28), obtém-se a equação contínua da forma (4.12) para o modelo SCA. No entanto, se outra regularização for adotada, outros valores numéricos são obtidos, conforme pode ser visto no apêndice B, que apresenta o algoritmo em computação simbólica utilizando o software Maple*. Essa é a principal limitação do método da equação mestra, uma vez que a adoção de diferentes regularizações resulta em diferentes valores para os coeficientes, o método não é capaz de prever numericamente os coeficientes, mas apenas fornece informação qualitativa sobre

*A equação resultante é omitida em razão do elevado número de termos.

a presença deles na equação de evolução estocástica. As equações obtidas por essa metodologia fornecem uma descrição do sistema somente no sentido de que elas capturam a classe de universalidade assintótica desses modelos. A regularização adotada para passar da equação mestra para uma equação de Langevin não tem relação direta com os processos atômicos subjacentes, há o truncamento *ad hoc* de uma série infinita das derivadas de ordens superiores sem a garantia de convergência desse processo [65]. No capítulo seguinte serão apresentados métodos inversos capazes de determinar numericamente os coeficientes a partir de dados simulados ou experimentais.

5 *MODELAGEM DA EQUAÇÃO KPZ*

As abordagens adotadas para caracterização do fenômeno de crescimento de interfaces geralmente buscam determinar a classe de universalidade à qual o processo considerado pertence. Uma vez estabelecido que o processo em estudo é de classe KPZ, a modelagem aplicada nesta tese vai no sentido de determinar diretamente a equação estocástica a partir de dados simulados ou experimentais da evolução da posição da frente de fogo em superfícies. Alguns métodos já foram propostos para realizar tal abordagem. A primeira reconstrução da equação KPZ a partir de dados experimentais é creditada a Lam e Sander [15]. Os autores propuseram um método inverso baseado num esquema de diferenças finitas para aproximar a dinâmica e basearam a reconstrução num algoritmo de mínimos quadrados.

O método pseudoespectral apresentado por Giacometti e Rossi [76] e posteriormente reformulado pelos próprios autores [77] é uma formulação alternativa. A estratégia básica consiste em aplicar o procedimento de mínimos quadrados para as funções de correlação ao invés de diretamente às variáveis estocásticas da interface. O método, no entanto, apresentava deficiências intrínsecas quanto à discretização espacial e precisou ser reformulado, introduzindo-se uma representação espectral da equação de Langevin [77].

A principal contribuição da presente pesquisa consiste na formulação de uma nova abordagem para determinar numericamente os parâmetros da equação estocástica de evolução de frentes de fogo utilizando poucas interfaces espaçadas com intervalo de tempo arbitrário [16]. Com o intuito de efetivar a implementação dessa abordagem é adotado um algoritmo de integração numérica da equação KPZ a seguir descrito. O método original [15] é revisitado e comparado com a abordagem aqui proposta. Adicionalmente, nosso método foi submetido a um teste de auto-consistência em que os dados de entrada são gerados a partir de parâmetros previamente conhecidos e comparados com os resultados do

ajuste.

5.1 Solução numérica da equação KPZ

A integração numérica direta tem sido um importante meio para investigar a equação KPZ [78], no entanto, deve ser feita com especial cuidado, pois diferentes tipos de discretização podem levar a resultados espúrios. Diferentes métodos para a solução numérica da equação KPZ são apresentados na literatura [7, 78, 79, 80, 81, 82, 83]. Uma primeira abordagem pode ser feita pelo método de Euler:

$$h_i^{n+1} = h_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left[v_0(h_{i+1}^n + h_{i-1}^n - 2h_i^n) + \frac{\lambda_0}{8}(h_{i+1}^n - h_{i-1}^n)^2 \right] + \sqrt{\frac{2D_0\Delta t}{\Delta x}} \xi_i^n, \quad (5.1)$$

onde $h_i^{n+1} \approx h(x_i, t_{n+1})$ é a altura da célula i no passo de tempo $n+1$. A largura Δx de cada célula pode ser assumida por uma escolha de unidades como sendo igual a 1. Cada ξ_i^n é uma variável aleatória independente com média zero e variância unitária seguindo a distribuição Gaussiana. Os parâmetros v_0 , λ_0 e D_0 são valores nominais usados na equação discreta e que podem ser diferentes dos valores efetivos da equação contínua (2.37) em decorrência do tipo de discretização utilizada [79]. Tal inconveniente pode ser evitado utilizando outro tipo de discretização, como veremos a seguir. A forma discretizada (5.1) da equação KPZ pode ser escrita genericamente como:

$$\frac{dh_i(t)}{dt} = c + \frac{1}{\Delta x^2} \left[v_0\Gamma_i + \frac{\lambda_0}{2}\Psi_i \right] + \eta_i(t), \quad (5.2)$$

onde Γ_i e Ψ_i podem ter formas explícitas diferentes seguindo a discretização escolhida. No caso da equação (5.1) o termo difusivo é dado por:

$$\Gamma_i = h_{i+1} + h_{i-1} - 2h_i \quad (5.3)$$

e o termo não-linear por $\Psi_i = 1/4(h_{i+1} - h_{i-1})^2$. No entanto, o termo não linear na equação (5.2) admite diferentes discretizações que podem ser genericamente representadas por [78, 83]:

$$\Psi_i^{(\gamma)} = \frac{1}{2(\gamma+1)} [(h_{i+1} - h_i)^2 + 2\gamma(h_{i+1} - h_i)(h_i - h_{i-1}) + (h_i - h_{i-1})^2], \quad (5.4)$$

onde o parâmetro γ pode ser escolhido livremente. A escolha usual corresponde a $\gamma = 1$. Uma escolha alternativa de $\gamma = 0$ é chamada de antipadrão ou discretização de pré-ponto. Contudo, Lam and Shin [78] reportaram inconsistências intrínsecas do método de Euler convencional, uma vez que o coeficiente de difusão ν é incompatível com seu valor nominal usado na equação (5.1). Os autores usaram o método inverso [15] para calcular independentemente ν e D a partir de realizações de superfícies simuladas e encontraram valores incongruentes com os valores discretizados calculados pelo método convencional. A partir daí foi proposto um método de discretização que garantiu que a distribuição de probabilidade de estado estacionário obtida da simulação coincidissem com a obtida analiticamente [83]. Dessa forma, tais autores mostraram que uma forma mais apropriada de discretização para o termo não-linear passa a ser:

$$\Psi_i = \frac{1}{3} [(h_{i+1} - h_i)^2 + (h_{i+1} - h_i)(h_i - h_{i-1}) + (h_i - h_{i-1})^2]. \quad (5.5)$$

Com essa escolha, os parâmetros contínuos podem ser calculados de modo a obter todos os três parâmetros em concordância exata com os valores nominais:

$$\nu = \nu_0, \lambda = \lambda_0, D = D_0. \quad (5.6)$$

O termo de ruído tem média nula e correlação

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2D \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (5.7)$$

O método de integração numérica pode gerar um crescimento rápido da variável de altura numa determinada região do sistema [84], levando a uma instabilidade que pode ser suprimida substituindo o termo de gradiente quadrático $(\nabla h)^2$ na equação (2.39) por uma função exponencial decrescente [81]:

$$f((\nabla h)^2) \equiv \frac{1}{a} \left(1 - e^{-a(\nabla h)^2} \right), \quad (5.8)$$

onde a é um parâmetro adequadamente escolhido. Assim, o termo não linear em (5.4) é

adotado como $f(\Psi) = \frac{(1 - e^{-a\Psi})}{a}$ no algoritmo de integração numérica com $a = 1$.

5.2 Método inverso de Lam e Sander

A proposta de Lam e Sander [15] baseia-se no fato de que uma sequência de imagens instantâneas da superfície captura suas propriedades dinâmicas até o limite de sua resolução. Daí encontra-se uma equação geral candidata para descrever a evolução contendo todos os termos consistentes com a simetria. Dada uma interface instantânea, realizações da equação com diferentes coeficientes fornecem diferentes previsões para o próximo passo. A equação correta é aquela que dá as melhores previsões para um número grande de tentativas, que pode ser obtida minimizando os erros das previsões.

Discretizando o tempo, obtemos uma formulação para a equação KPZ:

$$\frac{\Delta h(x,t)}{\Delta t} \simeq \vec{a} \cdot \vec{H}(x,t) + \eta(x,t), \quad (5.9)$$

onde $\vec{a} = (c, v, \frac{\lambda}{2})$ e $\vec{H} = (1, \nabla^2 h, (\nabla h)^2)$. O vetor de parâmetros \vec{a} é aquele que melhor descreve a sequência de imagens instantâneas da superfície. Para determinar \vec{H} sobre uma malha numérica, tomamos os dados de entrada para as interfaces discretas $h_d(x_i, t_j)$. Procede-se então ao grão-grosso (*coarse graining*) truncando a série de Fourier para comprimentos de onda menores do que a resolução espacial l correspondente ao número de onda $\kappa_n = n/L$:

$$\hat{h}_n = \Delta x \sum_{m=0}^{N-1} h_j e^{2\pi i \kappa_n x_m}. \quad (5.10)$$

Tomando m realizações de $h_d(x, t + k\Delta t)$, com $k = 0, \dots, m-1$, para m grande, obtemos:

$$\frac{\langle \Delta h(x,t) \rangle}{\Delta t} \simeq \vec{a} \cdot \vec{H}(x,t). \quad (5.11)$$

Adotando $\Delta h_i(t) = h_i(t + \Delta t) - h_i(t)$ na equação (5.11), fazemos um ajuste de mínimos quadrados do desvio quadrático médio de (5.11), dado por:

$$\mathcal{D} = \left\langle \left[\frac{\Delta h_i(t)}{\Delta t} - \vec{a} \cdot \vec{H}_i(t) \right]^2 \right\rangle. \quad (5.12)$$

Minimizando (5.12) com relação ao vetor \vec{a} temos:

$$\mathcal{A}\vec{a} = \vec{b}, \quad (5.13)$$

onde a matriz \mathcal{A} e o vetor \vec{b} são dados por:

$$\mathcal{A} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{H}_i \otimes \vec{H}_i, \quad (5.14)$$

$$\vec{b} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\langle \Delta h_i \rangle}{\Delta t} \vec{H}_i. \quad (5.15)$$

O correlacionador do ruído D é calculado a partir de [15, 26]:

$$D = \frac{l\Delta t}{2} \left\langle \left[\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} - \vec{a}^* \cdot \vec{H}(x,t) \right]^2 \right\rangle, \quad (5.16)$$

onde \vec{a}^* é o minimizador da equação (5.12). Assim, são encontradas expressões para todos os parâmetros na formulação contínua. A resolução da equação (5.13) é computacionalmente simples, no entanto, o preço a se pagar por essa estrutura matemática é a necessidade de se obter dados experimentais ou simulados com pequenos intervalos de tempo entre as frentes a fim de se calcular as derivadas temporais.

5.3 Método inverso para número arbitrário de configurações de entrada

O método inverso ilustrado anteriormente requer passos de tempo curtos entre as interfaces para o cálculo da derivada temporal, o que pode inviabilizar sua aplicação em casos de observação de queimadas reais. Para superar tal dificuldade desenvolvemos um procedimento que permite passos de tempo maiores e com boa acurácia mesmo para poucas configurações de entrada. Em nossa abordagem, o vetor das derivadas espaciais \vec{H} é determinado a partir dos dados de altura das frentes experimentais segundo as expressões (5.5) e (5.3) para $(\nabla h)^2$ e $\nabla^2 h$, respectivamente. As frentes experimentais são igualmente filtradas por meio da truncagem das componentes de Fourier menores do que uma certa resolução espacial [85].

Inicialmente é realizada a simulação de queima de um material, donde são extraídos os valores de posição das frentes para determinados passos de tempo e para uma certa resolução espacial. Dada a condição inicial $h(x_i, 0)$ e um conjunto de tentativa inicial para os valores dos parâmetros (c, v, λ) , a equação KPZ discretizada (5.2) é resolvida numericamente adotando ruído nulo. Essa solução numérica $h_{\vec{a}}(x_i, t_k)$, que depende do conjunto tentativa inicial \vec{a} , é então comparada com os dados de entrada $h(x_i, t_k)$, com $i = 0, \dots, L$ e $k = 0, \dots, M$. O erro quadrático médio é dado neste caso por:

$$\mathcal{E}(\vec{a}) = \left\langle [h(x, t) - h_{\vec{a}}(x, t)]^2 \right\rangle. \quad (5.17)$$

O procedimento consiste, então, em encontrar \vec{a}^* que minimiza \mathcal{E} . No nosso caso escolhemos o método de minimização simplex, que apesar de ter uma convergência mais lenta, tem a vantagem de permitir explorar uma região maior do espaço de parâmetros [86]. O cálculo do correlacionador do ruído D é feito por meio da expressão (5.16), do mesmo modo que no método inverso original. No entanto, a derivada temporal é estimada a partir da solução numérica, que pode assumir passos de tempo tão pequenos quanto se queira. Ou seja, não é necessário um pequeno intervalo de tempo entre uma imagem instantânea e outra da simulação ou do experimento. Adotamos ruído nulo na solução numérica, portanto, a diferença entre as frentes simulada e calculada, em cada passo de tempo discreto, é atribuída ao ruído. Os códigos fonte em linguagem Fortran para implementação do procedimento de ajuste pela abordagem aqui introduzida são apresentados no apêndice C.

Nas próximas seções são apresentados os resultados de duas aplicações para a modelagem de reconstrução da equação KPZ. A primeira usa como dados de entrada o campo de temperatura obtido a partir da simulação computacional usando o software FDS da queima de um substrato de espuma. A segunda aplicação é realizada calculando os parâmetros da equação KPZ para o modelo de autômatos celulares estocásticos introduzido na seção (4.3). Antes, porém, são apresentados os resultados do ajuste realizado com interfaces geradas por algoritmo de solução numérica da equação KPZ comparando-se com os valores obtidos pela aplicação do método inverso de Lam e Sander [15].

5.4 Teste de auto-consistência e comparação com o método inverso original

Um teste simples de consistência do algoritmo da modelagem ora proposta usa frentes de fogo geradas pelo algoritmo de solução numérica da equação KPZ. Os códigos fonte para gerar a condição inicial e propagar numericamente as interfaces de entrada são apresentados no apêndice D. O teste consiste em determinar se um pequeno número de frentes*, separadas por um intervalo de tempo relativamente grande, permite obter os parâmetros nominais c , v , λ e D usados para gerar as interfaces dos dados de entrada.

Foram produzidas interfaces a partir de duas condições iniciais: a condição (1) corresponde a uma curva Gaussiana; e na condição (2) foi adotada uma função quadrática do cosseno. A malha possui $L = 1024$ células e os valores nominais arbitrariamente escolhidos foram $c = 0,02$, $v = 0,1$, $\lambda = 0,3$ e $D = 4,5 \times 10^{-6}$. O parâmetro de filtragem para a condição (1) foi $l = 1,0$ e para a condição (2) $l = 0,2$. Os valores obtidos por nossa abordagem considerando 5 e 50 frentes são mostrados na tabela 5.1. A figura 5.1 apresenta as frentes originais e as frentes dos dados de entrada e as frentes determinadas pela solução da equação KPZ sem o termo de ruído. Apesar do pequeno número de frentes consideradas para implementação de nosso método, os valores obtidos para c , v e λ estão bastante próximos dos valores nominais utilizados para gerar os dados numéricos de entrada. O correlacionador do ruído, que está relacionado com o erro no processo de ajuste, não exhibe convergência para valores constantes independentemente do *coarse graining*, isto é, o valor de D depende do parâmetro de filtragem l e não converge necessariamente para um único valor, e admite erros estatísticos maiores também devido a efeitos de tamanho finito do sistema [15, 26]. O erro em D , embora elevado, herda as mesmas limitações do método original de Lam e Sander [15].

Num segundo teste os resultados de nossa abordagem são comparados com os valores obtidos pelo método inverso de Lam e Sander. Os valores nominais dos parâmetros de entrada adotados para gerar as frentes no algoritmo de propagação numérica são: $c = 1,4$, $v = 0,05$, $\lambda = 2,0$ e $D = 5 \times 10^{-3}$. A frente inicial tem as características da função cosseno da condição (2) descrita acima. O método inverso da referência [15] foi aplicado

*O algoritmo de propagação numérica gera um grande número de interfaces, conforme o passo de integração adotado, que é da ordem de 10^{-2} a 10^{-3} . Logo, apenas uma parcela da informação, por exemplo, 5 ou 50 frentes, é usada para reobter os parâmetros da equação de evolução das interfaces.

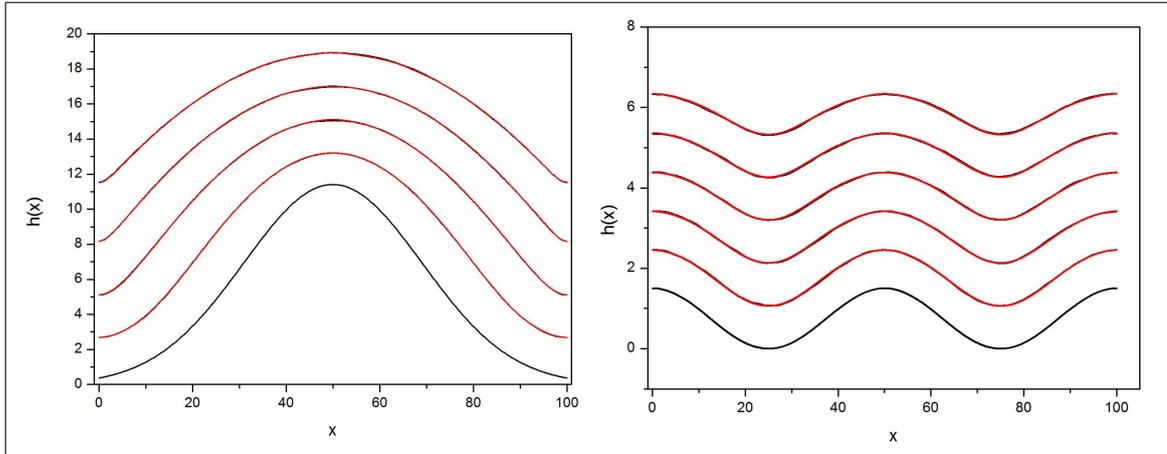


Figura 5.1: Painel esquerdo: Interfaces geradas por integração numérica da equação KPZ para uma condição inicial Gaussiana. Painel direito: Interfaces geradas por integração numérica da equação KPZ adotando como condição inicial uma função cosseno ao quadrado. Curvas em vermelho representam as frentes ajustadas pelo nosso método inverso.

Tabela 5.1: Resultados numéricos

	Condição 1		Condição 2	
	5 frentes	50 frentes	5 frentes	50 frentes
c	$2,009 \times 10^{-2}$	$2,012 \times 10^{-2}$	$1,999 \times 10^{-2}$	$1,998 \times 10^{-2}$
v	$9,965 \times 10^{-2}$	$9,967 \times 10^{-2}$	$9,795 \times 10^{-2}$	$9,718 \times 10^{-2}$
λ	0,300	0,299	0,327	0,329
D	$1,080 \times 10^{-6}$	$1,202 \times 10^{-7}$	$2,638 \times 10^{-7}$	$2,959 \times 10^{-7}$

utilizando 10, 1.000 e 10.000 frentes para obter os coeficientes c , v e λ . Por outro lado, nossa abordagem valeu-se apenas de 10 interfaces para obter os referidos coeficientes da equação KPZ. A tabela 5.2 traz os resultados numéricos. O valor de c é bastante aproximado do valor nominal por qualquer dos métodos adotados, com ligeira vantagem para o método da referência [15]. Já para o termo não linear λ , o método inverso de Lam e Sander mostra-se pouco preciso com 10 frentes, melhorando a acurácia ao se adotar 1.000 frentes, porém, ainda dando resultados mais distantes do valor nominal do que nosso método da referência [16] com apenas 10 frentes. A situação agrava-se ainda mais ao se avaliar o coeficiente difusivo v . Nesse caso, nosso ajuste resulta em diferenças com uma ordem de grandeza, enquanto que o outro método apresenta disparidades dos valores nominais de entrada de até três ordens de grandeza.

Por fim avaliamos como os parâmetros da equação KPZ, determinados numericamente por nossa abordagem, variam com o número de configurações (interfaces). A figura 5.2 mostra que os valores ajustados convergem rapidamente mesmo com uma quantidade reduzida de interfaces. O número de frentes de fogo utilizadas para o ajuste da

Tabela 5.2: Comparação de métodos inversos

	Nominal	Método Ref. [16]		Método Ref. [15]	
		10 frentes	10 frentes	1.000 frentes	10.000 frentes
c	1,04	1,790	1,723	1,721	1,726
ν	0,05	0,138	$2,01 \times 10^{-4}$	$8,24 \times 10^{-5}$	$9,22 \times 10^{-5}$
λ	2,0	0,684	0,066	0,110	0,101

equação KPZ foi de 5, 50, 500 e até 1000. A malha computacional contou com 50 e 500 células na direção x . Os parâmetros de referência seguiram os valores obtidos por Maunuksela *et al.* [26] com $c = 0,488$, $\nu = 0,14$, $\lambda = 0,38$ e $D = 0,11$.

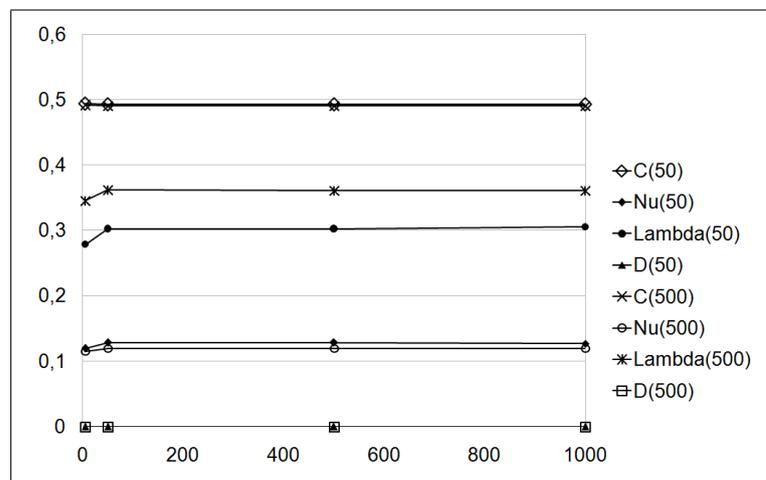


Figura 5.2: Ajuste dos parâmetros da equação KPZ em função do número de interfaces com resolução de 50 células e 500 células.

5.5 Aplicação do método inverso ao modelo CFD

A propagação de fogo tem mecanismos complexos de ativação, porém, pode ser modelada computacionalmente por métodos determinísticos que utilizam dinâmica de fluidos computacional (CFD) como aquele da seção 3.5.2. Um software popular e com boa acurácia é o FDS (*Fire Dynamics Simulator*), que foi desenvolvido pelo Instituto Americano de Padrões e Tecnologia (NIST) [87]. Como uma primeira aplicação de nosso método inverso, determinamos os parâmetros da equação KPZ adequados para descrever corretamente a propagação de frentes de fogo capturadas a partir da simulação do modelo CFD.

O simulador de dinâmica de incêndios FDS foi utilizado para modelar a queima superficial de um substrato de espuma [19]. A figura 5.3 mostra uma sequência de imagens

da queima da espuma produzidas pelo software visualizador da simulação de incêndio SMV com os respectivos campos de temperatura da espuma durante a queima. As dimensões do substrato de espuma adotadas foram $1,60 \text{ m} \times 2 \text{ m}$. A amostra de espuma modelada segue aproximadamente as especificações* do material constituinte de um sofá reproduzido como estudo de caso pelo NIST para validar o modelo de cálculo do FDS-SMV [87]. A resolução da malha variou de 32 (50mm) a 128 (12,5mm) células na direção do eixo x , sendo que a propagação do fogo se deu na direção perpendicular y . A queima inicia-se com uma linha de células do material queimando na borda inferior da malha em $y = 0$.

Os arquivos de saída do FDS contendo os dados de temperatura na malha numérica em função do tempo foram processados pelo algoritmo do apêndice E, escrito em Maple, para fornecer a posição da frente de fogo, definida em termos de uma temperatura crítica T_c^\dagger , conforme mostrado na figura 5.4. A primeira dessas interfaces, que é a primeira frente de fogo que se destaca completamente da borda inferior da malha, foi adotada como a configuração inicial para o ajuste da equação KPZ. No entanto, como ela e as demais interfaces não exibem valores de altura iguais nas duas laterais, isso introduziu valores espúrios em nosso processamento de ajuste dos parâmetros, o qual adota condições de contorno periódicas.

Antes de proceder ao ajuste dos parâmetros da equação KPZ fizemos uma análise das propriedades de escala das frentes de fogo geradas pelo modelo CFD. O expoente de crescimento β foi calculado dentro da classe de universalidade KPZ pela lei de escala para a largura da interface $w \propto t^\beta$ em tempos curtos, conforme mostra a figura 5.5. O expoente de rugosidade α não foi calculado, tendo em vista a frente de fogo durante as simulações ter atingido a margem superior antes do regime de saturação. A modelagem da equação KPZ fornece resultados efetivos, mesmo a partir de poucas interfaces e com baixa resolução espacial. Conforme pode ser observado na figura 5.6, as interfaces ajustadas por meio de abordagem introduzida na seção 5.3 capturam de forma bastante satisfatória o comportamento das frentes simuladas pelo modelo CFD e num tempo consideravelmente inferior às mais de 4 horas necessárias para cada simulação completa do FDS.

*calor específico = $1 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, condutividade térmica = $0,1 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, densidade = 100 kg/m^3 , calor de combustão = 15000 kJ/kg

†Essa temperatura crítica, em geral, será definida como sendo a temperatura acima da qual ocorre a combustão do material combustível.

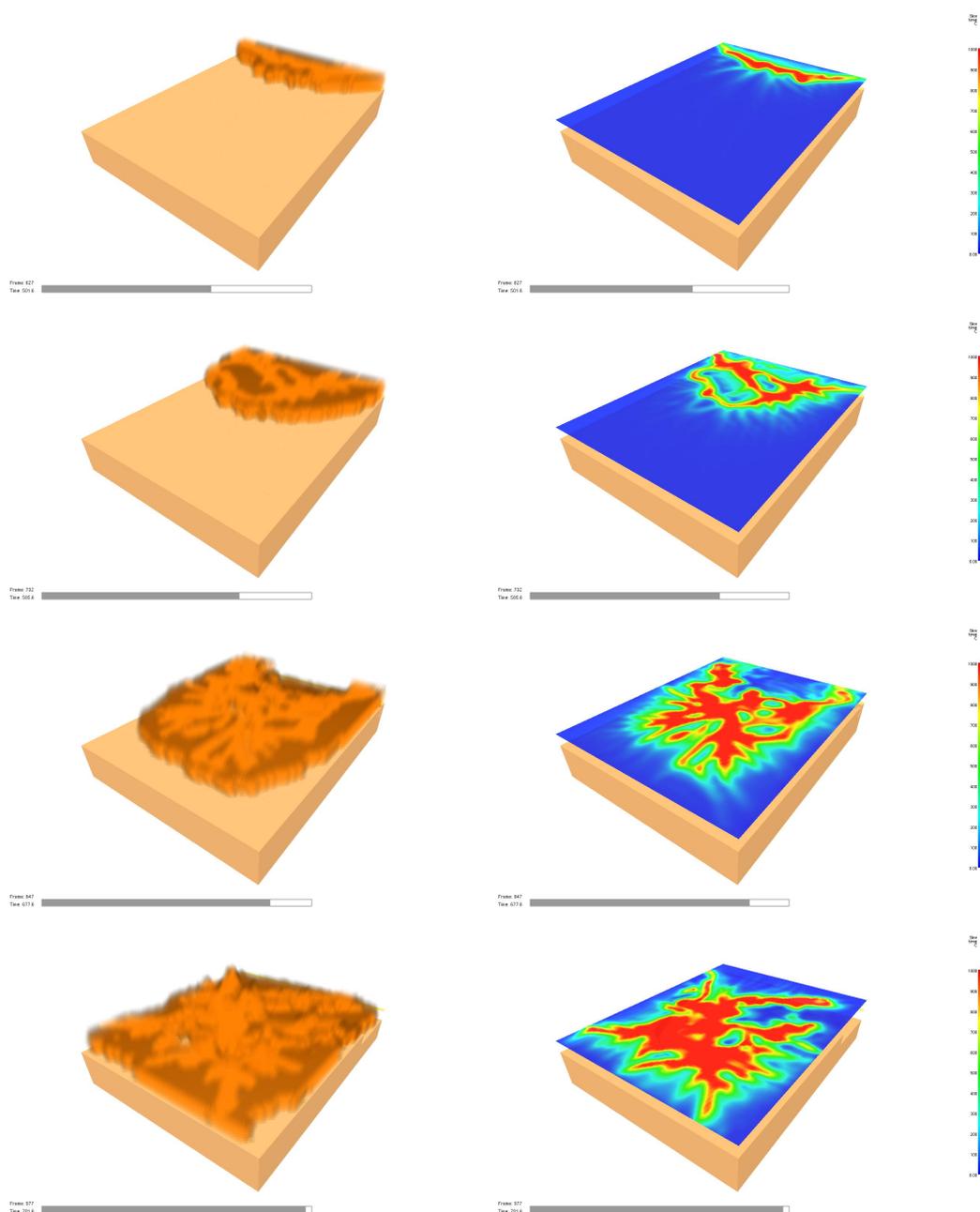


Figura 5.3: Visualização realística da propagação de frentes de fogo no simulador FDS-SMV com os respectivos campos de temperatura.

5.6 Aplicação do método inverso ao modelo SCA

Uma segunda aplicação da nossa abordagem é realizada para o modelo de autômatos celulares estocásticos descrito na seção 4.3. Na configuração inicial os sítios recebem aleatoriamente o atributo de células suscetíveis ou resistentes na proporção de 10% de suscetíveis para 90% de resistentes. Ou seja, a propagação das frentes de fogo dá-se de maneira

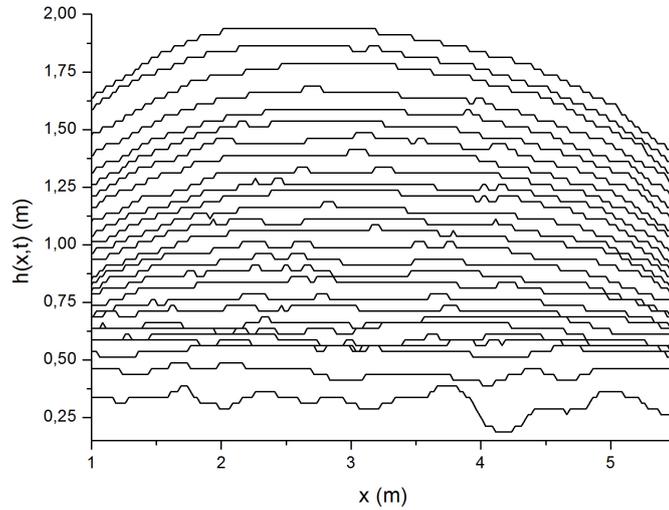


Figura 5.4: Frentes de fogo processadas a partir da queima de uma espuma e gravadas a cada 10 segundos de simulação no FDS.

lenta. A probabilidade de queima para as células suscetíveis com $n_S = 1$ é $p = 0,7$, já as células resistentes com $n_R = 3$ apresentam $q = 0,2$. A figura 5.7 exhibe as propriedades de escala do modelo implementado para frentes de fogo propagando sobre uma malha de 2048×3000 células por um tempo total de 10.000 iterações. O comportamento da largura da interface w para tempos curtos é dado por $w \propto t^{0,3297}$, bastante próximo do valor esperado de $\beta = 1/3$ [10]. Calculando β pela função correlação temporal

$$C(0, \tau) = \left\{ \left\langle [h(x, t) - h(x, t + \tau)]^2 \right\rangle_{x,t} \right\}^{1/2}, \quad (5.18)$$

o valor do expoente de crescimento fica 0,295, um pouco mais distante do valor esperado. O expoente de rugosidade é melhor determinado por meio da função correlação espacial

$$C(\zeta, 0) = \left\{ \left\langle [h(x, t) - h(x + \zeta, t)]^2 \right\rangle_{x,t} \right\}^{1/2} \quad (5.19)$$

e resulta em $\alpha = 0,435$ para uma janela temporal entre 7.500 e 10.000 iterações, o que também é uma boa aproximação para o valor teórico da classe de universalidade KPZ em $1 + 1$ dimensões [10]. É esperado que o tempo de saturação cresça com o tamanho do sistema, portanto realizamos ainda outra simulação com uma malha menor de $L_x = 512$ e obtivemos $\alpha = 0,441$ para um tempo total de 200.000 iterações. De tal modo que seja razoável afirmar que o modelo implementado, pelo menos assintoticamente, pertence à

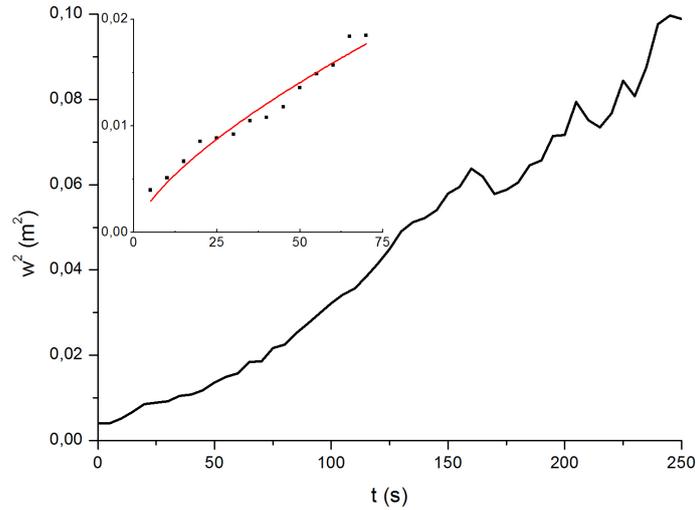


Figura 5.5: Comportamento da largura da interface $w(t)$ para o modelo CFD. Interno: Lei de escala para tempos curtos, em que o valor ajustado de $\beta = 0.34$ (linha em vermelho) está bem próximo do valor teórico da classe de universalidade KPZ de $\beta = 1/3$ [10].

classe de universalidade KPZ.

Considerando o ajuste dos parâmetros da equação KPZ utilizando apenas 4 interfaces separadas por um intervalo $\Delta t = 2500$ com dados de entrada, obtemos os seguintes valores: $c = 0,181$, $\nu = 0,530$, $\lambda = 0,677$, and $D = 4,896$. As frentes foram filtradas com grão-grosso de $l = 4,3$. A figura 5.8 mostra uma interface simulada com a respectiva frente ajustada pelo nosso método inverso, evidenciando uma boa concordância. Além disso, nossa abordagem mostra-se vantajosa em relação ao método de Lam e Sander [15] que demanda um grande número de interfaces com intervalos de tempo pequenos entre elas, o que pode ser inviável em cenários reais, tais como incêndios florestais.

Explorando um pouco mais as propriedades do modelo SCA, realizamos outra simulação com características de propagação rápida. Nesse caso a proporção de células suscetíveis na configuração inicial é de 90% e os demais sítios são preenchidos aleatoriamente com células resistentes. Para determinar a classe de universalidade do sistema, o expoente de rugosidade é calculado pela relação $C(\zeta, 0) \propto \zeta^{2\alpha}$ até o comprimento de correlação paralelo do sistema. O expoente de crescimento é obtido pela função correlação temporal $C(0, \tau) \propto \tau^{2\beta}$ para tempos menores do que t_{\times} . Os valores obtidos foram $\beta = 0,36$ e $\alpha = 0,5$. Esse último valor foi obtido para uma estreita faixa de ζ entre 900 e 1000. A figura 5.9 exibe o comportamento das funções de correlação para a propagação

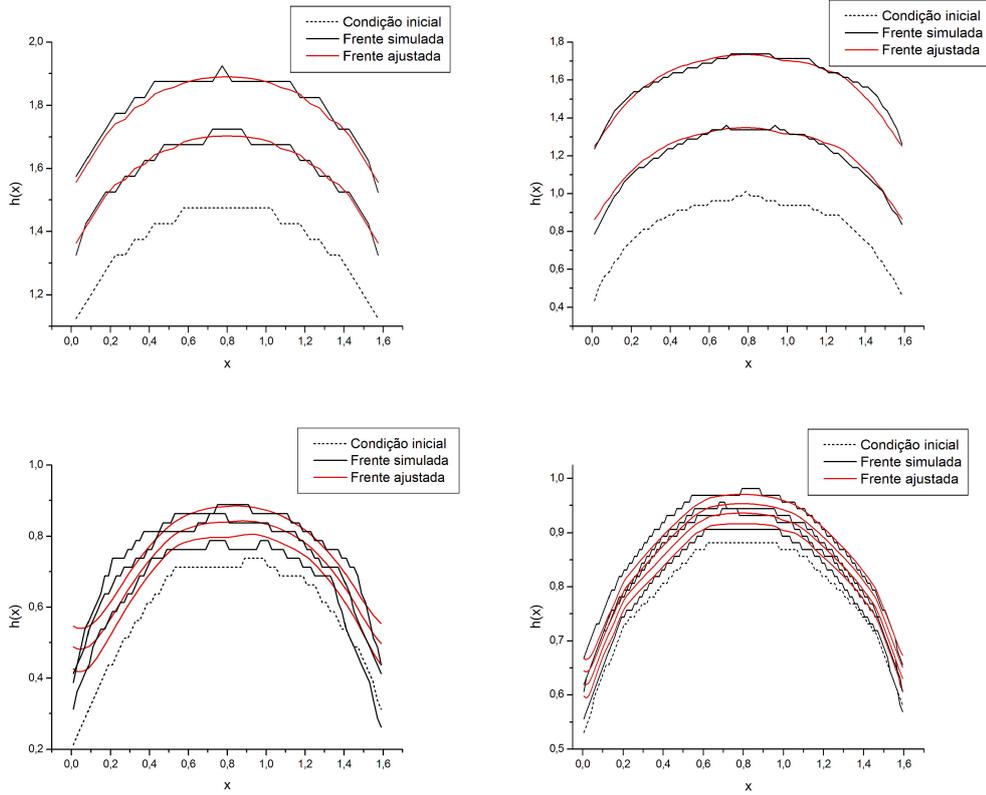


Figura 5.6: Ajuste da equação KPZ para diferentes malhas numéricas. Da esquerda para a direita a partir do alto: 32, 64, 80 e 128 células.

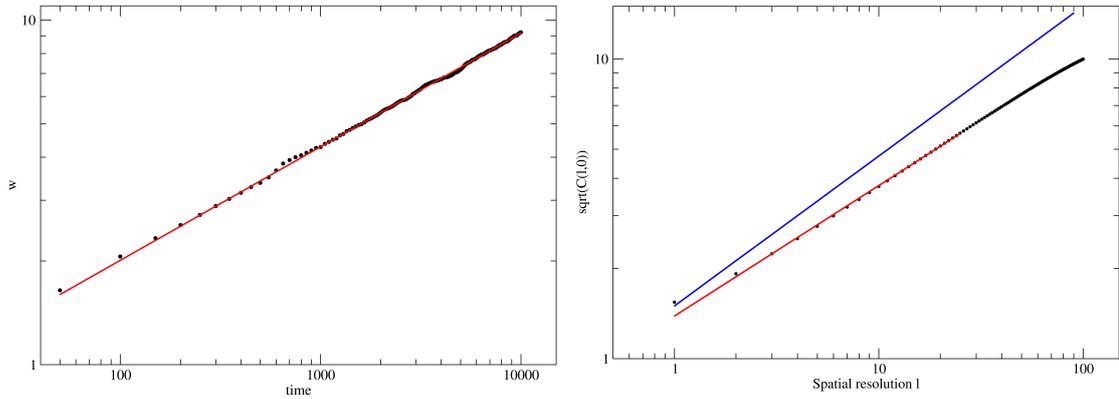


Figura 5.7: Lado esquerdo: Dependência temporal da largura da interface $w(t)$ para a propagação de frentes de fogo modelada por autômatos celulares estocásticos determinada a partir da média sobre 100 realizações. A linha sólida em vermelho corresponde à lei de potência com expoente $\beta = 0,3297$. Lado direito: Raiz quadrada da função correlação espacial para diferentes resoluções espaciais l . A linha sólida em azul corresponde ao valor teórico de $\alpha = 1/2$ e os pontos correspondem aos dados simulados com $\alpha = 0,435$ obtido com filtragem de até $l = 25$ (em vermelho).

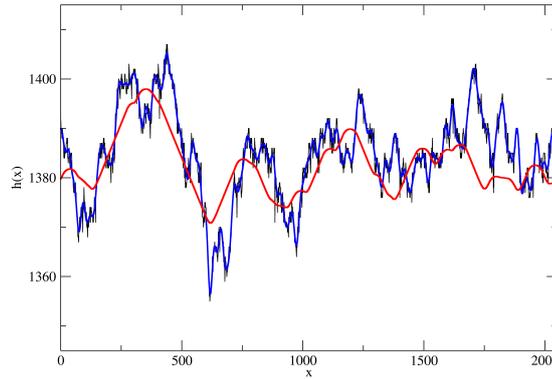


Figura 5.8: Comparação entre uma interface de entrada simulada de acordo com o modelo de autômatos celulares estocásticos (em preto) e a frente ajustada pelo método inverso (em vermelho). A curva em azul representa a interface filtrada.

de frentes de fogo numa malha de 1024×2048 células e tempo total de 200 iterações. As probabilidades de queima para células suscetíveis e resistentes são mantidas em $p = 0.7$ e $q = 0,2$, respectivamente. O número de vizinhos mínimo também permanece inalterado, isto é, $n_R = 3$ e $n_S = 1$.

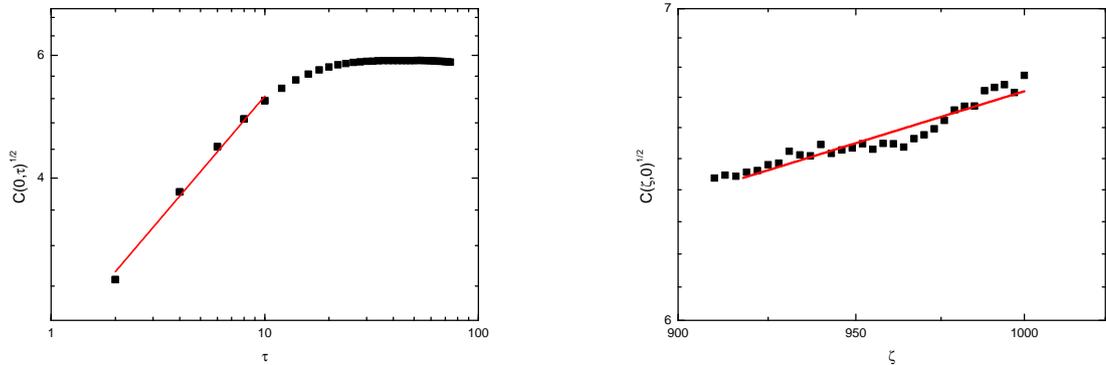


Figura 5.9: Lado esquerdo: Comportamento da função $C(0, \tau)$ calculada sobre 50 realizações para propagação de frentes de fogo modelada por autômatos celulares estocásticos. A linha sólida em vermelho corresponde a expoente $\beta = 0,36$. Lado direito: Comportamento da função correlação espacial resultando em expoente $\alpha = 0,5$ (em vermelho). Os pontos representam os dados de entrada da simulação.

Mais uma vez ratificada a classe de universalidade KPZ para o modelo implementado, tornamos a determinar numericamente os parâmetros da equação utilizando nossa abordagem [16]. Os valores obtidos nessa simulação em que a saturação ocorre mais rapidamente foram $c = 0,999$, $\nu = 1,294$, $\lambda = 4,064$, and $D = 0,013$. Cabe destacar a vantagem dessa abordagem sobre o método da equação mestra, o qual não permite deter-

minar numericamente os valores dos coeficientes da equação KPZ, mas apenas determinar o comportamento assintótico, conforme já discutido no capítulo 4. Além disso, nossos parâmetros são obtidos com um número reduzido de interfaces, o que não é viável com o método inverso de Lam e Sander.

O modelo SCA permite uma larga combinação de parâmetros, algumas das quais enquadram-se na classe de universalidade KPZ, e são mostradas nesta seção, mas outras podem não exibir tal comportamento de escala. Por exemplo, simulações variando apenas a proporção inicial de células susceptíveis S'_0 na configuração inicial, e mantendo inalteradas as probabilidades de queima p e q anteriormente aplicadas, mostradas na figura 5.10, revelam que, para uma janela de tempo de 500 iterações, o valor da largura da interface w satura nalguns casos e noutros não. No caso de $S'_0 = 0,1$ para uma janela de tempo bem maior, de 10.000 iterações, o comportamento de escala aproxima-se da classe de universalidade KPZ. No entanto, um estudo mais sistemático e rigoroso está em andamento e será brevemente submetido a periódico de circulação internacional para identificar se há uma transição de comportamentos e qual ou quais dos parâmetros do modelo SCA provoca essa transição.

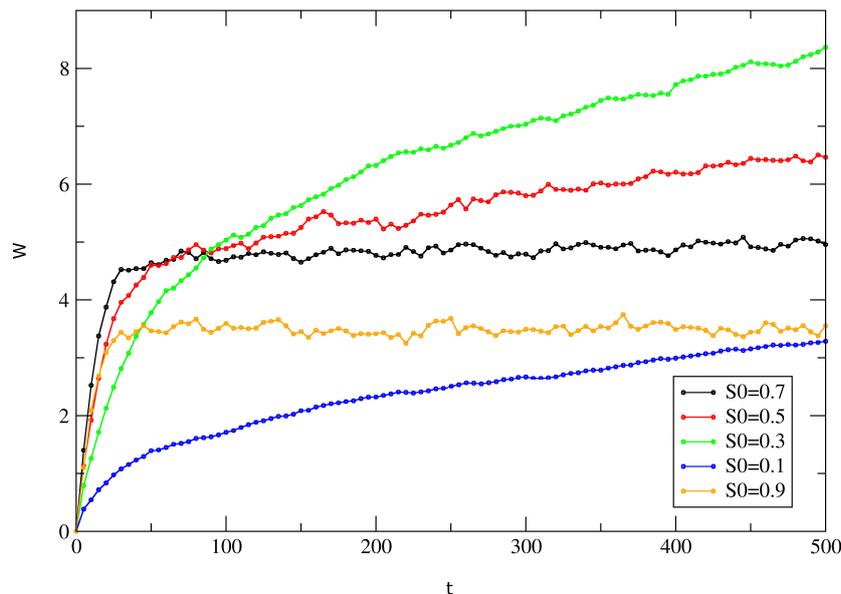


Figura 5.10: Comportamento da largura da interface w para diferentes valores de proporção inicial de células susceptíveis S_0 .

6 CONCLUSÃO

A modelagem da equação KPZ utilizando algoritmo de propagação numérica permitiu determinar os parâmetros da equação de evolução estocástica para frentes de fogo mesmo com um número reduzido de interfaces para a realização do procedimento de ajuste. Essa característica da abordagem aqui introduzida representa um avanço em relação aos métodos inversos até então disponíveis, visto que permite a obtenção dos coeficientes da equação KPZ para dados de entrada escassos e com grandes intervalos de tempo entre as configurações, como pode ser o caso de queimadas reais. Num incêndio geralmente não haverá como obter dados refinados da posição da frente, por isso nossa abordagem apresenta vantagens em conseguir obter bons ajustes a partir de poucos dados da frente de fogo.

O método inverso proposto foi testado de diversas maneiras. Inicialmente foram geradas interfaces por meio de algoritmo de integração numérica da equação KPZ. A partir de um número muito grande dessas interfaces foram selecionadas algumas poucas para funcionar como dado de entrada para o nosso método. Adicionalmente nosso método [16] foi comparado com o método proposto na referência [15], mostrando-se efetivo para a determinação dos parâmetros c , v e λ . No entanto, ainda existem imprecisões na determinação da intensidade do ruído D , as quais podem estar associadas em nossa abordagem com o fato de que o erro na determinação dos parâmetros, equação (4.29), é realizado comparando frentes experimentais com interfaces com ruído nulo. Esse fato indica a necessidade de um estudo mais aprofundado para caracterização do ruído nos dados experimentais.

Em seguida a abordagem proposta foi aplicada a dois modelos de propagação de frentes de fogo. A primeira aplicação utilizou os dados do campo de temperatura da queima de uma espuma dentro do simulador de dinâmica de incêndios FDS como dados de entrada para obter os parâmetros da equação KPZ associada com a evolução das frentes de fogo. Variando a resolução da malha computacional e a quantidade de interfaces adotadas no procedimento de ajuste foi possível determinar os parâmetros da equação de evolução

estocástica mesmo para um número pequeno de interfaces e uma baixa quantidade de pontos da malha. O método exhibe potencial para ser aplicado em situações de queima reais por meio do tratamento de imagens aéreas da área incendiada para delimitar a posição da frente de fogo. Desse modo, a modelagem poderia regredir a frente de fogo e encontrar as condições iniciais de queima, isto é, a zona de origem do fogo. Essa ferramenta, portanto, pode ser usada subsidiariamente na investigação de incêndios.

Uma segunda aplicação é realizada sobre o modelo de autómatos celulares estocásticos. O algoritmo do modelo desenvolvido fornece interfaces numa malha de tamanho $L_x \times L_y$ preenchida com células de quatro tipos: susceptível, resistente, queimando e vazia, de tal forma a reproduzir a propagação de chamas em superfícies de material combustível com heterogeneidade, tais como vegetações. As propriedades de escala do sistema enquadram-se na classe de universalidade KPZ. Portanto, esse modelo discreto foi discutido sob duas perspectivas: pela abordagem da equação mestra e pelo método inverso. Pela abordagem da equação mestra foi possível determinar a taxa de transição $W(\mathbf{H}, \mathbf{H}')$ em termos da função de grau e obter uma formulação contínua para a equação de Langevin associada. No entanto, os coeficientes dessa equação dependem fortemente da regularização adotada para a função Θ , o que nos remete ao método inverso para determinar numericamente tais coeficientes. Nossa abordagem mostrou-se mais uma vez efetiva nesse sentido.

As proporções de células susceptíveis no modelo SCA permitem variações interessantes, resultando em propagações mais rápidas ou mais lentas e, conseqüentemente, em diferentes comportamentos para a saturação da largura da interface. As probabilidades e as condições de vizinhança para a queima de cada célula também influenciam nas propriedades do modelo, possibilitando a observação de transições nos comportamentos de escala. Esses aspectos merecem um estudo mais sistemático para caracterizar apropriadamente a dinâmica de cada sistema implementado.

A linha de pesquisa atual abre caminho para diversos outros trabalhos correlacionados. A modelagem da equação KPZ pode ser testada no ajuste de frentes de fogo observadas experimentalmente. Uma outra linha a ser seguida é a análise de como os parâmetros c , v , λ e D estão relacionados com os fatores que modificam o comportamento do fogo, tais como vento e inclinação do terreno. Além disso, pode-se ampliar o estudo da equação KPZ para mais dimensões. Assim, será possível descrever a evolução de incêndios com fontes pontuais não necessariamente localizadas numa borda do objeto queimado. Ou seja, o

ajuste com a equação KPZ em duas dimensões permite a descrição da queima superficial que se propague radialmente a partir do foco de incêndio.

Referências Bibliográficas

- [1] INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P. *Fundamentos de transferência de calor e de massa*. 5. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2003.
- [2] HOLMAN, J. P. *Heat transfer*. 10. ed. New York: Mcgraw-Hill, 2010.
- [3] CENGEL, Y. A. *Heat and mass transfer: A practical approach*. 3. ed. New York: Mcgraw-Hill, 2007.
- [4] BARABÁSI, A.-L.; STANLEY, H. E. *Fractal concepts in surface growth*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- [5] SASAMOTO, T.; SPOHN, H. One-dimensional Kardar-Parisi-Zhang equation: An exact solution and its universality. *Phys. Rev. Lett.*, v. 104, n. 23, p. 230602, 2010.
- [6] HALPIN-HEALY, T.; ZHANG, Y.-C. Kinetic roughening phenomena, stochastic growth directed polymers and all that - Aspects of multidisciplinary statistical-mechanics. *Physics Reports*, v. 254, n. 4-6, p. 215–415, MAR 1995.
- [7] BRAUNSTEIN, L.; BUCETA, R. C.; ARCHUBI, C. D.; COSTANZA, G. Theoretical continuous equation derived from the microscopic dynamics for growing interfaces in quenched media. *Phys. Rev. E*, v. 62, n. 3, p. 3920, 2000.
- [8] KARDAR, M.; PARISI, G.; ZHANG, Y.-C. Dynamic scaling of growing interfaces. *Phys. Rev. Lett.*, v. 56, n. 9, p. 889, 1986.
- [9] ZHANG, J.; ZHANG, Y.-C.; ALSTROM, P.; LEVINSEN, M. T. Modeling forest fire by a paper-burning experiment, a realization of the interface growth mechanism. *Physica A*, Amsterdam, v. 189, p. 383–389, 1992.
- [10] MAUNUKSELA, J.; MYLLYS, M.; KÄHKÖNEN, O.-P.; TIMONEN, J.; PROVATAS, N.; ALAVA, M. J.; ALA-NISSILA, T. Kinetic roughening in slow combustion of paper. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, n. 8, p. 1515, 1997.
- [11] SEITO, A. I.; GILL, A. A.; PANNONI, F. D.; ONO, R.; SILVA, S. B.; DEL CARLO, U.; SILVA, V. P. *A segurança contra incêndio no brasil*. 1. ed. São Paulo: Projeto, 2008.
- [12] MIETTINEN, L.; MYLLYS, M.; MERIKOSKI, J.; TIMONEN, J. Experimental determination of KPZ height-fluctuation distributions. *Eur. Phys. J. B*, v. 46, p. 55–60, 2005.
- [13] PRÄHOFER, M.; SPOHN, H. Universal distributions for growth processes in 1 + 1 dimensions and random matrices. *Phys. Rev. Lett.*, v. 84, n. 21, p. 4882–4885, 2000.

- [14] LÓPES, J. M.; CASTRO, M.; GALLEGO, R. Scaling of local slopes, conservation laws, and anomalous roughening in surface growth. *Phys. Rev. Lett.*, v. 94, n. 16, p. 166103, 2005.
- [15] LAM, C.-H.; SANDER, L. M. Inverse method for interface problems. *Phys. Rev. Lett.*, v. 71, n. 4, p. 561, 1993.
- [16] CAMPOS, A. T.; ROCHA FILHO, T. M. Determination of the Kardar-Parisi-Zhang equation from experimental data with a small number of configurations. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 392, n. 18, p. 3903 – 3908, 2013.
- [17] McGRATTAN, K.; BAUM, H.; REHM, R.; HOSTIKKA, S.; FLOYD, J. *Fire dynamics simulator (version 5) technical reference guide*. Washington: NIST, 2008.
- [18] KARLSSON, B.; QUINTIERE, J. G. *Enclosure fire dynamics*. USA: CRC Press LLC, 2000.
- [19] CAMPOS, A. T. *Modelamento da propagação superficial de frentes de fogo com a equação KPZ*. 2009. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade de Brasília, Brasília, 2009.
- [20] GARDINER, C. *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry, and the natural sciences*. 3. ed., Springer series in synergetics. Berlin: Springer, 2004.
- [21] VAN KAMPEN, N. G. *Stochastic processes in physics and chemistry*. Amsterdam: North-Holland, 1990.
- [22] RISKEN, H. *The Fokker-Planck equation: Methods of solution and applications*. 2. ed. Berlin: Springer-Verlag, 1989.
- [23] GNEDENKO, B. V. *A teoria da probabilidade*. 1. ed. Rio de Janeiro: Editora Ciência Moderna, 2008.
- [24] FOX, R. F.; KEIZER, J. Amplification of intrinsic fluctuations by chaotic dynamics in physical systems. *Phys. Rev. A*, v. 43, p. 1709–1720, Feb 1991.
- [25] KRUG, J. Origins of scale invariance in growth processes. *Advances in Physics*, v. 46, n. 2, p. 139–282, MAR-APR 1997.
- [26] MAUNUKSELA, J.; MYLLYS, M.; MERIKOSKI, J.; TIMONEN, J.; KÄRKKÄLÄNEN, T.; WELLING, M.; WIJNGAARDEN, R. J. Determination of the stochastic evolution equation from noisy experimental data. *Eur. Phys. J. B*, v. 33, p. 193, 2003.
- [27] MYLLYS, M.; MAUNUKSELA, J.; MERIKOSKI, J.; TIMONEN, J.; AVIKAINEN, M. KPZ equation with realistic short-range-correlated noise. *Eur. Phys. J. B*, v. 36, n. 4, p. 619–626, 2003.
- [28] MERIKOSKI, J.; MAUNUKSELA, J.; MYLLYS, M.; TIMONEN, J.; ALAVA, M. J. Temporal and spatial persistence of combustion fronts in paper. *Phys. Rev. Lett.*, v. 90, p. 024501, 2003.

- [29] MAUNUKSELA, J.; MYLLYS, M.; TIMONEN, J.; ALAVA, M.; ALA-NISSILA, T. Kardar-Parisi-Zhang scaling in kinetic roughening of fire fronts. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 266, n. 1 - 4, p. 372 – 376, 1999.
- [30] FAMILY, F.; VICSEK, T. Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 18, n. 2, p. L75–L81, 1985.
- [31] ALBERT, R.; BARABÁSI, A.-L.; CARLE, N.; DOUGHERTY, A. Driven interfaces in disordered media: Determination of universality classes from experimental data. *Phys. Rev. Lett.*, v. 81, n. 14, p. 2926, 1998.
- [32] BARABÁSI, A.-L.; VICSEK, T. Multifractality of self-affine fractals. *Phys. Rev. A*, v. 44, p. 2730–2733, Aug 1991.
- [33] MYLLYS, M.; MAUNUKSELA, J.; ALAVA, M.; ALA-NISSILA, T.; MERIKOSKI, J.; TIMONEN, J. Kinetic roughening in slow combustion of paper. *Phys. Rev. E*, v. 64, n. 3, p. 036101, 2001.
- [34] FOSTER, D.; NELSON, D.; STEPHEN, M. J. Large-distance and long time properties of a randomly stirred fluid. *Phys. Rev. A*, v. 16, n. 2, p. 732, 1977.
- [35] HUANG, K. *Statistical mechanics*. New York: IE-Wiley, 1987.
- [36] MÅLØY, K. J.; FEDER, J.; JØSSANG, T. Viscous fingering fractals in porous media. *Phys. Rev. Lett.*, v. 55, p. 2688–2691, Dec 1985.
- [37] AMARAL, L. A. N.; BARABÁSI, A.-L.; BULDYREV, S. V.; HAVLIN, S.; STANLEY, H. E. New exponent characterizing the effect of evaporation on imbibition experiments. *Phys. Rev. Lett.*, v. 72, p. 641–644, Jan 1994.
- [38] BULDYREV, S. V.; BARABÁSI, A.-L.; CASERTA, F.; HAVLIN, S.; STANLEY, H. E.; VICSEK, T. Anomalous interface roughening in porous media: Experiment and model. *Phys. Rev. A*, v. 45, p. R8313–R8316, Jun 1992.
- [39] MYLLYS, M.; MAUNUKSELA, J.; ALAVA, M. J.; ALA-NISSILA, T.; TIMONEN, J. Scaling and noise in slow combustion of paper. *Phys. Rev. Lett.*, v. 84, p. 1946–1949, 2000.
- [40] QUINTIERE, J. G. *Principles of fire behavior*. USA: Delmar Publishers, 1997.
- [41] Corpo de Bombeiros Militar do Distrito Federal. *Manual básico de combate a incêndio*. Brasília: CBMDF, 2006.
- [42] DRYSDALE, D. *An introduction to fire dynamics*. 2. ed. England: John Wiley & Sons Ltd., 1998.
- [43] LAWSON, D. I.; SIMMS, D. L. The ignition of wood by radiation. *British Journal of Applied Physics*, v. 3, n. 9, p. 288, 1952.
- [44] QUINTIERE, J. G. Surface flame spread. In: *SFPE handbook of fire protection engineering*. Quincy, MA: NFPA, 2002. v. 2.

- [45] THOMAS, P. H. Rates of spread of some wind-driven fires. *Forestry*, v. 44, n. 2, p. 155 – 175, 1971.
- [46] FORNEY, G. P.; MOSS, W. F. Analyzing and exploiting numerical characteristics of zone fire models. *Fire Science & Technology*, v. 14, n. 1, p. 49, 1994.
- [47] CHOW, W. K.; MENG, L. Analysis of key equations in a two-layer zone model and application with symbolic mathematics in fire safety engineering. *Journal of fire sciences*, v. 22, p. 97, 2004.
- [48] McGRATTAN, K. (Ed.). *Fire dynamics simulator (version 4) technical reference guide*. Washington: NIST, 2006.
- [49] TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, A.; PLETCHER, R. H. *An introduction to fire dynamics*. 2. ed. USA: Taylor & Francis, 1997.
- [50] REHM, R. G.; BAUM, H. R. The equations of motion for thermally driven buoyant flows. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, v. 83, n. 3, p. 297, 1978.
- [51] JULLIEN, R.; BOTET, R. Surface thickness in the eden model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 54, p. 2055–2055, May 1985.
- [52] MEAKIN, P.; RAMANLAL, P.; SANDER, L. M.; BALL, R. C. Ballistic deposition on surfaces. *Phys. Rev. A*, v. 34, p. 5091–5103, Dec 1986.
- [53] KIM, J. M.; KOSTERLITZ, J. M. Growth in a restricted solid-on-solid model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, p. 2289–2292, May 1989.
- [54] KIM, J. M.; KOSTERLITZ, J. M.; ALA-NISSILA, T. Surface growth and crossover behaviour ins restricted solid-on-solid model. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 24, n. 23, p. 5569–5586, 1991.
- [55] PARK, K.; KAHNG, B. Exact derivation of the Kardar-Parisi-Zhang equation for the restricted solid-on-solid model. *Phys. Rev. E*, v. 51, p. 796–798, Jan 1995.
- [56] BUCETA, R. C.; HANSMANN, D. Coarse-grained approach for universality classification of discrete models. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 45, n. 43, p. 435202, 2012.
- [57] VVEDENSKY, D. D.; ZANGWILL, A.; LUSE, C. N.; WILBY, M. R. Stochastic equations of motion for epitaxial growth. *Phys. Rev. E*, v. 48, p. 852–862, Aug 1993.
- [58] HASELWANDTER, C. A.; VVEDENSKY, D. D. Scaling of ballistic deposition from a langevin equation. *Phys. Rev. E*, v. 73, p. 040101, Apr 2006.
- [59] OLIVEIRA, T. J.; DECHOUM, K.; REDINZ, J. A.; Aarão Reis, F. D. A. Universal and nonuniversal features in the crossover from linear to nonlinear interface growth. *Phys. Rev. E*, v. 74, p. 011604, Jul 2006.
- [60] PREDOTA, M.; KOTRLA, M. Stochastic equations for simple discrete models of epitaxial growth. *Phys. Rev. E*, v. 54, p. 3933–3942, Oct 1996.

- [61] VVEDENSKY, D. D. Edwards-wilkinson equation from lattice transition rules. *Phys. Rev. E*, v. 67, p. 025102, Feb 2003.
- [62] VOLD, M. J. Computer simulation of floc formation in a colloidal suspension. *Journal of Colloid Science*, v. 18, n. 7, p. 684 – 695, 1963.
- [63] CHUA, A. L.-S.; HASELWANDTER, C. A.; BAGGIO, C.; VVEDENSKY, D. D. Langevin equations for fluctuating surfaces. *Phys. Rev. E*, v. 72, p. 051103, Nov 2005.
- [64] SILVEIRA, F. A.; AARÃO REIS, F. D. A. Langevin equations for competitive growth models. *Phys. Rev. E*, v. 85, p. 011601, Jan 2012.
- [65] HASELWANDTER, C. A.; VVEDENSKY, D. D. Renormalization of stochastic lattice models: Basic formulation. *Phys. Rev. E*, v. 76, p. 041115, Oct 2007.
- [66] DROSSEL, B.; SCHWABL, F. Self-organized critical forest-fire model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 69, p. 1629–1632, Sep 1992.
- [67] CAMELO-NETO, G.; COUTINHO, S. Forest-fire model with resistant trees. *J. Stat. Mech.*, v. 2011, n. 6, p. P06018, 2011.
- [68] ALEXANDRIDIS, A.; RUSSO, L.; VAKALIS, D.; BAFAS, G. V.; SIETTOS, C. I. Wildland fire spread modelling using cellular automata: evolution in large-scale spatially heterogeneous environments under fire suppression. *International Journal of Wildland Fire*, v. 20, n. 5, p. 633, 2011.
- [69] CHENEY, N. P.; GOULD, J. S.; CATCHPOLE, W. R. The influence of fuel, weather and fire shape variables on fire-spread in grasslands. *International Journal of Wildland Fire*, v. 3, n. 1, p. 31–44, MAR 1993.
- [70] ROTHERMEL, R. C. *A mathematical model for predicting fire spread in wildland fuels*. Intermountain Forest & Range Experiment Station, Forest Service, US Department of Agriculture, 1972.
- [71] PROVATAS, N.; ALA-NISSILA, T.; GRANT, M.; ELDER, K. R.; PICHÉ, L. Scaling, propagation and kinetic roughening of flame fronts in random media. *J. Stat. Phys.*, v. 81, n. 3-4, p. 737, 1995.
- [72] MARGERIT, J.; SÉRO-GUILLAUME, O. Modelling forest fires. Part II: reduction to two-dimensional models and simulation of propagation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 45, n. 8, p. 1723 – 1737, 2002.
- [73] CHOPARD, B.; DROZ, M. *Cellular automata modeling of physical systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
- [74] SCHIFF, J. L. *Cellular automata: A discrete view of the world*. New Jersey: Wiley-Interscience, 2008.
- [75] WHITE, S. H.; del Rey, A. M.; SÁNCHEZ, G. R. Modeling epidemics using cellular automata. *Applied Mathematics and Computation*, v. 186, n. 1, p. 193 – 202, 2007.

- [76] GIACOMETTI, A.; ROSSI, M. Interface dynamics from experimental data. *Phys. Rev. E*, v. 62, n. 2, p. 1716, 2000.
- [77] GIACOMETTI, A.; ROSSI, M. Pseudospectral approach to inverse problems in interface dynamics. *Phys. Rev. E*, v. 63, p. 046102, 2001.
- [78] LAM, C.-H.; SHIN, F. G. Improved discretization of the Kardar-Parisi-Zhang equation. *Phys. Rev. E*, v. 58, n. 5, p. 5592, 1998.
- [79] LAM, C.-H.; SHIN, F. G. Anomaly in numerical integrations of the Kardar-Parisi-Zhang equation. *Phys. Rev. E*, v. 57, n. 6, p. 6506, 1998.
- [80] MOSER, K.; KERTÉSZ, J.; WOLF, D. E. Numerical solution of the Kardar-Parisi-Zhang equation in one, two and three dimensions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 178, n. 2, p. 215 – 226, 1991.
- [81] MIRANDA, V. G.; AARÃO REIS, F. D. A. Numerical study of the Kardar-Parisi-Zhang equation. *Phys. Rev. E*, v. 77, p. 031134, Mar 2008.
- [82] AMAR, J. G.; FAMILY, F. Numerical solution of a continuum equation for interface growth in 2+1 dimensions. *Phys. Rev. A*, v. 41, p. 3399–3402, Mar 1990.
- [83] BUCETA, R. C. Generalized discretization of the kardar-parisi-zhang equation. *Phys. Rev. E*, v. 72, p. 017701, Jul 2005.
- [84] DASGUPTA, C.; KIM, J. M.; DUTTA, M.; DAS SARMA, S. Instability, intermittency, and multiscaling in discrete growth models of kinetic roughening. *Phys. Rev. E*, v. 55, p. 2235–2254, Mar 1997.
- [85] PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. *Numerical recipes*. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
- [86] WERNECK, A. S.; ROCHA FILHO, T. M.; DARDENNE, L. E. General methodology to optimize damping functions to account for charge penetration effects in electrostatic calculations using multicentered multipolar expansions. *J. Phys. Chem. A*, v. 112, n. 2, p. 268, 2008.
- [87] McGRATTAN, K.; KLEIN, B.; HOSTIKKA, S.; FLOYD, J. *Fire dynamics simulator (version 5) user's guide*. Washington: NIST, 2008.

APÊNDICE A – Código fonte para implementação do modelo SCA

```

#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <stdio.h>

// Programa para modelo de autômatos celulares

__global__ void initial_configuration( int *, long *, int ,
                                     int , int , float , float );
__global__ void update_cells( int *, int *, int , int ,
                              long *, float , float , int );
void fire_front( int *, int , int , int *, float *);
__global__ void initialize_ran( long *);

int main()
{
    int i , nx , ny , n_min , n_max , iter , nts , tc , nblocks , nthreads ,
        device_num , height ;
    float t0 , s0 , sp , rp , w[1];
    long seed ;

    int *cells_gpu , *cells2_gpu , *front_gpu , *swp_gpu ;
    long *primes_gpu ;
    float *w_gpu ;

    FILE *finput , *ffront , *ftimes , *fw ;

```

```
FILE *fprimes ;

finput=fopen(" celular . in " , " r " );

fscanf ( finput , "% i " , & n t m a x ) ;
fscanf ( finput , "% i " , & n t s ) ;
fscanf ( finput , "% i " , & n x ) ;
fscanf ( finput , "% i " , & n y ) ;
fscanf ( finput , "% i " , & h e i g h t ) ;
fscanf ( finput , "% f " , & t 0 ) ;
fscanf ( finput , "% f " , & s 0 ) ;
fscanf ( finput , "% f " , & s p ) ;
fscanf ( finput , "% f " , & r p ) ;
fscanf ( finput , "% l i " , & s e e d ) ;
fscanf ( finput , "% i " , & n _ m i n ) ;
fscanf ( finput , "% i " , & n b l o c k s ) ;
fscanf ( finput , "% i " , & n t h r e a d s ) ;
fscanf ( finput , "% i " , & d e v i c e _ n u m ) ;

fclose ( finput ) ;

cudaSetDevice ( d e v i c e _ n u m ) ;

printf ( " =====\n " ) ;
printf ( " n t m a x , n t s : % i % i \n " , n t m a x , n t s ) ;
printf ( " n x , n y : % i % i \n " , n x , n y ) ;
printf ( " t 0 , s 0 : % f % f \n " , t 0 , s 0 ) ;
printf ( " s p , r p , n _ m i n : % f % f % i \n " , s p , r p , n _ m i n ) ;
printf ( " =====\n \n " ) ;

// Arquivo de saída
```

```
ffront=fopen("propagate.dat","w");
ftimes=fopen("times.dat","w");
fw=fopen("width.dat","w");
fprimes=fopen("prime_numbers.dat","r");

// Alocação de memória

int *cell_grid=(int*)malloc(nx*ny*sizeof(int));
int *cell_grid2=(int*)malloc(nx*ny*sizeof(int));
int *front=(int*)malloc(nx*sizeof(int));
long *primes=(long*)malloc(nblocks*nthreads*sizeof(long));

cudaMalloc((void**) &cells_gpu , nx*ny*sizeof(int));
cudaMalloc((void**) &cells2_gpu , nx*ny*sizeof(int));
cudaMalloc((void**) &front_gpu , nx*sizeof(int));
cudaMalloc((void**) &w_gpu , sizeof(float));
cudaMalloc((void**) &primes_gpu ,nblocks*nthreads*sizeof(long));

// Lista de números primos

for (long ii=0;ii<nblocks*nthreads;ii++)
{
    fscanf(fprimes,"%li",&primes[ii]);
    primes[ii]+=seed;
};
fclose(fprimes);
cudaMemcpy(primes_gpu ,primes ,nblocks*nthreads*sizeof(long) ,
           cudaMemcpyHostToDevice);

// Gerador de números aleatórios
```

```
initialize_ran <<<nblocks , nthreads >>>(primes_gpu );

printf(" inicializado \n");

// Configuração inicial.

initial_configuration <<<nblocks , nthreads >>>
    ( cells_gpu , primes_gpu , nx , ny , height , t0 , s0 );

// Salva a frente inicial

cudaMemcpy( cell_grid , cells_gpu , nx*ny*sizeof( int ) ,
            cudaMemcpyDeviceToHost );

fire_front( cell_grid , nx , ny , front , w );

for( i=0; i<nx; i++) { fprintf( ffront , "%i %i \n" , i ,
                                front[ i ] ); };

fprintf( ftimes , "%i \n" , 0 );

// Loop

tc=0;
for ( iter =1; iter <=ntmax; iter ++ )
{
    update_cells <<<nblocks , nthreads >>>
        ( cells_gpu , cells2_gpu , nx , ny ,
          primes_gpu , sp , rp , n_min );

    swp_gpu=cells_gpu ;
    cells_gpu=cells2_gpu ;
    cells2_gpu=swp_gpu ;
```

```
        tc++;

        if ( tc==nts )
        {
            tc=0;

            cudaMemcpy( cell_grid , cells_gpu , nx*ny*sizeof( int ) ,
                        cudaMemcpyDeviceToHost );
            fire_front( cell_grid , nx , ny , front , w );
            for( i=0; i<nx; i++){ fprintf( ffront , "%i %i\n" , i ,
                                         front[ i ] ); };
            fprintf( ftimes , "%i\n" , iter );
            fprintf( fw , "%i %f\n" , iter , w[ 1 ] );
            printf( " Iteration %i\n =====\n" , iter );
        };
};

fclose( ffront );
fclose( ftimes );
fclose( fw );

free( cell_grid );
free( front );

cudaFree( cells_gpu );
cudaFree( cells2_gpu );
cudaFree( front_gpu );
cudaFree( w_gpu );

return 0;
}
```

```
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <stdio.h>

float ran2(long *);

__global__ void initial_configuration(int *cell_grid,
    long *primes, int nx, int ny, int height, float t0,
    float s0)
{
    int cind, tid, cind0, tid0;
    long idum0;
    float alpha, rn0;

    cind=threadIdx.x;

    cind0=threadIdx.x;
    tid0=blockIdx.x;

    while (cind<nx)
    {
        tid=blockIdx.x;
        while (tid<ny)
        {
            idum0=primes[tid0*blockDim.x+cind0];
#include "ran2.inc"
            primes[tid0*blockDim.x+cind0]=idum0;
            alpha=rn0;
            if (alpha<t0)
            {
#include "ran2.inc"
                primes[tid0*blockDim.x+cind0]=idum0;
                if (alpha<s0)
                {
```

```
        cell_grid [ tid * nx + cind ] = 1; // Celula S
    }
    else
    {
        cell_grid [ tid * nx + cind ] = 2; // Celula R
    };
}
else
{
    cell_grid [ tid * nx + cind ] = 0; // Celula E
};
// Frente de fogo inicial
if ((4.0 * (float) (- height * cind * (cind - nx + 1)))
    / ((float) nx * nx) >= (float) tid)
{ cell_grid [ tid * nx + cind ] = -1; };

    tid += gridDim . x;
};
    cind += blockDim . x;
};

return ;
}
```

```
// Inicializa os geradores de número aleatório na GPU

#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <stdio.h>

__global__ void initialize_ran( long *primes)
{
    long idum0;
    int i0 ,j0 ;
    float rn0 ;

    i0=threadIdx .x ;
    j0=blockIdx .x ;

    idum0=-primes [ blockDim .x*j0+i0 ] ;

#include "ran2.inc"

    primes [ blockDim .x*j0+i0 ]=idum0 ;

    rn0=rn0 ;

    return ;
}
```

```
// Gerador de número aleatório
/* Ver Ref. [85] para um exemplo.
   Na tese utilizamos ran2.cu.
*/
```

```
// Atualização da malha

#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <stdio.h>

__global__ void update_cells( int *cells , int *cells2 ,
                             int nx , int ny , long *primes , float sp ,
                             float rp , int n_min)
{
    int cind , tid , cind0 , tid0 , im , ip , jm , jp , nb ;
    long idum0 ;
    float rn0 , alpha ;

    cind=threadIdx .x ;
    tid=blockIdx .x ;

    cind0=cind ;
    tid0=tid ;

    while ( cind<nx )
    {
        tid=blockIdx .x ;
        im=cind -1 ;
        ip=cind +1 ;
        if ( im==-1 ) { im=nx -1 ;} ;
        if ( ip==nx ) { ip=0 ;} ;
        while ( tid <ny )
        {
            jm=tid -1 ;
            jp=tid +1 ;

// Contagem de células vizinhas ocupadas.
```

```

        nb=0;

        if ( cells [ tid *nx+im]==-1) {nb++;};
        if ( cells [ tid *nx+ip]==-1) {nb++;};

        if (jm>=0 && cells [jm*nx+cind]==-1) {nb++;};
        if (jp<ny && cells [jp*nx+cind]==-1) {nb++;};
        if (jm>=0 && cells [jm*nx+im]==-1) {nb++;};
        if (jm>=0 && cells [jm*nx+ip]==-1) {nb++;};
        if (jp<ny && cells [jp*nx+im]==-1) {nb++;};
        if (jp<ny && cells [jp*nx+ip]==-1) {nb++;};

// Condição de queima conforme requisitos para as células

        idum0=primes [ tid0*blockDim.x+cind0 ];
#include "ran2.inc"
        primes [ tid0*blockDim.x+cind0]=idum0;
        alpha=rn0;

        cells2 [ tid *nx+cind]= cells [ tid *nx+cind ];

        if ( cells [ tid *nx+cind]==1 && nb>0)
        {
            if ( alpha < sp)
            {
                cells2 [ tid *nx+cind]=-1;
            };
        };

        if ( cells [ tid *nx+cind]==2 && nb>=n_min)
        {
            if ( alpha < rp)
            {

```

```
        cells2 [ tid *nx+cind ] = -1;
    };
};
tid += gridDim . x;
};
cind += blockDim . x;
};

return ;
}
```

```
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <stdio.h>

void fire_front(int *cells ,int nx ,int ny ,int *front ,float *w)
{
    int i ,j;
    float avg ,a;

    avg=0.0;

    for (i=0;i<nx;i++)
    {
        j=0;
        while ( cells[nx*j+i]==-1 && j<ny-1) {j++;};
        front[i]=j;
        avg+=(float) j;
    };
    avg/=(float) nx;

    w[1]=0.0;

    for (i=0;i<nx;i++)
    {
        a=((float) front[i]) - avg;
        w[1]+=a*a;
    };
    w[1]/=(float) nx;
    w[1]=sqrt(w[1]);
    return;
}
```

APÊNDICE B – Algoritmo de cálculo dos coeficientes da equação de Langevin para o modelo SCA

```

> # Cálculo dos coeficientes utilizando a tangente hiperbólica e a
função erro.
> h1p:=a*diff(u(x,t),x)+a**2/2*diff(u(x,t),x,x);
> h1m:=-a*diff(u(x,t),x)+a**2/2*diff(u(x,t),x,x);
> Ni:= (A0+A1*dhp+A2*dhp**2-(A0+A1*(dhp-3)+A2*(dhp-3)**2))*\
> (dhp+1)+3*(A0+A1*(dhp-3)+A2*(dhp-3)**2)+(A0+A1*(dhm)+A2*(dhm)**2-\
> (A0+A1*(dhm-3)+A2*(dhm-3)**2))*(dhm+1)+3*(A0+A1*(dhm-3)+A2*(dhm-3)**2)+1;
> Tns:=A0+A1*(Ni-Ns)+A2*(Ni-Ns)**2;
> Tnr:=A0+A1*(Ni-Nr)+A2*(Ni-Nr)**2;
> Tns1:=subs(dhp=h1p,dhm=h1m,Tns);
> expand(Tns1);
> Tnr1:=subs(dhp=h1p,dhm=h1m,Tnr);
> expand(Tnr1);
> ki1:=s0*p*Tns1+(1-s0)*q*Tnr1;
> ki1tanh:=subs(A0=1,A2=0,ki1);
> ki1tanh2:=expand(ki1tanh);
> subs(s0=0.1,p=0.7,q=0.2,Nr=3,Ns=1,ki1tanh2);
> expdh:=taylor(exp(-d**2*(x+b)**2)-exp(-d**2*(x)**2),x=0,3);
> erf dh1:=taylor(erf(d*(x+b)),x=0,3);
> erf dh2:=taylor(erf(d*x),x=0,3);
> Tmax:=1/(2*b)*(b+1/(sqrt(Pi)*d)*expdh+(x+b)*erf dh1-x*erf dh2);

```

```

> expand(Tmax);
> simplify(Tmax);
> C0:=(2*b*d*sqrt(Pi))**(-1)*(b*d*sqrt(Pi)-1+exp(-d**2*b**2)+\
> b*d*sqrt(Pi)*erf(d*b));
> evalf(subs(b=1,d=10,C0));
> C1:=(2*b)**(-1)*erf(d*b);
> evalf(subs(b=1,d=10,C1));
> C2:=d/(2*b*sqrt(Pi))*(exp(-d**2*b**2)-1);
> evalf(subs(b=1,d=10,C2));
> ki1max:=subs(A0=C0,A1=C1,A2=C2,ki1);
> subs(s0=0.1,p=0.7,q=0.2,Nr=3,Ns=1,a=1,b=1,d=10,ki1max);
> expand(%);
> evalf(%);

```

***APÊNDICE C – Código fonte para
implementação do método
inverso para número arbitrário
de configurações.***

```

C
C Programa principal de ajuste da equação KPZ a partir de dados
C experimentais ou simulados
C
      IMPLICIT NONE
      INCLUDE 'dim.inc'
      INTEGER NT,NX, I , J , ITER
      REAL H(NXMAX,NTMAX) , TIME(NTMAX) , DELTAT , FUNC , SS ,
      .      L , C , NU , LAMBDA , A(3) , XI(4,3) , FTOL , FRET , D , XX(NXMAX) ,
      .      ERRO , DT , TF , CMIN , CMAX , NUMIN , NUMAX , LMIN , LMAX , Y(4) ,
      .      H2(NXMAX,NTMAX) , ERRF , COMPUTED , ALPHA
      EXTERNAL ERRO , FUNC , COMPUTED
      COMMON TIME , XX , H , NT , NX , DELTAT , TF , DT
      COMMON /ERROR/ CMIN , CMAX , NUMIN , NUMAX , LMIN , LMAX , ALPHA

C Lê os dados de entrada .

      OPEN(UNIT=12 , FILE='kpz2.in' , STATUS='OLD')
      READ(12 , *) NX
      READ(12 , *) C
      READ(12 , *) NU
      READ(12 , *) LAMBDA

```

```

READ(12,*) SS
READ(12,*) FTOL
READ(12,*) DELTAT
READ(12,*) CMIN
READ(12,*) CMAX
READ(12,*) NUMIN
READ(12,*) NUMAX
READ(12,*) LMIN
READ(12,*) LMAX
READ(12,*) ALPHA
CLOSE(12)

```

C Lê os dados para a propagação numérica.

C

```

CALL READDATA(H, TIME, XX, NT, NX)
L=XX(NX)-XX(1)
TF=TIME(NT)+DELTAT/2.0
DT=0.0
DT=(TIME(NT)-TIME(1))/(NT-1)
PRINT *, ' '
PRINT *, 'DT, DELTAT= ', DT, DELTAT
PRINT *, 'NT, NX, L= ', NT, NX, L
PRINT *, 'C, NU, LAMBDA= ', C, NU, LAMBDA
PRINT *, 'FTOL= ', FTOL
PRINT *, 'TF= ', TF
PRINT *, 'DT= ', DT
PRINT *, ' '

```

C

C Minimização

C

```

A(1)=C
A(2)=NU
A(3)=LAMBDA
XI(4,1)=C

```

```

XI(4,2)=NU
XI(4,3)=LAMBDA
DO 100 I=1,3
    DO 110 J=1,3
        IF (I.EQ.J) THEN
            XI(I,I)=XI(4,I)+SS
        ELSE
            XI(I,J)=XI(4,J)
        ENDIF
110     CONTINUE
100    CONTINUE
    PRINT *,XI(1,1),XI(1,2),XI(1,3)
    DO 140 I=1,4
        DO 150 J=1,3
            A(J)=XI(I,J)
150     CONTINUE
        Y(I)=FUNC(A)
140    CONTINUE
    CALL AMOEBA(XI,Y,4,3,3,FTOL,FUNC,ITER)
    FRET=Y(1)
    C=XI(1,1)
    NU=XI(1,2)
    LAMBDA=XI(1,3)
    PRINT *, 'FRET= ',FRET
    D=COMPUTED(C,NU,LAMBDA)
    PRINT *, ' '
    PRINT *, 'C= ',C
    PRINT *, 'NU= ',NU
    PRINT *, 'LAMBDA= ',LAMBDA
    PRINT *, 'D= ',D
    PRINT *, ' '
    OPEN(UNIT=14,FILE='kpz.dat',STATUS='UNKNOWN')
    WRITE(14,*) C
    WRITE(14,*) NU

```

```
WRITE(14 ,*) LAMBDA
WRITE(14 ,*) D
WRITE(14 ,*) FRET
CLOSE(14)
CALL HFINAL(C,NU,LAMBDA,H2)
END
```

C Solução numérica

```
SUBROUTINE PROPAGATE(C,NU,LAMBDA,HOUT,ALPHA)
IMPLICIT NONE
INCLUDE 'dim.inc'
INTEGER N,I,I1,I2,J,JK,NX,NT
REAL H(NXMAX),HOLD(NXMAX),TCOUNT,P1,P2,PR,XI,T,DX
REAL C,NU,LAMBDA,X(NXMAX),TIME(NTMAX),TF,DT,
.     HIN(NXMAX,NTMAX),HOUT(NXMAX,NTMAX),DHDT(NXMAX,NTMAX),
.     DD(NXMAX),DT2,ALPHA
COMMON TIME,X,HIN,NT,NX,DT,TF,DT2
COMMON /DERIVADA/ DHDT
N=NX
DX=X(2)-X(1)
```

C Prepara a condição inicial.

```
DO 900 I=1,N
    HOLD(I)=HIN(I,1)
    HOUT(I,1)=HIN(I,1)
```

900 CONTINUE

C

C Loop

C

```
T=0.0D+0
TCOUNT=0.0D+0
J=1
JK=1
```

C PRINT *,'----',C,NU,LAMBDA,N

```
1000 DO 1100 I=1,N
    I1=I-1
    I2=I+1
```

C Condições de contorno periódicas.

```
IF (I1.LT.1) I1=N
IF (I2.GT.N) I2=1
```

C Discretização da equação KPZ.

$$P1=(HOLD(I2)+HOLD(I1)-2*HOLD(I))/DX**2$$

$$P2=((HOLD(I2)-HOLD(I))**2+(HOLD(I2)-HOLD(I))$$

$$*(HOLD(I)-HOLD(I1)))$$

$$+(HOLD(I)-HOLD(I1))**2)/(3.0*DX**2)$$

$$P2=(1.0-EXP(-ALPHA*P2))/ALPHA$$

$$PR=C+NU*P1+(LAMBDA/2.0D+0)*P2$$

$$DD(I)=PR$$

$$H(I)=HOLD(I)+DT*PR$$

1100 CONTINUE

DO 1200 I=1,N

$$HOLD(I)=H(I)$$

1200 CONTINUE

$$T=T+DT$$

$$TCOUNT=TCOUNT+DT$$

$$J=J+1$$

IF ((T.GE.TIME(JK+1)).AND.(JK.LT.NT)) THEN

$$JK=JK+1$$

DO 1300 I=1,N

$$HOUT(I,JK)=H(I)$$

$$DHDT(I,JK)=DD(I)$$

1300 CONTINUE

$$TCOUNT=0.0D+0$$

ENDIF

IF (T.LT.TF) GOTO 1000

RETURN

END

```

SUBROUTINE COMPUTEB(H,B,L,NX,NT)
IMPLICIT NONE
INCLUDE 'dim.inc'
INTEGER I,J,NX,NT,I1,I2
REAL H(NXMAX,NTMAX),B(3,NXMAX,NTMAX),L,DX
OPEN(UNIT=17,FILE='bs.dat',STATUS='UNKNOWN')
DX=L/(NX-1)
PRINT *, 'DX,L= ',DX,L
DO 100 J=1,NT
    DO 200 I=1,NX
        I1=I-1
        I2=I+1
        IF (I1.LT.1) I1=NX
        IF (I2.GT.NX) I2=1
        B(1,I,J)=1.0
        B(2,I,J)=(H(I2,J)+H(I1,J)-2.0*H(I,J))/DX**2
        B(3,I,J)=((H(I2,J)-H(I,J))**2
        .           +(H(I2,J)-H(I,J))*(H(I,J)-H(I1,J))
        .           +(H(I,J)-H(I1,J))**2)/(3.0*DX**2)
        WRITE(17,*) J,I,B(2,I,J),B(3,I,J),H(I,J)
200    CONTINUE
100   CONTINUE
CLOSE(17)
RETURN
END

```

C Lê os dados da frente de fogo

```
SUBROUTINE READDATA(H, TIME, XX, NT, NX)
  IMPLICIT NONE
  INCLUDE 'dim.inc'
  INTEGER NT, NX, I, J
  REAL H(NXMAX, NTMAX), TIME(NTMAX), DT, XX(NXMAX)
  OPEN(UNIT=12, FILE='times.dat', STATUS='OLD')
  OPEN(UNIT=14, FILE='propagate.dat', STATUS='OLD')
  I=1
100   READ(12, *, END=300, ERR=300) TIME(I)
      DO 200 J=1, NX
          READ(14, *) XX(J), H(J, I)
200   CONTINUE
      I=I+1
      GOTO 100
300  CLOSE(14)
      CLOSE(12)
      NT=I-1
      RETURN
      END
```

C Minimização da função desvio.

```
REAL FUNCTION ERRO(H, TIME, C, NU, LAMBDA, NT, NX)
IMPLICIT NONE
INCLUDE 'dim.inc'
INTEGER NT, NX, I, J
REAL C, NU, LAMBDA, ER, DH, DT, H(NXMAX, NTMAX),
.   TIME(NTMAX), HN(NXMAX), X(NXMAX), HOLD, H2(NXMAX, NTMAX),
.   CMIN, CMAX, NUMIN, NUMAX, LMIN, LMAX, ALPHA
LOGICAL FL
COMMON /ERROR/ CMIN, CMAX, NUMIN, NUMAX, LMIN, LMAX, ALPHA
FL=(C.LT.CMIN).OR.(C.GT.CMAX).OR.(NU.LT.NUMIN).OR.
.   (NU.GT.NUMAX).OR.(LAMBDA.LT.LMIN).OR.(LAMBDA.GT.LMAX)
IF (FL.EQ..TRUE.) THEN
    ERRO=C**2+NU**2+LAMBDA**2+1.0E+3
    RETURN
ENDIF
CALL PROPAGATE(C, NU, LAMBDA, H2, ALPHA)
ER=0.0
DO 200 J=2, NT
    DO 100 I=1, NX
        ER=ER+(H(I, J)-H2(I, J))**2
100    CONTINUE
200    CONTINUE
ERRO=SQRT(ER/((NT-1)*NX))
RETURN
END
```

```
REAL FUNCTION FUNC(P)
IMPLICIT NONE
INCLUDE 'dim.inc'
INTEGER NT,NX
REAL P(3),TIME(NTMAX),H(NXMAX,NTMAX),
.      ERRO,X(NXMAX),DT,TF,DT2
EXTERNAL ERRO
COMMON TIME,X,H,NT,NX,DT,TF,DT2
FUNC=ERRO(H,TIME,P(1),P(2),P(3),NT,NX)
PRINT *,P(1),P(2),P(3),'-->',FUNC
RETURN
END
```

```
SUBROUTINE amoeba(p,y,mp,np,ndim,ftol,funk,iter)
```

```
C      Um exemplo de subrotina para minimização pode  
C      ser encontrado na Ref. [85]. Nesta tese utilizamos  
C      amoeba.f amotry.f.
```

```
END
```

C Escreve as frentes ajustadas com os parâmetros
C determinados pela minimização.

```
SUBROUTINE HFINAL(C,NU,LAMBDA,HOUT)
IMPLICIT NONE
INCLUDE 'dim.inc'
INTEGER N, I, I1, I2, J, JK, NX, NT
REAL H(NXMAX), HOLD(NXMAX), TCOUNT, P1, P2, PR, XI, T, DX
REAL C, NU, LAMBDA, X(NXMAX), TIME(NTMAX), TF, DT,
.      HIN(NXMAX,NTMAX), HOUT(NXMAX,NTMAX)
COMMON TIME, X, HIN, NT, NX, DT, TF
N=NX
DX=X(2)-X(1)

DO 900 I=1,N
      HOLD(I)=HIN(I,1)
      HOUT(I,1)=HIN(I,1)
900 CONTINUE

T=0.0D+0
TCOUNT=0.0D+0
J=1
JK=1
OPEN(UNIT=17,FILE='final.dat',STATUS='UNKNOWN')
1000 DO 1100 I=1,N
      I1=I-1
      I2=I+1

      IF (I1.LT.1) I1=N
      IF (I2.GT.N) I2=1

      P1=(HOLD(I2)+HOLD(I1)-2*HOLD(I))/DX**2
      P2=((HOLD(I2)-HOLD(I))**2+(HOLD(I2)-HOLD(I))
```

```

      *(HOLD(I)-HOLD(I1))
      +(HOLD(I)-HOLD(I1))**2)/(3.0*DX**2)
      PR=C+NU*P1+(LAMBDA/2.0D+0)*P2
      H(I)=HOLD(I)+DT*PR
1100  CONTINUE
      DO 1200 I=1,N
          HOLD(I)=H(I)
1200  CONTINUE
      T=T+DT
      TCOUNT=TCOUNT+DT
      J=J+1
      IF ((T.GE.TIME(JK+1)).AND.(JK.LT.NT)) THEN
          JK=JK+1
          OPEN(UNIT=20+JK,STATUS='UNKNOWN')
          DO 1300 I=1,N
              HOUT(I,JK)=H(I)
              WRITE(17,*) X(I),HOUT(I,JK)
              WRITE(20+JK,*) X(I),HOUT(I,JK)
1300  CONTINUE
          CLOSE(20+JK)
          TCOUNT=0.0D+0
      ENDIF
      IF (T.LT.TIME(NT)) GOTO 1000
      CLOSE(17)
      RETURN
      END

```

C Calcula o valor da intensidade do ruído

C

```
REAL FUNCTION COMPUTED(C,NU,LAMBDA)
IMPLICIT NONE
INCLUDE 'dim.inc'
INTEGER I , J , NT , NX , I1 , I2
REAL DHDT(NXMAX,NTMAX) , HIN(NXMAX,NTMAX) , TIME(NTMAX) , X(NXMAX) ,
.      TF , PR , DX , RES , C , NU , LAMBDA , DT , P1 , P2 , DT2
COMMON TIME , X , HIN , NT , NX , DT , TF , DT2
COMMON /DERIVADA/ DHDT
DX=X(2) - X(1)
RES=0.0
DO 100 I=1,NX
DO 200 J=2,NT
      I2=I+1
      I1=I-1
      IF ( I2 .GT. NX ) I2=1
      IF ( I1 .LT. 1 ) I1=NX
      P1=(HIN( I2 , J)+HIN( I1 , J)-2*HIN( I , J ))/DX**2
      P2=((HIN( I2 , J)-HIN( I , J ))**2+(HIN( I2 , J)-HIN( I , J ))
.      *(HIN( I , J)-HIN( I1 , J ))
.      +(HIN( I , J)-HIN( I1 , J ))**2)/(3.0*DX**2)
      PR=C+NU*P1+(LAMBDA/2.0D+0)*P2
      RES=RES+(DHDT( I , J)-PR)**2
200 CONTINUE
100 CONTINUE
      RES=RES/(2.0*NT*NX)
      PRINT *, 'RES= ' , RES
C      RES=DX*RES/2.0
COMPUTED=RES
RETURN
END
```

C

C Rotina de filtragem

C

```
      SUBROUTINE FILTRO(H,L,N,KMAX)
      IMPLICIT NONE
      INTEGER N, I
      REAL*8 H(10000),H2(2*N),KK,KMAX,L,K,TPI
      EXTERNAL KK
      TPI=6.2831853071795864770D+0
      DO 100 I=1,N
         H2(2*I-1)=H(I)
         H2(2*I)=0.0D+0
100    CONTINUE
      CALL FOUR1(H2,N,1)
      DO 200 I=1,N
         K=KK(I,L,N,TPI)
         IF (DABS(K).GE.KMAX) THEN
            H2(2*I-1)=0.0D+0
            H2(2*I)=0.0D+0
         ENDIF
200    CONTINUE
      CALL FOUR1(H2,N,-1)
      DO 300 I=1,N
         H(I)=H2(2*I-1)
300    CONTINUE
      RETURN
      END
```

C

```
      REAL*8 FUNCTION KK(I,L,N,TPI)
      IMPLICIT NONE
      INTEGER I,N
      REAL*8 L,TPI
      KK=0.0D+0
      IF (.NOT.I.EQ.1) GOTO 290
```

```
        KK=0.0D+0
        RETURN
290    CONTINUE
        IF (.NOT.(( I .GT. 1 ) .AND. ( I .LT. N/2+2 ))) GOTO 300
        KK=(I-1)*TPI/L
        RETURN
300    CONTINUE
        IF (.NOT. I .GT. N/2+1) GOTO 310
        KK=(I-N-1)*TPI/L
        RETURN
310    CONTINUE
        RETURN
        END
```

C

```
      IMPLICIT NONE
      INTEGER N, I
      REAL*8 L, H(10000), X(10000), KMAX
      OPEN(UNIT=12, FILE='filtragem.in', STATUS='OLD')
      READ(12, *) N
      READ(12, *) L
      READ(12, *) KMAX
      CLOSE(12)
      OPEN(UNIT=14, FILE='propagate0.dat', STATUS='OLD')
      OPEN(UNIT=16, FILE='propagate.dat', STATUS='UNKNOWN')
100    DO 200 I=1, N
           READ(14, *, END=1000, ERR=1000) X(I), H(I)
200    CONTINUE
           CALL FILTRO(H, L, N, KMAX)
           DO 300 I=1, N
                   WRITE(16, *) X(I), H(I)/N
300    CONTINUE
           GOTO 100
1000   CLOSE(14)
           CLOSE(16)
      END
```

```

SUBROUTINE FOUR1(DATA,NN, ISIGN)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION DATA(2*NN)
N=2*NN
J=1
DO 11 I=1,N,2
    IF (J.GT.I)THEN
        TEMPR=DATA(J)
        TEMPI=DATA(J+1)
        DATA(J)=DATA(I)
        DATA(J+1)=DATA(I+1)
        DATA(I)=TEMPR
        DATA(I+1)=TEMPI
    ENDIF
    M=N/2
1    IF ((M.GE.2).AND.(J.GT.M)) THEN
        J=J-M
        M=M/2
        GO TO 1
    ENDIF
    J=J+M
11   CONTINUE
MMAX=2
2    IF (N.GT.MMAX) THEN
        ISTEP=2*MMAX
        THETA=6.28318530717959D0/(ISIGN*MMAX)
        WPR=-2.D0*DSIN(0.5D0*THETA)**2
        WPI=DSIN(THETA)
        WR=1.D0
        WI=0.D0
        DO 13 M=1,MMAX,2
            DO 12 I=M,N,ISTEP
                J=I+MMAX
                TEMPR=WR*DATA(J)-WI*DATA(J+1)

```

```
        TEMPI=WR*DATA( J + 1)+WI*DATA( J )
        DATA( J )=DATA( I)-TEMPR
        DATA( J + 1)=DATA( I + 1)-TEMPI
        DATA( I )=DATA( I)+TEMPR
        DATA( I + 1)=DATA( I + 1)+TEMPI
12      CONTINUE
        WTEMP=WR
        WR=WR*WPR-WI*WPI+WR
        WI=WI*WPR+WTEMP*WPI+WI
13      CONTINUE
        MMAX=ISTEP
        GO TO 2
        ENDIF
        RETURN
        END
```

APÊNDICE D – Código fonte para gerar e propagar numericamente interfaces.

```
> frente:=proc(x,a,b,L)
> #(b/(sqrt(2*3.1415*a)))*exp(-(1/2)*((x-L/2.0)/a)^2)
> #(b*abs(sin(a*x)))
> (b*(cos(a*x))**2)
> end:
> r:=0:
> x:=0.:
> a:=0.09:
> b:=0.05:
> n:=2**10: # Numero de pontos na condição inicial
> L:=100.0: # Tamanho físico da malha
> Delta_x:=L/(n-1):
> for i from 1 to n do
> r:=r,[x,frente(x,a,b,L)]:
> x:=x+Delta_x
> od:
> r:=[r]:
> r:=r[2..nops(r)]:
> r:
> plot(r);
```

```
> writedata("/dir/condini.dat",r,float);
```

C Solução numérica da equação KPZ em linguagem Fortran

C

```
IMPLICIT NONE
INCLUDE 'dim.inc'
INTEGER N, I, SEED, ID, I1, I2, J, JK, IFSTAB
REAL H(NMAX), HOLD(NMAX), C, NU, LAMBDA, DT, DX, TF, TCOUNT,
.      TS, X(NMAX), XI, PR, TIME, D, P1, P2, MEAN(NTMAX),
.      SD(NTMAX), ALPHA
REAL RAN1, GASDEV
EXTERNAL RAN1, GASDEV
```

C Lê os parâmetros de entrada.

```
OPEN(UNIT=12, FILE='kpz.in', STATUS='OLD')
READ(12, *) C
READ(12, *) NU
READ(12, *) LAMBDA
READ(12, *) D
READ(12, *) ALPHA
READ(12, *) IFSTAB
CLOSE(12)
```

C Lê os parâmetros de integração.

```
OPEN(UNIT=14, FILE='propagate.in', STATUS='OLD')
READ(14, *) DT
READ(14, *) TS
READ(14, *) TF
READ(14, *) SEED
CLOSE(14)
PRINT *, ' '
PRINT *, 'C, NU= ', C, NU
PRINT *, 'LAMBDA, D= ', LAMBDA, D
PRINT *, 'DT, TS= ', DT, TS
PRINT *, 'TF, SEED= ', TF, SEED
PRINT *, ' '
```

C Lê a condição inicial.

```
OPEN(UNIT=16,FILE='condini.dat',STATUS='OLD')
N=1
100 READ(16,*,END=200,ERR=200) X(N),HOLD(N)
N=N+1
GOTO 100
200 N=N-1
DX=X(2)-X(1)
```

C Inicializa o gerador de número aleatório.

```
ID=-ABS(SEED)
XI=RAN1(ID)
```

C Escreve as frentes.

```
OPEN(UNIT=20,FILE='propagate.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=22,FILE='times.dat',STATUS='UNKNOWN')
DO 900 I=1,N
WRITE(20,*) X(I),HOLD(I)
900 CONTINUE
WRITE(22,*) 0.0D+0
```

C Loop

```
TIME=0.0D+0
TCOUNT=0.0D+0
J=1
JK=1
OPEN(UNIT=17,FILE='bs.dat',STATUS='UNKNOWN')
1000 DO 1100 I=1,N
I1=I-1
I2=I+1
```

C Condições de contorno periódicas.

```
IF (I1.LT.1) I1=N
IF (I2.GT.N) I2=1
```

C Discretização da equação KPZ.

```
P1=(HOLD(I2)+HOLD(I1)-2.0*HOLD(I))/DX**2
P2=((HOLD(I2)-HOLD(I))**2+(HOLD(I2)-HOLD(I)))
```

```

      *(HOLD(I)-HOLD(I1))
      +(HOLD(I)-HOLD(I1))**2)/(3.0*DX**2)
      IF (IFSTAB.EQ.1) THEN
        P2=(1.0-EXP(-ALPHA*P2))/ALPHA
      ENDIF
      PR=C+NU*P1+(LAMBDA/2.0D+0)*P2+SQRT(2.0*D/(DT*DX))*GASDEV(ID)
      H(I)=HOLD(I)+DT*PR
1100  CONTINUE
      DO 1200 I=1,N
        HOLD(I)=H(I)
1200  CONTINUE
      TIME=TIME+DT
      TCOUNT=TCOUNT+DT
      J=J+1
      IF (TCOUNT.GE.TS) THEN
        PRINT *, 'Time= ', TIME
        JK=JK+1
        DO 1300 I=1,N
          WRITE(20,*) X(I),H(I)
1300  CONTINUE
          WRITE(22,*) TIME
          TCOUNT=0.0D+0
        ENDIF
      IF (TIME.LT.TF) GOTO 1000
      CLOSE(20)
      CLOSE(22)
      END

```

```

FUNCTION ran1(idum)
INTEGER idum, IA, IM, IQ, IR, NTAB, NDIV
REAL ran1, AM, EPS, RNMX
PARAMETER (IA=16807, IM=2147483647, AM=1./IM, IQ=127773, IR=2836,
*NTAB=32, NDIV=1+(IM-1)/NTAB, EPS=1.2e-7, RNMX=1.-EPS)
INTEGER j, k, iv(NTAB), iy
SAVE iv, iy
DATA iv /NTAB*0/, iy /0/
if (idum.le.0. or .iy.eq.0) then
  idum=max(-idum, 1)
  do 11 j=NTAB+8, 1, -1
    k=idum/IQ
    idum=IA*(idum-k*IQ)-IR*k
    if (idum.lt.0) idum=idum+IM
    if (j.le.NTAB) iv(j)=idum
11  continue
  iy=iv(1)
endif
k=idum/IQ
idum=IA*(idum-k*IQ)-IR*k
if (idum.lt.0) idum=idum+IM
j=1+iy/NDIV
iy=iv(j)
iv(j)=idum
ran1=min(AM*iy, RNMX)
return
END

```

```

FUNCTION gasdev(idum)
INTEGER idum
REAL gasdev
INTEGER iset
REAL fac , gset , rsq , v1 , v2 , ran1
SAVE iset , gset
DATA iset /0/
  if ( iset .eq. 0 ) then
1    v1=2.*ran1(idum)-1.
    v2=2.*ran1(idum)-1.
    rsq=v1**2+v2**2
    if (rsq .ge. 1. .or. rsq .eq. 0.) goto 1
    fac=sqrt(-2.*log(rsq)/rsq)
    gset=v1*fac
    gasdev=v2*fac
    iset=1
  else
    gasdev=gset
    iset=0
  endif
  return
END

```

APÊNDICE E – Algoritmo para identificar a posição das frentes de fogo geradas pelo FDS.

```
> restart;
> with(StringTools):
> diretorio:="/dir/";
> entrada:="chid.fds";
> saida:="celulas.dat";
> # mm -> numero de arquivos de saida.
> mm:=79;
> a1:=readdata(cat(diretorio,entrada),string,100):
> nops(a1);
> nn:=1:
> while a1[nn]<>["DEVICES"] and nn<nops(a1) do nn:=nn+1 od:
> nn:=nn+1;
> rr:=0:
> for i from nn to nops(a1)-1 do
> b1:=substring(a1[i][2],5..length(a1[i][2])-1):
> b2:=substring(a1[i][3],1..length(a1[i][3])-1):
> b3:=substring(a1[i][4],1..length(a1[i][4])-1):
> rr:=rr,[b1,b2,b3]:
> od:
> rr:=[rr]:
> rr:=rr[2..nops(rr)]:
```

```
> nops(rr);
> rr[41][1];
> ny:=2:
> pr:=rr[1][1]:
> while rr[ny+1][1]=pr and ny<=nops(rr) do
> ny:=ny+1
> od:
> ny;
> nx:=nops(rr)/ny;

> writedata(cat(diretorio,saida),rr,string);
> bb:=array(1..mm):
> # Nome do arquivo de saida.
> for i from 1 to mm do
> sim:=cat("chid_",i,"_devc.csv"):
> bb[i]:=readdata(cat(diretorio,sim),string,100000)
> od:
> nops(bb[6]);
> #bb[1][3];
> ss:=0:
> for i from 3 to nops(bb[1]) do
> b1:=op(bb[1][i]):
> for j from 2 to mm do
> b1:=b1," \n ",op(2..nops(bb[j][i]),bb[j][i])
> od:
> ss:=ss,[b1]
> od:
> ss:=[ss]:
> ss:=ss[2..nops(ss)]:
```

```
> nops(ss);

> nops(ss[1]);
> replace_coma:=proc(a)
> local n,r:
> r:=FirstFromLeft(";",a):
> if r=0 then r:=FirstFromLeft(", ",a) fi:
> if r=0 then RETURN(a) fi:
> r:=cat(SubString(a,1..r-1)," \n ",SubString(a,r+1..Length(a))):
> replace_coma(r):
> end:

> ss2:=0:
> for i from 1 to nops(ss) do
> pr:=map(x->replace_coma(x),ss[i]):
> pr2:=pr[1]:
> #print(1111,1,pr2):
> for j from 2 to nops(pr) do
> pr2:=cat(pr2," ",pr[j])
> od:
> ss2:=ss2,pr2
> od:
> ss2:=[ss2]:
> ss2:=ss2[2..nops(ss2)]:
> # Numero de tempos -> NT
> nops(ss2);

> writedata(cat(diretorio,"simulacao.dat"),ss2,string);
```