



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**ESTUDIO DE INTERFASES ENTRE
FASES UNIFORMES Y HEXAGONALES
EN BIFURCACIONES SUBCRÍTICAS**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

F Í S I C O

P R E S E N T A :

OCTAVIO MONDRAGÓN PALOMINO



**DIRECTOR DE TESIS:
DR. DENIS BOYER**

2004



**FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR**



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

ACT. MAURICIO AGUILAR GONZÁLEZ
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:

"Estudio de interfases entre fases uniformes y hexagonales en bifurcaciones subcríticas"

realizado por Mondragón Palomino Octavio

con número de cuenta 9850433-0 , quien cubrió los créditos de la carrera de: Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
Propietario

Propietario Dr. Denis Boyer

Propietario Dr. Faustino Sánchez Garduño

Propietario Dr. Pablo Padilla Longoria

Suplente Dra. Catalina Elizabeth Stern Forgach

Suplente Dr. Octavio Miramontes Vidal

D. Boyer
Pablo Padilla L
Catalina Stern
O. MURRAY

Consejo Departamental de Física

Patricia Goldstein Menache
DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE
Coordinadora de Licenciatura

FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la
UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el
contenido de mi trabajo recepcional.

NOMBRE: Octavio Mendragón Salomino

FECHA: 24 de Mayo 2004

FIRMA: M. Salomino

A quienes quiero tanto, Marta, Eduardo y Marianita.

Chacun est l'ombre de tous.

Paul Éluard

He tenido mucha suerte. Ser estudiante de Denis Boyer ha sido una afortunada coincidencia. *Denis, gracias por el esmero y paciencia que pusiste en ser mi profesor y por todo el apoyo que me haz dado.*

Siguiendo con los profesores y las felices coincidencias, quiero mencionar a Víctor Romero y a Jorge Ize. Sus cursos son los que más disfruté y más me han motivado. No conozco un profesor tan entusiasta y feliz de enseñar que Víctor Romero. De Jorge sólo necesito decir que ha sido, por mucho, mi mejor profesor de matemáticas.

Por otra casualidad, como muchas otras personas, acabé ensandwichado entre dos generaciones. Los cuates y amigos de los primeros tiempos: Elías, Saúl, y Sac, a quienes recuerdo con mucho aprecio, no se olviden que todavía debemos un osciloscopio. Los amigos del segundo acto: Ramón, Damián (¡gracias por aguantar estoicamente mis entusiasmos experimentales!), Mané, Emiliano, Natalia, Ferrán, Amanda, Vero, Edahí, Víctor, Ro, Ayari, etc..., a todos les debo conocimiento y amistad.

Gracias a la Universidad que es diversidad, encontré a otros que me han ayudado a ver hacia direcciones distintas. Los babélicos: Waldo (¡ya son más de 10 años!), Natalia, César y Enrique. Los isleños deliberacionistas: Anabel, Lichis, Jano, Miguelo, Álvaro y Camila, todos amigos.

Para ti, Poli, todos estos meses juntos, deseando que sólo sean los primeros seis.

Estudio de interfases entre fases uniformes y hexagonales en bifurcaciones subcríticas

Octavio Mondragón Palomino
Asesor: Dr. Denis Boyer

Mayo de 2004

Resumen

Este estudio se concentra en la región de biestabilidad del modelo de Swift-Hohenberg para la convección de Rayleigh-Bénard (CRB). Analizamos la dinámica de las fronteras planas entre regiones hexagonales y uniformes, y exploramos brevemente las consecuencias de esta dinámica sobre la existencia de configuraciones espacialmente desordenadas. A partir de un análisis débilmente no lineal, incluyendo efectos no adiabáticos, encontramos que el movimiento de las interfases es bloqueado por la interacción entre la escala de variación de la frontera y la longitud de onda del patrón hexagonal. Las configuraciones desordenadas estacionarias son predominantes únicamente en el régimen no lineal. Estos resultados pueden ser extendidos a otros sistemas (químicos, eléctricos, ópticos y ecológicos) con diagramas de estabilidad similares al de la CRB cerca del umbral de la convección.

Índice general

1. Introducción	3
2. Formación de patrones y la dinámica de fronteras	10
2.1. Convección de Rayleigh-Bénard en sistemas espacialmente extendidos	10
2.1.1. Descripción general	10
2.1.2. Fenomenología de la formación de patrones	13
2.1.3. La necesidad de ser no lineal	16
2.2. Otros ejemplos de formación de patrones	17
2.3. Formalismo de las ecuaciones de amplitud	18
2.3.1. Análisis de multiescalas	19
2.3.2. Deducción de las ecuaciones de amplitud	21
2.3.3. La estabilidad de los patrones y el diagrama de bifurcación . .	24
2.3.4. Ecuaciones de amplitud para la fase hexagonal	25
2.4. Dinámica de fronteras	28
2.4.1. Interfaz plana que separa a dos regiones de bandas	29
2.4.2. Frontera entre un patrón hexagonal y una región uniforme (o de conducción) en la zona de biestabilidad	34
3. Efectos de bloqueo de fronteras	38
3.1. Cálculo de los términos no adiabáticos	39
3.2. Velocidad con contribución no adiabática	42
3.3. Comentarios sobre el resultado	45
4. Resultados numéricos	48
4.1. Cálculo numérico de la magnitud p del potencial de bloqueo	49
4.1.1. Solución de las ecuaciones de amplitud de primer orden	49
4.1.2. Calculando p	50
4.1.3. Regímenes dinámicos	52
4.1.4. Validez de los resultados	52
4.1.5. Resultados numéricos para dos dimensiones	55
4.2. La dinámica de las fronteras y la estabilidad de los estados desordenados	58

5. Conclusiones	63
A. Estimación de la magnitud p del potencial de bloqueo	65
B. Programa “perfil”	67
C. Programa “potencial”	71
Bibliografía	74

Capítulo 1

Introducción

Existen diseños geométricos que aparecen recurrentemente en muchos sistemas físicos, químicos y biológicos [1]. Estos patrones se caracterizan por estructuras espacio-temporales, y suelen formarse de manera espontánea en muchos sistemas fuera del equilibrio, o en sistemas en equilibrio donde compiten interacciones atractivas de corto alcance y repulsivos de largo alcance [2]. Los patrones que nos interesan aquí son los que forman estructuras periódicas en sistemas bidimensionales espacialmente extendidos (las dimensiones horizontales son mayores que las verticales), como los que se muestran en la figura 1.1. Las fotos *a*) a *c*) corresponden a patrones experimentales de simetría uno (patrones de bandas), provenientes de: *a*) una reacción química [1], *b*) un sistema óptico no lineal [3] y *c*) la convección térmica de Rayleigh-Bénard [1]. De *d*) a *f*) son patrones con simetría tres o hexagonales, en los mismos sistemas. Las zonas claras y oscuras en las fotos corresponden a la modulación espacial (o espacio-temporal) de una variable física local (la concentración, la intensidad luminosa, la temperatura). En estos sistemas es posible pasar de una simetría a otra si se cambia un parámetro externo a través de un punto de bifurcación.

Las geometrías comunes a muchos sistemas, pueden ser el resultado de mecanismos microscópicos de naturaleza muy distinta. Mientras que las fuerzas que dan forma a los patrones de convección son la gravedad, la fricción viscosa y la difusión del calor, en los sistemas químicos son importantes las constantes cinéticas de las reacciones, las constantes de difusión de los reactivos y la temperatura del medio. Es decir que las estructuras espacio-temporales son más genéricas que sus procesos de formación. Los patrones mencionados arriba son los más sencillos que se pueden encontrar, pero estas no son las únicas simetrías posibles. Por ejemplo, existen patrones con simetría cuadrada y patrones con simetría cuasicristalina como los de la figura 1.2, que corresponden a ondas de Faraday [4]. Ejemplos más llamativos por su apariencia, con similares características geométricas, se encuentran en la naturaleza en las pieles de los mamíferos, reptiles, peces, conchas de los caracoles marinos [1], colonias de bacterias [5], etc. Otros ejemplos se encuentran en la ecología, con la formación de estructuras vegetales en zonas semiáridas [6, 7].

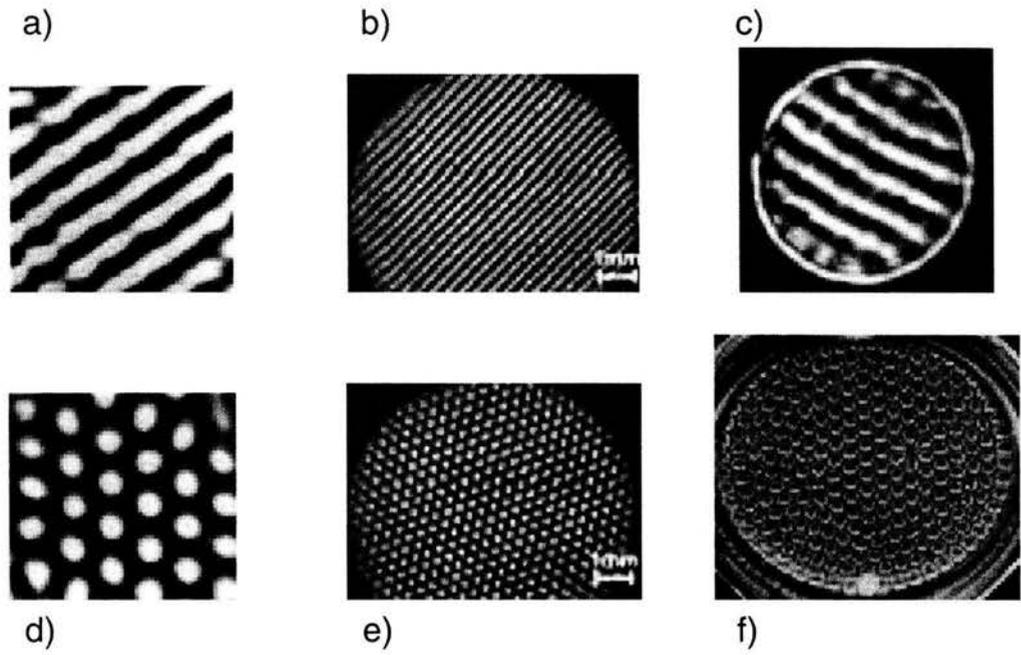


Figura 1.1: Patrones de bandas y hexagonales en una reacción química (a y d) [1], en óptica (b y e) [3] y en convección térmica (c y f) [1].

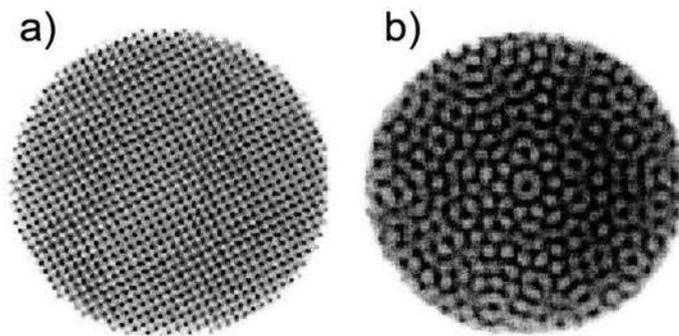


Figura 1.2: a) Patrón cuadrado en el experimento de Faraday. b) Patrón cuasicristalino en el mismo experimento [4].

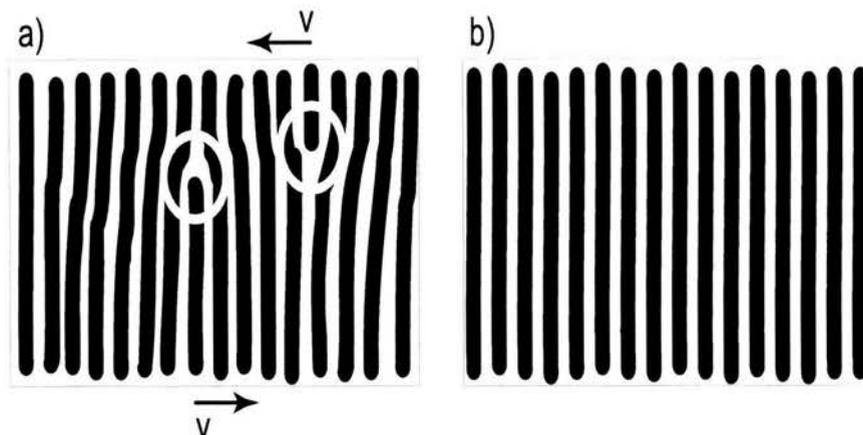


Figura 1.3: a) Las dislocaciones de orientación opuesta pueden “atraerse” y aniquilarse, dando paso a una estructura más ordenada como en b).

Una propiedad notable de los patrones periódicos es que se forman rompiendo simetrías de rotación y traslación de un sistema uniforme inicial. Estableciéndose en las configuraciones más simples un orden traslacional y de orientación de largo alcance en el sistema. Sin embargo este orden periódico puede ser roto por los llamados defectos topológicos. En la figura 1.1 todos los sistemas tienen estructura periódica. A pesar de esto, la aparición de defectos o imperfecciones es casi inevitable durante la formación de los patrones. Una situación análoga se encuentra en los sólidos cristalinos [8]. Un defecto topológico se puede ver como la estructura espacial que conecta dos estados estables diferentes del sistema [9].

Los defectos son genéricos, es decir que así como se pueden distinguir geometrías comunes a varios sistemas, también se pueden aislar los defectos “ladrillo” en los que se pueden descomponer todas las imperfecciones sin importar el detalle de la estructura en la que viven [10]. Una clasificación útil de los defectos topológicos se hace de acuerdo a las simetrías que rompen.

Las dislocaciones son los defectos más estudiados. En el caso de un patrón de bandas, las dislocaciones aparecen donde una banda adicional termina como en la imagen de la figura 1.3 a) [11]. La presencia de dislocaciones en densidad finita y distribuidas al azar es suficiente para romper el orden de traslación de un sistema libre de defectos (véase figura 1.3 b)). Las configuraciones defectuosas pueden tener un tiempo de vida muy prolongado (metaestables).

Otro ejemplo de defecto es una frontera de grano, que es la región donde dos patrones con orientaciones o geometrías distintas se encuentran. Su nombre le es dado en analogía con la física de cristales. La frontera de grano es un defecto topológico asociado con la simetría de rotación de los patrones, o el rompimiento del orden

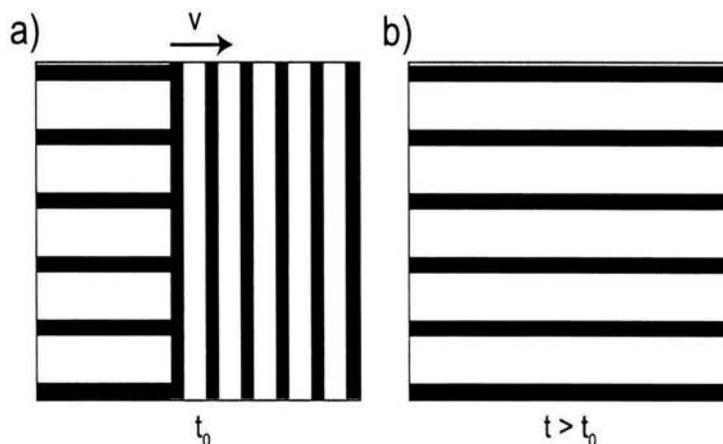


Figura 1.4: El movimiento de la interfaz puede “favorecer” a un patrón y homogeneiza al sistema. Sin embargo, para valores precisos de los parámetros, la frontera puede ser estática, conservándose el estado mezclado que se esquematiza en la figura a).

orientacional del patrón perfecto. En la figura 1.4 mostramos un ejemplo de este defecto entre dos patrones de bandas ortogonales entre sí.

Los defectos en general no son estáticos. Por ejemplo, en sistemas extendidos que evolucionan hacia el equilibrio, se ha observado que tienden a desaparecer. La evolución temporal de los sistemas espacialmente extendidos que rompen simetrías, como los que forman patrones espaciales, depende en gran parte de sus defectos topológicos [12]. Esto sucede a través de mecanismos más o menos bien conocidos; las dislocaciones como las de la figura 1.3 a), se acercan hasta que se compensan mutuamente (se aniquilan) y se obtiene el patrón ideal de la imagen b). El movimiento de las fronteras de grano en los patrones de convección ha sido estudiado sistemáticamente cerca del régimen en el que se establece la convección [13, 14]. Por ejemplo, en los trabajos de Manneville y Pomeau [13] y Malomed *et. al.* [14] se han estudiado las leyes de movimiento de las interfases entre regiones de bandas con orientaciones distintas.

En particular, estos mecanismos explican que las configuraciones ricas en defectos puedan evolucionar a configuraciones más sencillas. Se puede decir que la disminución de la densidad de defectos causa un aumento en el orden del sistema, pues éste se vuelve espacialmente más homogéneo. En la figura 1.4, una frontera se mueve y el dominio de bandas con mayor longitud de onda termina por ocupar todo el espacio. Sin embargo, los defectos no siempre evolucionan, haciendo que configuraciones complicadas, o con poco orden, subsistan en el tiempo en estados metaestables.

Un caso importante son los sistemas en los que pueden coexistir dos (o más) estados de simetrías distintas, pues pueden llevar fácilmente a estados desordenados.

Configuraciones heterogéneas se han observado experimentalmente en la convección de Rayleigh-Bénard [15, 16], en materiales granulados excitados por medio de vibraciones [17], en sistemas de descargas eléctricas en gases [18] y en sistemas ópticos no lineales [3]. Estas configuraciones se caracterizan por regiones o “islas”, donde un patrón dado (A) prevalece, rodeadas de regiones compuestas de otro patrón (B). Entonces, los defectos relevantes para el estudio de estos sistemas son las interfases A-B.

En los ejemplos mencionados arriba, los diagramas de bifurcación, que nos indican la estabilidad de los patrones como función de un parámetro de control, son similares. En la figura 1.5 mostramos unos diagramas de bifurcación experimentales: aumentando lentamente el valor del parámetro de control (en cada caso ϵ , U_b ó y), a partir de un estado uniforme trivial, sin patrón, se llega a una bifurcación en la que espontáneamente aparece un patrón hexagonal estable. En los tres casos se observa un régimen de coexistencia, o biestabilidad, de los hexágonos y del estado uniforme, en cierto intervalo del parámetro de control.

Las ecuaciones diferenciales parciales que describen un sistema en el que aparecen patrones hexagonales, se caracterizan por tener una forma variacional, es decir que las “ecuaciones de movimiento” del sistema provienen de un funcional F , que tiene un papel análogo al de una energía libre. En el régimen de biestabilidad, cada uno de los dos estados estables corresponde a un mínimo local de la energía libre F . Se puede saber cuál de los dos estados es el más “favorable” comparando el valor de F correspondiente: el mínimo local con el valor más bajo de F corresponde al estado absolutamente estable y el otro a un estado “metaestable”. Sin embargo, estos valores mínimos de la energía no son suficientes para una descripción dinámica. Una manera de conocer el destino de los dos estados en el tiempo, es observar su comportamiento cuando coexisten espacialmente.

En este sentido, estudiar la dinámica de las fronteras tiene importancia. Dependiendo de si las interfases se mueven o no, los sistemas bidimensionales se ordenarán rápidamente en estados homogéneos o se quedarán en estados complejos, heterogéneos y desordenados.

El propósito de este trabajo es estudiar la dinámica de una frontera plana que separa una región de hexágonos de una región uniforme sin patrón, en el régimen de biestabilidad. El contexto inicial es la convección de Rayleigh-Bénard, pero nuestros resultados son generalizables a otros sistemas que detallaremos más tarde.

Este reporte está organizado en tres partes; en el Capítulo 2, después de definir el contexto físico de la convección de Rayleigh-Bénard y el origen de los modelos fenomenológicos (de Swift-Hohenberg) que describen la formación de patrones periódicos, hacemos una introducción al formalismo de ecuaciones de amplitud que emplearemos más adelante para describir la evolución espacio-temporal de los patrones. Luego, a través de un ejemplo sencillo, presentamos el método de la energía con el que se calcula la ley de movimiento [14] de una interfaz que divide al patrón hexagonal del estado uniforme conductivo, el primer orden en teoría de perturbación. En el Capítulo 3

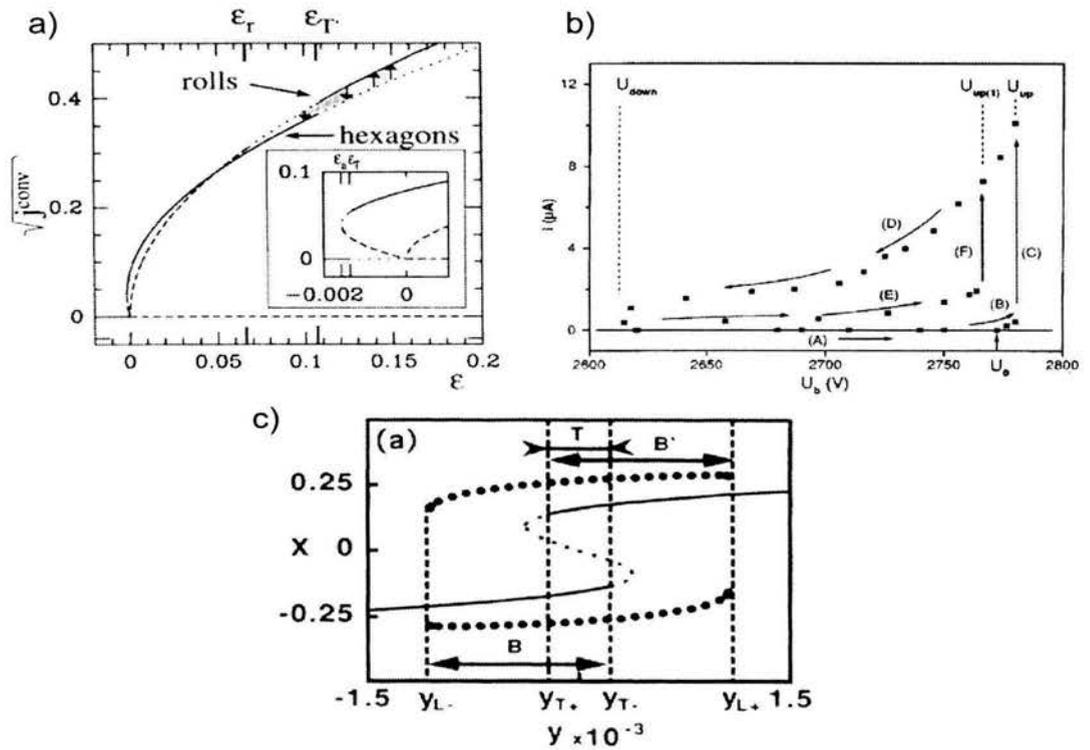


Figura 1.5: Diagramas de bifurcación experimentales para: a) Convección de Rayleigh-Bénard [15]. En el recuadro, la bifurcación subcrítica a los hexágonos ocurre en ϵ_a y la desestabilización del estado conductivo en $\epsilon = 0$. b) Descargas eléctricas en un gas [18]. Por encima del voltaje crítico U_{up} aparece el patrón hexagonal de filamentos de corriente en un fondo dieléctrico. Si se reduce el valor del voltaje de control U_{up} , disminuye la cantidad de filamentos hasta regresar al estado dieléctrico inicial. c) Sistema óptico [19]. El trazo continuo y el discontinuo corresponden, respectivamente, a las soluciones estables e inestables del estado homogéneo. Los círculos indican el máximo y el mínimo de los patrones hexagonales. En el intervalo $[y_{T+}, y_{T-}]$ los patrones hexagonales y el estado homogéneo coexisten.

presentamos nuestros resultados originales, que incorporan las llamadas correcciones no adiabáticas al formalismo estándar de las ecuaciones de amplitud. Demostramos que únicamente en el régimen no lineal y gracias a la interacción entre las dos escalas de variación naturales del sistema, la interfaz hexagonal-uniforme puede ser estática. Este mecanismo puede explicar la estabilidad de configuraciones desordenadas observadas en muchos sistemas, tanto en experimentos como en simulaciones numéricas. En el Capítulo 4, confrontamos estos resultados con lo que se obtiene de la resolución numérica directa de la ecuación de Swift-Hohenberg. También ilustramos las consecuencias que tiene la dinámica de las interfases para la formación de estados desordenados.

Capítulo 2

Formación de patrones y la dinámica de fronteras

2.1. Convección de Rayleigh-Bénard en sistemas espacialmente extendidos

2.1.1. Descripción general

Se conoce como convección de Rayleigh-Bénard al flujo convectivo que sucede bajo las circunstancias ilustradas en la figura 2.1.1; una capa horizontal de fluido es calentada por debajo y enfriada por arriba, de manera que las superficies superior e inferior se mantengan a temperatura constante T_2 y T_1 respectivamente, con $T_1 > T_2$. La inhomogeneidad en la temperatura provoca un flujo de calor, es decir que el sistema está fuera del equilibrio termodinámico. El sistema se extiende *ad infinitum* en las dimensiones horizontales y tiene un ancho d . Consideramos que el sistema se encuentra en la *aproximación de Boussinesq*: el calentamiento es moderado, la ecuación de estado del fluido es $\rho = \rho_{ref}(1 - \alpha(T - T_{ref}))$, donde T_{ref} es una temperatura de referencia, ρ_{ref} la densidad a esa temperatura y α el coeficiente de expansión térmica. En las ecuaciones de Navier-Stokes el fluido es aproximado como incompresible, salvo en el término de flotabilidad. Las propiedades físicas del fluido son constantes en toda su extensión.

Cuando la diferencia de temperatura es pequeña, se observa un régimen de conducción (difusión del calor por la Ley de Fourier). El régimen también es llamado uniforme porque el campo de velocidad es nulo y el campo de temperatura no depende de las coordenadas xy y sólo depende de z ($T = T(z)$). El estado del sistema tiene las mismas simetrías que las condiciones de frontera. En esta sección nos ocupamos de mostrar el origen físico de la inestabilidad primaria que lleva del estado conductivo, al convectivo y presentamos una explicación cualitativa de los parámetros que la determinan.

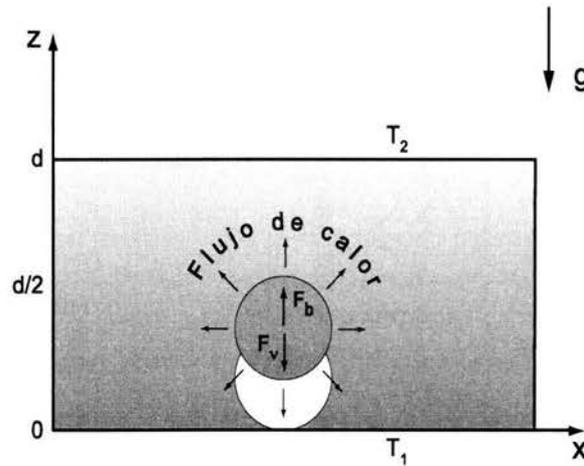


Figura 2.1: Una burbuja de fluido caliente desplazada infinitesimalmente de su posición inicial, sube impulsada por la fuerza diferencial de flotación, \vec{f}_b . Este movimiento es contrarrestado por el intercambio de calor y la fricción viscosa con el fluido circundante más frío.

La estabilidad del régimen conductivo depende del balance de tres factores. El primero es un factor desestabilizante debido a la fuerza de gravedad y se ocupa de inducir el movimiento. La diferencia $\Delta T = T_1 - T_2$ se traduce en una diferencia de la densidad, por lo que una burbuja de fluido en el fondo del recipiente es más ligera que una en la parte superior. Si una burbuja del fondo caliente es desplazada una distancia δx hacia un entorno más frío, sobre ella actúa una fuerza diferencial de flotación por unidad de volumen, \vec{f}_b , que la sube a una región más fría, donde de nuevo se ejerce una fuerza ascendente y así sucesivamente. Esta fuerza se puede cuantificar por el tiempo característico τ_B que una burbuja de líquido caliente (frío) tarda en subir (hundirse) una distancia d :

$$f_b = g\rho\alpha\Delta T = \rho a = \rho \frac{d}{\tau_B^2}, \quad (2.1)$$

donde g es la aceleración de la gravedad, ρ es la densidad promedio, α es el coeficiente de expansión térmica y a es la aceleración de la partícula de fluido.

Hay dos mecanismos estabilizantes que impiden el ascenso de la burbuja. El movimiento desde el fondo es amortiguado por la fricción viscosa, \vec{f}_v , con el fluido circundante y por el enfriamiento de la burbuja (difusión del calor) a medida que sube. Ambos procesos disipativos obedecen leyes de la forma

$$\frac{\partial}{\partial t}(\dots) \propto \nabla^2(\dots). \quad (2.2)$$

Los coeficientes de proporcionalidad son la viscosidad cinemática $\nu = \frac{\eta}{\rho}$, donde η es la viscosidad dinámica, y la difusividad del calor $\kappa = \frac{\chi}{C}$, donde χ es la conductividad térmica y C es la capacidad calorífica por unidad de volumen. Estos dos coeficientes tienen dimensiones de aceleración, de manera que se pueden definir los tiempos τ_ν de disipación y τ_κ de difusión de la burbuja:

$$\nu = \frac{d^2}{\tau_\nu} \quad (2.3)$$

$$\kappa = \frac{d^2}{\tau_\kappa} . \quad (2.4)$$

Cualitativamente, se puede esperar que el régimen de convección se establezca cuando la fuerza de gravedad, \vec{f}_b , supere a los efectos retardantes de la fricción viscosa y el enfriamiento térmico. Por lo que, en términos de los tiempos definidos arriba, una condición cualitativa para la convección es

$$\left(\frac{\tau_\nu}{\tau_B}\right)\left(\frac{\tau_\kappa}{\tau_B}\right) > 1 . \quad (2.5)$$

Cuando $(\tau_\nu/\tau_B)(\tau_\kappa/\tau_B) \ll 1$, la fuerza desestabilizante, \vec{f}_b , es insuficiente para hacer que la burbuja caliente (fría) suba (baje) suficientemente rápido, dando tiempo a que los procesos difusivos contrarresten las perturbaciones del estado uniforme, haciendo que el fluido se mantenga en calma. En cambio, si $(\tau_\nu/\tau_B)(\tau_\kappa/\tau_B) \gg 1$, sea $\tau_B \ll \tau_\nu\tau_\kappa$, la flotabilidad es suficientemente grande para causar una convección que puede llegar a ser turbulenta.

El producto que aparece del lado izquierdo de (2.5) se conoce como el *número de Rayleigh* R . Sustituyendo (2.3), (2.4) y (2.1) en (2.5), R se escribe como

$$R = \frac{g\alpha\Delta T d^3}{\nu\kappa} . \quad (2.6)$$

A R se le llama frecuentemente el parámetro de control pues contiene a ΔT , que es la variable física que determina cuan alejado está el sistema del equilibrio termodinámico. El valor de R por arriba del que se establece la convección, es conocido como el *valor crítico*, R_c , en el que ocurre una bifurcación. El número de Rayleigh reducido, ϵ , es la distancia adimensional por encima de R_c y nos indica que tan lejos se encuentra el sistema del estado conductivo:

$$\epsilon = \frac{R}{R_c} - 1 . \quad (2.7)$$

Cuando $R \geq R_c$ ($\epsilon > 0$), el establecimiento de la convección rompe la homogeneidad del estado básico de conducción. Como todo el fluido frío no puede descender simultáneamente, este empezará a moverse hacia arriba y hacia abajo en un patrón que, en general, tiene una estructura espacial. El ordenamiento más sencillo de un

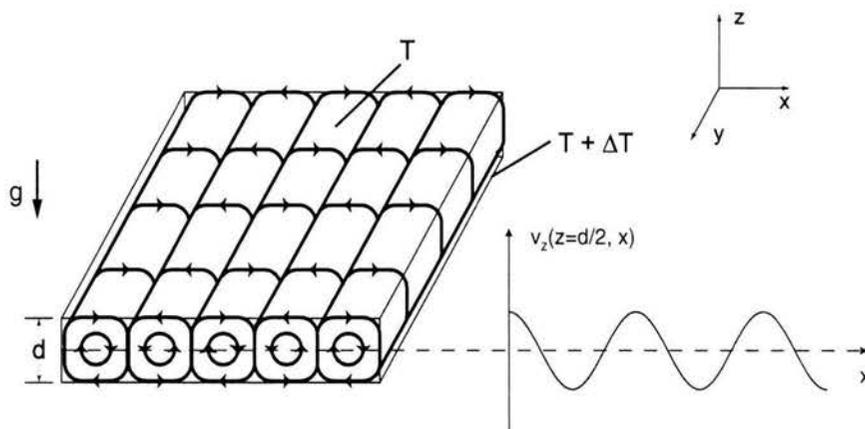


Figura 2.2: Esquema del patrón de bandas más sencillo que se obtiene por encima del umbral de la convección. Las flechas indican el sentido del flujo convectivo. La gráfica de la derecha muestra el patrón de bandas que se obtiene cuando se mide la velocidad del fluido medido en el plano medio $z = d/2$.

estado convectivo consiste de rollos paralelos, como los que se esquematizan en la figura 2.2. Esto se observa para distancias $0 < \epsilon \ll 1$. Al alejarse del punto de la bifurcación, es decir al incrementar ϵ , bifurcaciones secundarias pueden ocurrir, llevando al sistema hasta un régimen caótico. Por lo tanto, nosotros nos limitamos a estados primarios, que son esencialmente periódicos.

El número de Prandtl Pr es otro parámetro adimensional de control necesario para describir la formación de patrones convectivos y se define como

$$Pr = \frac{\nu}{\kappa}. \quad (2.8)$$

De manera análoga al número de Rayleigh, Pr puede ser visto como la razón del tiempo de difusión τ_κ y el tiempo de relajación viscosa τ_ν , por lo que determina la fuerza relativa de los dos mecanismos de disipación.

2.1.2. Fenomenología de la formación de patrones

Hay varios caminos para encontrar soluciones aproximadas de las ecuaciones de la hidrodinámica del problema de convección. El primero es la linealización, que permite buscar una solución en forma de modos normales, pero en la que cualquier fenómeno proveniente de la no linealidad queda eliminado. El segundo es resolverlas directamente con un método numérico, en ésta se resuelven las ecuaciones de manera aproximada pero en toda su complejidad. En este caso la renuncia a cualquier conocimiento analítico de las soluciones está implícita. Una alternativa que usaremos a

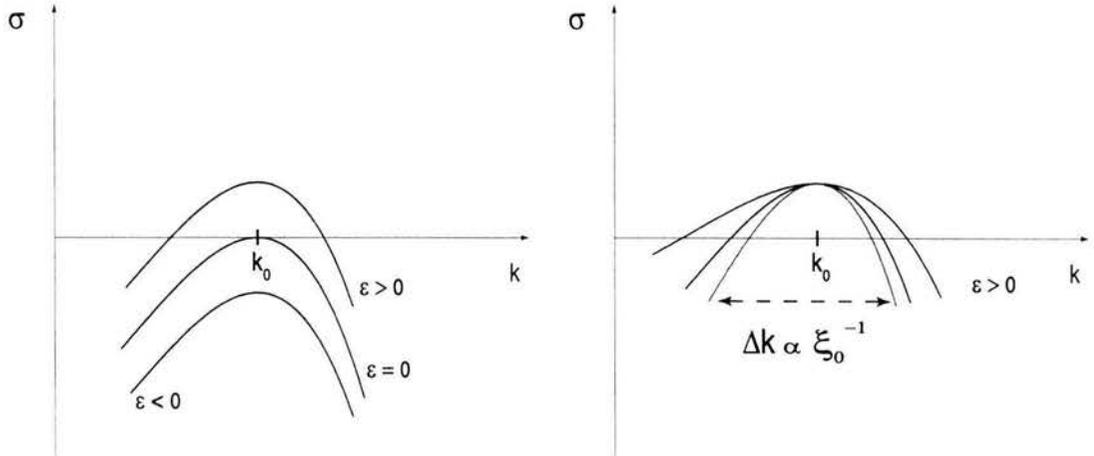


Figura 2.3: Tasa de crecimiento σ en función del número de onda para varios ϵ . El ancho Δk de la ventana de números de onda es proporcional al inverso de la longitud de coherencia ξ_0 .

continuación, es trabajar con modelos reducidos (ecuaciones diferenciales parciales) que, aunque menos complejas que las ecuaciones de movimiento del fluido, integran algunas características no lineales del problema y sus soluciones pueden dar una imagen realista del comportamiento del sistema.

La primera característica que debe de estar contenida en el modelo, es la inestabilidad lineal que destruye al estado conductivo. Para las ecuaciones linealizadas de movimiento del fluido, podemos buscar soluciones con forma de modo de Fourier

$$\psi(x, t) = \psi_0 e^{\sigma t + ikx} + c.c. , \quad (2.9)$$

donde $\psi(x, t)$ es una función real llamada *parámetro de orden local*, que representa la componente vertical de la velocidad del fluido medida en el plano medio $z = d/2$ (véase figura 2.2). c.c. denota el complejo conjugado, la tasa de crecimiento σ es un número real en el presente caso y k es el vector de onda del modo. En el estado conductivo ($\epsilon < 0$) $\psi = 0$. Sustituyendo (2.9) en las ecuaciones linealizadas, se encuentra una relación de dispersión $\sigma(k)$. La dependencia de σ respecto de k se muestra en la gráfica de la figura 2.3, para tres valores del número de Rayleigh reducido ϵ , cerca del punto de bifurcación.

Según estas curvas, el estado básico homogéneo es estable si no hay un k tal que $\sigma > 0$, este es el caso cuando $\epsilon < 0$. Si el parámetro de control es mayor a cero, aparece un pequeño intervalo de números de onda al rededor de k_0 que corresponde a modos crecientes. Después de un tiempo suficientemente largo estos modos dominan sobre el estado homogéneo, apareciendo un patrón con número de onda al rededor de k_0 .

La parte lineal del modelo se puede construir partiendo de la relación de dispersión de la figura 2.3 y de las características físicas del sistema. La forma más sencilla de aproximar σ es como una parábola invertida. El desarrollo de $\sigma(\epsilon, k)$ en serie de Taylor cerca de $\epsilon = 0$ y $k = k_0$ es

$$\sigma(\epsilon, k) = \left(\frac{\partial\sigma}{\partial\epsilon}\right)\epsilon + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\sigma}{\partial k^2}\right)(k - k_0)^2 + \dots \quad (2.10)$$

Esta forma garantiza que el patrón que emerja tendrá un número de onda $k = k_0$ finito, característica que es común a muchos sistemas físicos donde se forman patrones. Con un signo negativo delante del segundo término del lado derecho, la ecuación (2.10) reproduce también la relación de dispersión más simple; si $\partial\sigma/\partial\epsilon > 0$ y si el parámetro de control se encuentra por debajo un cierto valor crítico, entonces $\sigma < 0$ para todo k . Cuando el valor de ϵ está por encima de ese valor crítico, entonces $\sigma > 0$ para números de onda $k \sim k_0$.

La capa de fluido se extiende infinitamente, es decir que no tiene fronteras en el plano horizontal, como consecuencia el vector de onda del modo creciente no adopta una dirección particular. Por lo tanto $\sigma = \sigma(|\vec{k}|)$. Aún más, de (2.10) necesitamos como mínimo que σ sea dos veces diferenciable respecto de k , es decir $\sigma = \sigma(k^2)$.

Bajo las condiciones impuestas anteriormente, la relación de dispersión más sencilla toma la forma

$$\sigma = \epsilon - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2}(k^2 - k_0^2)^2 \quad (2.11)$$

Donde la constante $\xi_0^2/4k_0^2$ adquiere su forma por posterior conveniencia.

En un análisis lineal de perturbaciones, supondríamos que la solución a nuestras ecuaciones se escribe como $\psi = \psi_b + \delta\psi$, donde ψ_b es la solución de base (el estado conductivo $\psi_b = 0$) cuya estabilidad queremos analizar y $\delta\psi$ es una perturbación, la cuál tiene la forma

$$\delta\psi(x, t) = \delta\psi_0 e^{\sigma t} \cos(kx) \quad (2.12)$$

pues debe de ser solución de las ecuaciones linealizadas y, en caso de ser un modo inestable, cuando $t \rightarrow \infty$ el patrón de bandas que aparezca debe de tener el perfil de $\cos(kx)$.

A partir de (2.11) y (2.12) la parte lineal de nuestra ecuación modelo, en dos dimensiones espaciales, para la función parámetro de orden local $\psi(x, y, t)$ debe de ser

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = \epsilon\psi - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2}(\Delta + k_0^2)^2\psi \quad (2.13)$$

donde Δ es el laplaciano. Ahora es necesario agregar términos no lineales que sean congruentes con la geometría de los patrones, en la siguiente sección veremos por

qué son necesarios. Para la convección de Rayleigh-Bénard cerca de la bifurcación, se introdujo la llamada ecuación de Swift-Hohenberg [20]

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = \epsilon\psi - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2}(\Delta + k_0^2)^2\psi - \psi^3, \quad (2.14)$$

donde $\psi(x, y, t)$ representa la componente vertical de la velocidad del fluido medida en el plano medio $z = d/2$, el parámetro ϵ es el número de Rayleigh reducido y ξ_0 es la longitud de coherencia. En (2.14), el estado homogéneo de la convección corresponde a la solución trivial $\psi = 0$. Las coordenadas (x, y) corresponden al plano horizontal.

2.1.3. La necesidad de ser no lineal

Hasta ahora sólo hemos analizado la parte lineal del problema. Sin los términos no lineales de la ecuación (2.14), los modos lineales crecientes divergen en $t \rightarrow \infty$. El término cúbico, ψ^3 , y en general los términos no lineales, juegan un papel importante de estabilización cuando la perturbación inicial ha crecido mucho.

Veamos cuál es el origen físico de una no linealidad cúbica (ψ^3) en (2.14), pensando en el patrón de bandas que se observa en un fluido de Boussinesq cerca del umbral de la convección. En esta aproximación, el fluido se considera incompresible, excepto en el efecto de la fuerza diferencial de flotación, es decir un fluido en el que la densidad es únicamente función de la temperatura y no de la presión. Propiedades del fluido como son la viscosidad, ν , la difusividad del calor, α , y el coeficiente de expansión térmica, κ , se aproximan como constantes. Agregando a esto condiciones de frontera iguales en $z = 0$ y $z = d$, el sistema es invariante por reflexión respecto al plano $z = d/2$. La necesidad de la saturación del crecimiento lineal (para estabilizar los patrones), por un lado, y la consistencia con las simetrías del sistema, por el otro, se satisface agregando el término ψ^3 , pues esto hace invariante a la ecuación (2.14) ante el cambio de signo de la solución $\psi \rightarrow -\psi$. El término ψ^3 es responsable de la estabilización de los patrones de bandas, o con perfil senoidal de ψ (véase figura 2.2).

La ecuación completa de Swift-Hohenberg en su forma (2.14) cumple con otras propiedades: es invariante respecto de traslaciones $x \rightarrow x+a$, pues el operador diferencial tiene coeficientes constantes, es invariante respecto de reflexiones $x \rightarrow -x$, pues no hay derivadas espaciales impares, y es invariante respecto de rotaciones porque el vector de onda interviene como el escalar k^2 .

Experimentalmente, en la convección de Rayleigh-Bénard se pueden observar otros patrones más complejos, por ejemplo hexagonales, es decir, que el flujo convectivo se ordena en celdas como las de la figura 2.4. Del modelo (2.14) con término cúbico no se puede predecir la aparición de tales configuraciones, por no ser estables. El modelo de Swift-Hohenberg se puede generalizar agregando otros términos no lineales tanto en ψ como en sus derivadas espaciales. Una ecuación simple que admite soluciones

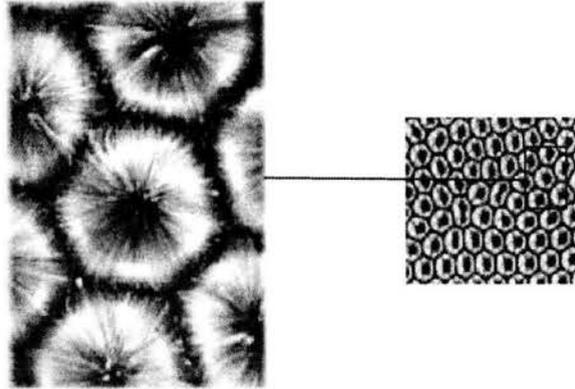


Figura 2.4: Si las propiedades del fluido dependen de la temperatura, éstas cambian con el sentido del flujo: el fluido que baja forma pequeñas islas y el que sube llena el resto del plano. Por lo tanto no hay más simetría de inversión. Aquí se puede apreciar el flujo en un patrón hexagonal.

hexagonales, como mostraremos en la sección 2.3.4, incluye un término $g_2\psi^2$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = \epsilon\psi - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2}(\Delta + k_0^2)^2 + g_2\psi^2 - \psi^3, \quad (2.15)$$

con $g_2 > 0$ sin restricción de generalidad. La interpretación de la función ψ y los parámetros ϵ , ξ_0 y k_0 no cambia respecto de (2.14). Veamos las consecuencias y el significado físico que tiene el nuevo término cuadrático.

Como resulta evidente, ψ^2 rompe la simetría vertical $\psi \rightarrow -\psi$. Puesto que ψ representa la velocidad vertical en el plano medio ($d/2$), eso significa que la simetría de reflexión respecto del plano medio es rota. Esa asimetría puede ocurrir cuando las propiedades constitutivas del fluido (densidad, viscosidad, etc.) dependen de la temperatura, y por lo tanto de la coordenada z . Esta dependencia es despreciada en la aproximación de Boussinesq, pues su efecto es normalmente pequeño. En la ecuación generalizada (2.15), el parámetro g_2 incorpora la asimetría de la viscosidad ν , el coeficiente de expansión térmica α , la difusividad térmica κ , la densidad ρ y la capacidad calorífica C en las fronteras del fluido, por lo que le llamamos *constante de efectos no Boussinesq*.

En general, los términos no lineales son responsables de la selección de la solución y de la simetría del patrón resultante.

2.2. Otros ejemplos de formación de patrones

Los modelos (2.14) y (2.15) fueron construidos en el contexto de la convección de Rayleigh-Bénard, sin embargo se ha mostrado que estas mismas ecuaciones, o

algunas similares, pueden describir la formación de patrones en diversos sistemas fuera de equilibrio. Este hecho nos permite suponer que los métodos y resultados de este trabajo son generalizables fácilmente a los modelos que presentamos abajo, siempre y cuando nuestras aproximaciones sean válidas en los sistemas que describen.

a) Un fundido de copolímeros de dibloque es un líquido compuesto de macromoléculas, donde cada macromolécula está compuesta por dos subcadenas químicamente distintas (A y B) atados por un vínculo covalente. En ciertos casos, las fases A y B se separan, formando dominios ricos en A y otros ricos en B. Debido a la unión covalente, esa separación no puede ser microscópica en los copolímeros de dibloque, y genera patrones macroscópicos. La dinámica de la separación de fases de los polímeros de dibloque se modela frecuentemente por una ecuación de Ginzburg-Landau dependiente del tiempo [2, 21, 22, 23]

$$\frac{1}{M} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \Delta [-(2 + \epsilon)\psi + \psi^3 - \frac{1}{k_0^2} \Delta \psi] - k_0^2(\psi - \psi_\infty), \quad (2.16)$$

donde la función parámetro de orden local ψ es la diferencia local de concentración entre las dos especies químicas, ϵ y k_0 juegan el mismo papel que en la ecuación de Swift-Hohenberg, a saber la distancia adimensional al punto en el que se inestabiliza un estado uniforme sin patrón y el número de onda dominante de la estructura (relacionado con el tamaño de las cadenas), respectivamente. M es la movilidad.

b) En zonas áridas, el ordenamiento de las plantas en patrones es la regla. Debido a la competencia por los escasos recursos, los arreglos de "manchas" de vegetación de un tamaño característico son preferidos a las distribuciones espacialmente uniformes [6]. En [7], la autorganización espacial de la vegetación en ecosistemas con recursos limitados se modela a través de la ecuación

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = (1 - \mu)\rho + (\Lambda - 1)\rho^2 - \rho^3 + 1/2(L^2 - \rho) \nabla^2 \rho - 1/8\rho \Delta \rho, \quad (2.17)$$

donde ρ es la densidad de fitomasa por unidad de superficie, μ (análogo a ϵ en SH) es la razón de la tasa de crecimiento a la tasa de decrecimiento y se le puede ver como una medida indirecta de la escasez de recursos. Los parámetros Λ y L son una medida de la competencia entre las plantas por los recursos disponibles.

c) En la química, la ecuación de Swift-Hohenberg (2.14) es el modelo al cuál se puede reducir la dinámica de formación de patrones durante procesos de reacción-difusión de Turing cerca del umbral [24].

Modelos similares han sido utilizados para describir descargas eléctricas en gases [18] y fenómenos ópticos no lineales [19].

2.3. Formalismo de las ecuaciones de amplitud

Para estudiar la dinámica de los patrones partimos de la geometría del flujo convectivo. Cuando $0 < \epsilon \ll 1$, suponemos que la ecuación de Swift-Hohenberg tiene

soluciones estacionarias aproximadas de la forma

$$\psi = \sum_{n=1}^N A_n e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} + c.c. , \quad (2.18)$$

donde A_n es la amplitud del modo \vec{k}_n y N es la simetría del patrón. $N = 1$ para bandas, $N = 2$ para cuadrados y $N = 3$ para hexágonos. Es decir que el patrón se describe como la resultante de N ondas planas.

Se llama ecuaciones de amplitud a las ecuaciones que gobiernan la evolución de las funciones A_n . En esta sección mostraremos de forma explícita cómo deducirlas a partir de la ecuación modelo de Swift-Hohenberg (2.14) o su extensión (2.15).

La principal razón para usar estas ecuaciones es que es son más sencillas de resolver que la ecuación de Swift-Hohenberg. Otra de sus ventajas, es que son genéricas, y de cierto modo universales cerca del umbral de la bifurcación, pues aparecen con la misma forma en otros sistemas donde hay formación de patrones, por lo tanto con las mismas soluciones. Sirven de ilustración los patrones de Turing [9], y los que se forman en los copolímeros de dibloque [21]. Los parámetros constantes que aparecen en las ecuaciones de amplitud son específicos al sistema que modelan.

2.3.1. Análisis de multiescalas

El primer caso que tomaremos como ejemplo es el de un patrón de bandas como los que suelen aparecer en la convección de Rayleigh-Bénard ligeramente por encima del establecimiento de la convección ($0 < \epsilon \ll 1$). En estos patrones el flujo convectivo está ordenado en franjas paralelas caracterizadas por un solo vector de onda $\vec{k} = k_0 \hat{x}$. Si $0 < \epsilon \ll 1$, suponemos que la función parámetro de orden local puede aproximarse como un solo modo

$$\psi(x, y, t) = A(x, y, t) e^{ik_0 x} + \bar{A}(x, y, t) e^{-ik_0 x} , \quad (2.19)$$

donde la función $A(x, y, t)$ es la amplitud del patrón, que *a priori* depende de la posición y el tiempo. Para estudiar el patrón queremos encontrar la ecuación que gobierna la evolución de A .

El sistema es de hecho bidimensional, permitiendo ligeras modulaciones en las direcciones \hat{x} y \hat{y} . De modo que (2.19) resuelve la ecuación de Swift-Hohenberg

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi = \epsilon \psi - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k_0^2 \right) \psi - \psi^3 . \quad (2.20)$$

La idea general para derivar las ecuaciones de amplitud es llamada análisis de multiescalas que consiste en aprovechar la separación natural entre las escalas de variación de la modulación $A(x, y, t)$ y de la estructura periódica local $e^{ik_0 x}$.

Cuando $\epsilon \ll 1$, la amplitud varía lentamente en el espacio respecto del término oscilante y la variación temporal es pequeña; por lo tanto es conveniente hacer

una distinción explícita entre las variables del portador e^{ik_0x} y las de la modulación $A(x, y, t)$, escribiendo

$$\psi(x, y, t) = A(X, Y, T)e^{ik_0x} + c.c. \quad (2.21)$$

y haciendo la sustitución

$$\frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial X}, \quad \frac{\partial}{\partial y} \rightarrow \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial Y}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial T} \quad (2.22)$$

en el modelo de Swift-Hohenberg. Las derivadas $\partial/\partial X$, $\partial/\partial Y$ y $\partial/\partial T$ actúan en A únicamente e identificamos $\partial/\partial x \equiv ik_0$, $\partial/\partial y \equiv 0$, $\partial/\partial t \equiv 0$ cuando se aplican al factor oscilante.

Para conocer el orden relativo de las derivadas que se aplican a las amplitudes, suponemos que A incluye una ligera modulación espacial, es decir

$$A(X, Y, T) = a(T)e^{i(\delta k_x X + \delta k_y Y)}, \quad (2.23)$$

con $\delta k_x, \delta k_y \ll k_0$. Esto es equivalente a suponer que las modulaciones tienen un número de onda $\vec{k} = (k_0 + \delta k_x)\hat{x} + \delta k_y\hat{y}$. La parte lineal de la ecuación (2.20)

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = \epsilon\psi - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k_0^2\right)^2\psi, \quad (2.24)$$

aplicada a (2.21) da

$$\frac{1}{a} \frac{da}{dT} = \epsilon - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2}((k_0 + \delta k_x)^2 + \delta k_y^2 - k_0^2)^2 \quad (2.25)$$

$$= \epsilon - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2}(2k_0\delta k_x + \delta k_x^2 + \delta k_y^2)^2. \quad (2.26)$$

Requerimos que los distintos términos de la ecuación (2.26) sean del mismo orden de magnitud. Comparando los términos independientes de orden más bajo dentro del paréntesis, vemos que

$$\delta k_x \sim \delta k_y^2. \quad (2.27)$$

De las correspondencias entre $\partial/\partial X$ y δk_x , $\partial/\partial Y$ y δk_y podemos deducir la relación entre las derivadas que actúan sobre la amplitud:

$$\frac{\partial}{\partial T}A \sim \epsilon A \sim \frac{\partial^2}{\partial X^2}A \sim \frac{\partial^4}{\partial Y^4}A. \quad (2.28)$$

De donde las variables que describen las variaciones de la amplitud $A(\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{T})$ están dadas por

$$\tilde{T} = \epsilon T \quad (2.29)$$

$$\tilde{X} = \epsilon^{1/2}X \quad (2.30)$$

$$\tilde{Y} = \epsilon^{1/4}Y. \quad (2.31)$$

Cuando $\epsilon \rightarrow 0$, las variables \tilde{X} , \tilde{Y} y \tilde{T} son muy lentas comparadas con x (X), y (Y) y t (T).

2.3.2. Deducción de las ecuaciones de amplitud

Con la definición de las variables \tilde{X} , \tilde{Y} y \tilde{T} , los operadores diferenciales se escriben como

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} + \epsilon^{1/2} \frac{\partial}{\partial \tilde{X}} \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \epsilon^{1/4} \frac{\partial}{\partial \tilde{Y}} \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \epsilon \frac{\partial}{\partial \tilde{T}} . \quad (2.34)$$

De donde la segunda derivada espacial se escribe como

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\epsilon^{1/2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \tilde{X}} + \epsilon \frac{\partial^2}{\partial \tilde{X}^2} + \epsilon^{1/2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{Y}^2} . \quad (2.35)$$

El operador lineal $(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k_0^2)^2$ en (2.20) queda expresado como una serie de Taylor en potencias de $\epsilon^{1/2}$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k_0^2\right)^2 &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2 + 2\epsilon^{1/2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \tilde{X}} + \epsilon \frac{\partial^2}{\partial \tilde{X}^2} + \epsilon^{1/2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{Y}^2}\right)^2 \\ &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2\right)^2 + \epsilon^{1/2} \left\{4\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2\right) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \tilde{X}} + 2\frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{Y}^2}\right\} \\ &+ \epsilon \left\{2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2\right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 4\frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{X}^2} + 4\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \tilde{X}} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{Y}^2} + \frac{\partial^4}{\partial \tilde{Y}^4}\right\} \\ &+ \epsilon^{3/2} \left\{4\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial^3}{\partial \tilde{X}^3} + 2\frac{\partial^2}{\partial \tilde{X}^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{Y}^2}\right\} + \epsilon^2 \left\{\frac{\partial^4}{\partial \tilde{X}^4}\right\} . \end{aligned} \quad (2.36)$$

El siguiente paso es suponer que la función parámetro de orden local ψ puede escribirse también como una serie de potencias de $\epsilon^{1/2}$:

$$\psi = \epsilon^{1/2} \psi_{1/2} + \epsilon \psi_1 + \epsilon^{3/2} \psi_{3/2} + \dots , \quad (2.37)$$

con $\psi_{1/2} = O(1)$, $\psi_1 = O(1)$...

Si ahora sustituimos esto y el desarrollo (2.36) del operador en (2.20), obtenemos la ecuación de Swift-Hohenberg desglosada en ordenes de $\epsilon^{1/2}$.

En el orden más bajo $\epsilon^{1/2}$, obtuvimos la ecuación

$$L_c \psi_{1/2} \equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2\right)^2 \psi_{1/2} = 0 . \quad (2.38)$$

El operador L_c actúa únicamente sobre la escala rápida, por lo que la solución más simple de la ecuación (2.38) es

$$\psi_{1/2}(x, y, t) = A_{1/2}(\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{T}) e^{ik_0 x} + c.c. , \quad (2.39)$$

donde la amplitud $A_{1/2}(\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{T})$ depende de las escalas lentas únicamente. La ecuación (2.39) justifica la forma (2.19) de ψ .

En el orden ϵ , la ecuación de Swift-Hohenberg es

$$L_c \psi_1 = -2 \left(2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \tilde{X}} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{Y}^2} \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2 \right) \psi_{1/2} . \quad (2.40)$$

Como $(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2) \psi_{1/2} = 0$, entonces $L_c \psi_1 = 0$. La ecuación para ψ_1 es la misma que para $\psi_{1/2}$, entonces podemos elegir $\psi_1 = 0$.

En el orden $\epsilon^{3/2}$, se determina $\psi_{3/2}$ a partir del conocimiento de los órdenes anteriores:

$$L_c \psi_{3/2} = - \left[\frac{\partial}{\partial \tilde{T}} - 1 + \psi_{1/2}^2 + \frac{\xi_0^2}{4k_0^2} \left[\left(2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \tilde{X}} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{Y}^2} \right)^2 + 2 \frac{\partial^2}{\partial \tilde{X}^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2 \right) \right] \right] \psi_{1/2} \quad (2.41)$$

De $(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_0^2) \psi_{1/2} = 0$, la ecuación anterior se reduce a

$$L_c \psi_{3/2} = - \left[\frac{\partial}{\partial \tilde{T}} - 1 + \psi_{1/2}^2 + \frac{\xi_0^2}{4k_0^2} \left(2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \tilde{X}} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{Y}^2} \right)^2 \right] \psi_{1/2} ,$$

que se puede escribir como

$$L_c \psi_{3/2} = \mathcal{L} \psi_{1/2} - \psi_{1/2}^3 , \quad (2.42)$$

donde \mathcal{L} es un operador lineal.

La ecuación (2.42) tiene solución para $\psi_{3/2}$ si el término inhomogéneo $\mathcal{L} \psi_{1/2} - \psi_{1/2}^3$ es ortogonal al núcleo del adjunto de L_c . Esta condición de solubilidad se conoce como el teorema de Fredholm.

Dos funciones f y g son ortogonales si su producto interno es cero

$$\langle f | g \rangle = \int_{\Omega} f^* g \, d\Omega / \Omega = 0 . \quad (2.43)$$

Donde Ω es un área que puede ser todo el espacio, pero en la práctica es un cuadrado de área $\lambda_0 \times \lambda_0$. Como L_c es autoadjunto y la función $e^{ik_0 x}$ pertenece al núcleo de L_c , entonces la condición de solubilidad se puede escribir como

$$\langle e^{ik_0 x} | \mathcal{L} \psi_{1/2} - \psi_{1/2}^3 \rangle = 0 \quad (2.44)$$

ó en forma integral

$$\int_x^{x+\lambda_0} \frac{1}{\lambda_0} [\mathcal{L}(\psi_{1/2}) - \psi_{1/2}^3] e^{-ik_0 x'} \, dx' = 0 , \quad (2.45)$$

después de integrar según y . Sustituyendo (2.39) en (2.45), con $\mathcal{L} = -(\frac{\partial}{\partial \tilde{T}} - 1 + \frac{\xi_0^2}{4k_0^2}(2\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \tilde{X}} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{Y}^2}))$ y desarrollando el término cúbico con $\psi_{1/2}$ dado por (2.39), obtenemos

$$\int_x^{x+\lambda_0} \frac{1}{\lambda_0} [(\mathcal{L} - 3|A_{1/2}|^2)A_{1/2} + (\mathcal{L} - 3|A_{1/2}|^2)\bar{A}_{1/2}e^{-2ik_0x'} - A_{1/2}^3e^{2ik_0x'} - \bar{A}_{1/2}^3e^{-4ik_0x'}]dx' = 0 . \quad (2.46)$$

Cualquier término oscilante ($e^{nik_0x'}$) en (2.46) se integra a cero, pues las amplitudes $A_{1/2}$ y $\bar{A}_{1/2}$ dependen únicamente de las escalas lentas $\{\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{T}\}$ y no de x' . En (2.45), $\mathcal{L}(\psi_{1/2}) - \psi_{1/2}^3$ contiene términos que oscilan como $e^{ik_0x'}$, llamados términos resonantes. Estos corresponden a los términos no oscilantes $(\mathcal{L} - 3|A_{1/2}|^2)A_{1/2}$ en (2.46). Para que se cumpla la igualdad (2.46), los términos no resonantes $(\mathcal{L} - 3|A_{1/2}|^2)A_{1/2}$ tienen que ser cero necesariamente, llegando a una ecuación para $A_{1/2}$:

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{T}} A_{1/2} = A_{1/2} + \frac{\xi_0^2}{4k_0^2} (2ik_0 \frac{\partial}{\partial \tilde{X}} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{Y}^2})^2 A_{1/2} - 3|A_{1/2}|^2 A_{1/2} . \quad (2.47)$$

Regresando a las variables físicas

$$A(x, t) = \epsilon^{1/2} A_{1/2} \quad (2.48)$$

$$x = \frac{\tilde{X}}{\sqrt{\epsilon}} \quad (2.49)$$

$$y = \frac{\tilde{Y}}{\epsilon^{1/4}} , \quad (2.50)$$

tenemos la ecuación para la amplitud A

$$\frac{\partial}{\partial t} A = \epsilon A + \xi_0^2 \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{i}{2k_0} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)^2 A - 3|A|^2 A . \quad (2.51)$$

Este es un resultado conocido, deducido por primera vez por Newell, Whitehead [25] y Segel [26]. Se trata de una ecuación de Ginzburg-Landau, que de manera general es una serie de Taylor en A y sus derivadas. La ecuación con sus constantes, pueden ser calculados a partir de las ecuaciones completas que describen la física de sistemas muy distintos (patrones de Turing, separación de microfase en mezclas de copolímeros de dibloque). Esta ecuación describe naturalmente cualquier bifurcación supercrítica estacionaria si el sistema es invariante ante traslaciones y tiene simetría de reflexión ($x \rightarrow -x$). El término cúbico $3|A|^2 A$ se explica del hecho que la ecuación es invariante cuando se multiplica a A por una fase arbitraria $e^{i\phi}$, de forma que la invariancia ante una traslación implica que la ecuación para A tiene que ser invariante bajo la transformación $A \rightarrow Ae^{i\phi}$.

2.3.3. La estabilidad de los patrones y el diagrama de bifurcación

En los experimentos de convección se pueden obtener situaciones en las que un solo patrón ocupa todo el sistema, no tiene defectos y es estacionario si los parámetros de control, números de Rayleigh y Prandtl, no son alterados. En ese estado ideal, la amplitud del patrón cumple con $\partial A/\partial x = 0$, $\partial A/\partial t = 0$. Sustituyendo estas condiciones en la ecuación 2.51 obtenemos

$$\epsilon A - 3|A|^2 A = 0 . \quad (2.52)$$

Las soluciones de (2.52) son dadas por las amplitudes del estado conductivo y del patrón de bandas con número de onda k_0 y amplitud $|A|$

$$A = 0 \quad y \quad |A| = \sqrt{\epsilon/3} . \quad (2.53)$$

Podemos describir a la amplitud como una función del parámetro de control ϵ . De ahí se deduce que la solución conductiva $\psi = 0$, en principio, puede existir para cualquier valor de ϵ , pero que los rollos de convección sólo existen cuando $\epsilon \geq 0$. Es decir que si $\epsilon > 0$, sería posible observar la coexistencia de ambas fases, lo que de hecho no se observa.

Esta discrepancia se despeja examinando la estabilidad de los patrones. Para eso superponemos una perturbación $\delta A = u(t) + iv(t)$ a cada estado ideal. La ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t} A = \epsilon A - 3|A|^2 A , \quad (2.54)$$

nos debe de indicar si la perturbación crece o decrece exponencialmente en el tiempo.

En el caso de la solución $A = 0$, ya anticipamos la respuesta en la sección 2.1.2: el estado convectivo es estable para $\epsilon \leq 0$ e inestable cuando $\epsilon > 0$. Por lo que para tiempos largos no se le observa junto a la fase de bandas.

Para el patrón de bandas sustituimos $A = \sqrt{\epsilon/3} + u(t) + iv(t)$ en (2.54) y linealizamos alrededor de la amplitud de base $A_0 = \sqrt{\epsilon/3}$. Separando la parte real de la compleja, obtenemos después de la linealización

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -2\epsilon u \quad |u| \ll \sqrt{\epsilon} \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -2\epsilon v \quad |v| \ll \sqrt{\epsilon} . \quad (2.56)$$

Es decir, que la perturbación siempre decrece y por lo tanto el patrón de bandas es estable en el intervalo $\epsilon > 0$.

La respuesta del patrón ante las perturbaciones se representa en el diagrama de la figura 2.5, llamado de bifurcación. La amplitud A del patrón como función del

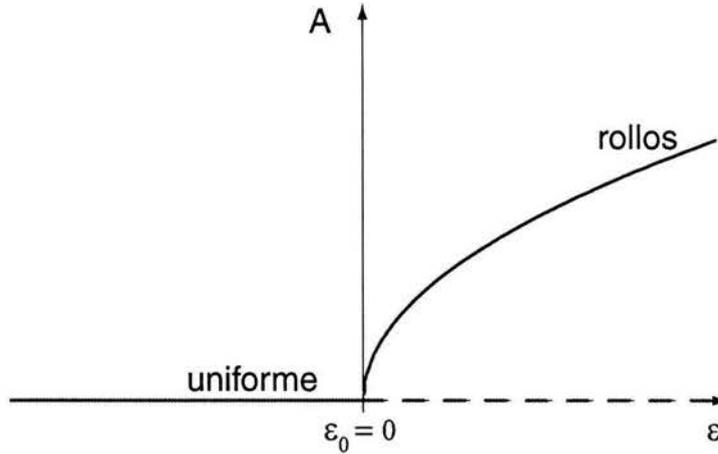


Figura 2.5: Diagrama de estabilidad cerca del punto crítico $\epsilon_0=0$. La bifurcación de la amplitud ocurre en $\epsilon_0 = 0$.

parámetro de control, se dibuja con un trazo continuo si es estable y discontinuo cuando no. La transición de la fase conductiva estable a la de rollos convectivos estables ocurre en un valor crítico del parámetro de control. Dicho de otra forma, en $\epsilon = 0$ la solución a la ecuación de amplitud se bifurca. A esta clase de bifurcación se le llama supercrítica pues la bifurcación ocurre cuando ϵ sobrepasa el valor crítico $\epsilon_0 = 0$ del parámetro de control. La amplitud crece desde cero de manera continua cuando el parámetro de control aumenta.

2.3.4. Ecuaciones de amplitud para la fase hexagonal

En la sección 2.1.3 hemos introducido la ecuación de Swift-Hohenberg generalizada

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi = \epsilon \psi - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2} (\Delta + k_0^2)^2 \psi + g_2 \psi^2 - \psi^3, \quad (2.57)$$

haciendo una breve descripción de la física asociada al término cuadrático $g_2 \psi^2$. La ecuación (2.57) admite como soluciones estables a las fases hexagonales, gracias a la estabilidad que el término $g_2 \psi^2$ da a esta simetría, como veremos más adelante en la ecuación (2.71). Una deducción detallada de las ecuaciones de amplitud para los hexágonos se puede encontrar en la referencia [9].

La geometría de la fase hexagonal necesita tres direcciones para describirse. En la figura 2.6 se muestra la construcción del entramado hexagonal a partir de tres ondas planas cuyos vectores de onda son $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3$, tienen módulo k_0 y son tales que $\sum_{i=1}^3 \vec{k}_i = \vec{0}$. En esta geometría definimos las direcciones $\hat{x}_i \equiv \hat{k}_i$, y \hat{y}_i en la dirección

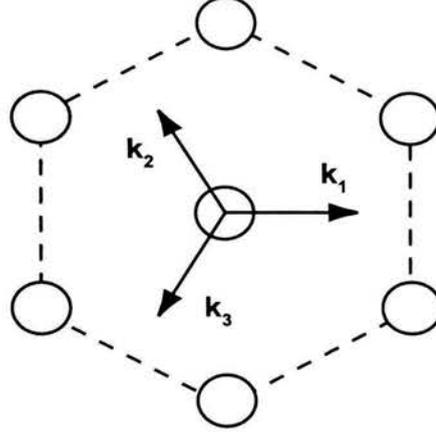


Figura 2.6: Construcción de la fase hexagonal del parámetro de orden ψ como superposición de 3 ondas planas. La regularidad de los hexágonos esta garantizada si $\sum_{i=1}^3 \vec{k}_i = \vec{0}$.

ortogonal a \hat{k}_i . En este caso, la solución aproximada de la ecuación (2.57) se puede encontrar asumiendo que

$$\psi(x, y, t) = A_1(\vec{r}, t)e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} + A_2(\vec{r}, t)e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} + A_3(\vec{r}, t)e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{r}} + c.c. , \quad (2.58)$$

donde $\vec{r} = (x, y)$ y las $A_j(x, y, t)$ son envolventes que cambian lentamente en el espacio y el tiempo.

La deducción de las ecuaciones de las A_j se logra repitiendo lo hecho en las secciones 2.3.1 y 2.3.2 para cada una de las tres direcciones $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3$. Omitiendo detalles, veamos lo que sucede para la dirección \vec{k}_2 , en la que las variables espaciales longitudinales y transversales son x_2 y y_2 .

Definiendo las escalas lentas $\{X_2, Y_2, T\}$ asociadas a \vec{k}_2 , del análisis de multiescalas, obtenemos la misma parte lineal en la ecuación que gobierna la evolución de A_2 . La determinación de la parte no lineal se calca de lo hecho en el caso anterior, sólo tenemos que agregar el término $g_2\psi_{1/2}^2$, escribir $\psi_{1/2}$ en la forma adecuada (2.58) y evaluar las resonancias respecto del vector \vec{k}_2 . La condición de solubilidad (Teorema de Fredholm) es

$$\langle e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} | \mathcal{L}\psi_{1/2} + g_2\psi_{1/2}^2 - \psi_{1/2}^3 \rangle = 0 , \quad (2.59)$$

es decir

$$\int_x^{x+\lambda_0} \frac{1}{\lambda_0} \int_y^{y+\lambda_0} \frac{1}{\lambda_0} [\mathcal{L}(\psi_{1/2}) + g_2\psi_{1/2}^2 - \psi_{1/2}^3] e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}'} dx' dy' = 0 , \quad (2.60)$$

donde $\mathcal{L} = -(\frac{\partial}{\partial T} - 1 + (2\frac{\partial}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial X_2} + \frac{\partial^2}{\partial Y_2^2}))^2$.

Después de sustituir (2.58) en (2.60), los términos resonantes que aparecerán en la ecuación de amplitud son los que oscilan como $e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}^7}$ entre paréntesis cuadrados de la ecuación (2.60). Desarrollamos $\psi_{1/2}^3$ usando la relación general $(\sum a_i)^3 = \sum a_i^3 + 3 \sum_{i \neq j} a_i^2 a_j + 6 \sum_{i \neq j \neq h} a_i a_j a_h$. De donde sale un término de auto interacción del modo 2 con el mismo, $3|A_2|^2 A_2$, y términos de interacción con los demás modos, $6|A_1|^2 A_2$ y $6|A_3|^2 A_2$. El término de efectos no Boussinesq genera un nuevo término resonante, $2g_2 \bar{A}_1 \bar{A}_3$, dado que $-\vec{k}_1 - \vec{k}_3 = \vec{k}_2$.

La condición de solubilidad nos lleva a

$$\frac{\partial A_2}{\partial t} = \epsilon A_2 + 2g_2 \bar{A}_1 \bar{A}_3 + \xi_0^2 \left(\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{i}{2k_0} \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \right)^2 A_2 - (3|A_2|^2 + 6|A_1|^2 + 6|A_3|^2) A_2 \quad (2.61)$$

Las ecuaciones para las amplitudes A_1 y A_3 , se obtienen por permutación de los subíndices:

$$\frac{\partial A_1}{\partial t} = \epsilon A_1 + 2g_2 \bar{A}_2 \bar{A}_3 + \xi_0^2 \left(\frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{i}{2k_0} \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \right)^2 A_1 - (3|A_1|^2 + 6|A_2|^2 + 6|A_3|^2) A_1 \quad (2.62)$$

$$\frac{\partial A_3}{\partial t} = \epsilon A_3 + 2g_2 \bar{A}_1 \bar{A}_2 + \xi_0^2 \left(\frac{\partial}{\partial x_3} - \frac{i}{2k_0} \frac{\partial^2}{\partial y_3^2} \right)^2 A_3 - (3|A_3|^2 + 6|A_1|^2 + 6|A_2|^2) A_3 \quad (2.63)$$

Ahora buscamos las soluciones "ideales", correspondientes a las A_j ($j=1,2,3$) constantes en el tiempo y el espacio. Las ecuaciones (2.61) a (2.63) se convierten en el sistema

$$\begin{aligned} 0 &= \epsilon A_1 + 2g_2 \bar{A}_2 \bar{A}_3 - (3|A_1|^2 + 6|A_2|^2 + 6|A_3|^2) A_1 \\ 0 &= \epsilon A_2 + 2g_2 \bar{A}_1 \bar{A}_3 - (3|A_2|^2 + 6|A_3|^2 + 6|A_1|^2) A_2 \\ 0 &= \epsilon A_3 + 2g_2 \bar{A}_2 \bar{A}_1 - (3|A_3|^2 + 6|A_1|^2 + 6|A_2|^2) A_3 \end{aligned} \quad (2.64)$$

Cada uno de los patrones que pueden aparecer en el sistema cerca de una bifurcación, corresponde a una de las tres posibilidades siguientes

$$\text{hexagonal} \quad A_1 = A_2 = A_3 = A_0 \quad (2.65)$$

$$\text{bandas en la dirección } k_i \quad A_i \neq 0 \quad A_{j \neq i} = 0 \quad (2.66)$$

$$\text{estado uniforme} \quad A_1 = A_2 = A_3 = 0 \quad (2.67)$$

En el caso hexagonal, (2.64) se reduce a

$$\epsilon A_0 + 2g_2 \bar{A}_0^2 - 15 |A_0|^2 A_0 = 0, \quad (2.68)$$

es decir que el mosaico hexagonal puede tener dos amplitudes

$$AI: \quad A_0 = \frac{g_2}{15} + \frac{\sqrt{g_2^2 + 15\epsilon}}{15}$$

$$AII: \quad A_0 = \frac{g_2}{15} - \frac{\sqrt{g_2^2 + 15\epsilon}}{15} \quad \text{si} \quad -\frac{g_2^2}{15} < \epsilon < 0 \quad (2.69)$$

$$A_0 = -\left(\frac{g_2}{15} - \frac{\sqrt{g_2^2 + 15\epsilon}}{15} \right) \quad \text{si} \quad \epsilon > 0 \quad (2.70)$$

Fijando el valor de g_2 , la amplitud del patrón hexagonal perfecto es una función del número de Rayleigh reducido, ϵ . AI y AII son las ramas una parábola que se abre hacia la derecha y con vértice en el punto ($\epsilon_m = -g_2^2/15 < 0$, $A_0 = g_2/15$). Nosotros tomamos $g_2 > 0$ sin restricción de generalidad y suponemos que $g_2 = O(\sqrt{\epsilon})$ por consistencia.

Ahora bien, no basta con conocer las posibles soluciones de (2.68), la estabilidad es el criterio definitivo para decidir sobre su existencia. Siguiendo los mismos pasos que en la sección 2.3.3, la condición de estabilidad para el patrón hexagonal es

$$-2(\epsilon + g_2 A_0) < 0, \quad (2.71)$$

que depende tanto de ϵ como de g_2 , recordemos que $A_0 = A_0(\epsilon, g_2)$. Si $g_2 \neq 0$, la desigualdad (2.71) se cumple para AI en un intervalo $[\epsilon_m, \epsilon_p]$ pero no para AII . Los hexágonos con esas amplitudes son respectivamente estables e inestables.

El patrón de simetría uno (bandas), corresponde a suponer que una amplitud es distinta de cero, por ejemplo A_1 , mientras que A_2 y A_3 son nulas. La ecuación resultante es la que conocimos en la sección 2.3.3, de manera que la amplitud de las bandas que puedan surgir será siempre

$$\sqrt{\frac{\epsilon}{3}}. \quad (2.72)$$

De un análisis de estabilidad lineal se sabe que el patrón de bandas es inestable en el intervalo $\epsilon = [0, 4g_2^2/3]$ y estable fuera de él. El estado conductivo es estable únicamente para $\epsilon < 0$, como en la figura 2.5 [9].

En la figura 2.7 se sintetiza lo que he explicado acerca de la estabilidad de las soluciones uniformes a las ecuaciones (2.61) a (2.63). En este diagrama, la bifurcación del estado conductivo al estado convectivo hexagonal es discontinua y como es visible, el valor de ϵ en el que ocurre es menor que 0. Esta bifurcación es conocida como subcrítica. El intervalo $[\epsilon_m, 0]$ corresponde a una zona de biestabilidad donde los hexágonos y la solución uniforme $\psi = 0$ son estables.

2.4. Dinámica de fronteras

En esta sección mostraremos que el formalismo de las ecuaciones de amplitud puede ser usado para describir la estructura y la dinámica de las interfases que separan dominios con patrones de simetrías distintas o dominios de misma simetría pero con orientaciones distintas. En algunos casos estas interfases son estacionarias. Aquí tratamos una situación más común, que es la de una frontera que avanza con velocidad constante. Primero analizamos el ejemplo de una frontera entre dos patrones de bandas (el caso “estándar”, estudiado por primera vez por Pomeau y Manneville [13]). Después se muestran los resultados conocidos en el caso de una interfaz plana que

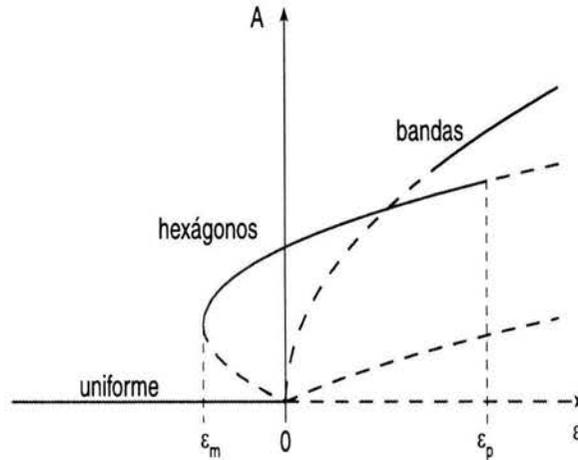


Figura 2.7: Diagrama de bifurcaciones de la ecuación generalizada de Swift-Hohenberg.

separa a un patrón de hexágonos de una región uniforme [14]. La última situación se ha estudiado experimentalmente en la convección de Rayleigh-Bénard [15].

Cuando varios patrones están compitiendo en un sistema espacialmente extendido, el signo de la velocidad de las fronteras nos dice hacia qué estado (patrón) evoluciona el sistema.

2.4.1. Interfaz plana que separa a dos regiones de bandas

El ejemplo que vamos a desarrollar se ilustra en la figura 2.8; una interfaz, o frontera de grano, separa a dos patrones A y B orientados perpendicularmente entre sí. Consideramos que el parámetro de orden local, ψ , es solución de la ecuación de Swift-Hohenberg (2.14). En este caso ψ se expresa como

$$\psi(\vec{r}, t) = A(\vec{r}, t)e^{ik_0x} + B(\vec{r}, t)e^{ik_0y} + c.c. , \quad (2.73)$$

donde x es la coordenada normal a la interfaz. Suponiendo que el dominio A tiene un número de onda $k > k_0$ y el dominio B un número de onda k_0 , las amplitudes A y B en la ecuación 2.73 se pueden escribir como

$$A(\vec{r}, t) = A(x)e^{ik_0x} = |A(x)|e^{i\delta kx}e^{ik_0x} \quad (2.74)$$

$$B(\vec{r}, t) = B(x)e^{ik_0y} = |B(x)|e^{i\phi}e^{ik_0y} , \quad (2.75)$$

donde ϕ es una fase arbitraria (elegimos $\phi=0$) y $\delta k = k - k_0 > 0$.

Este sistema es descrito por las ecuaciones acopladas de Ginzburg-Landau

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \epsilon A + \xi_0^2 \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{i}{2k_0} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)^2 A - (3|A|^2 + 6|B|^2)A \quad (2.76)$$

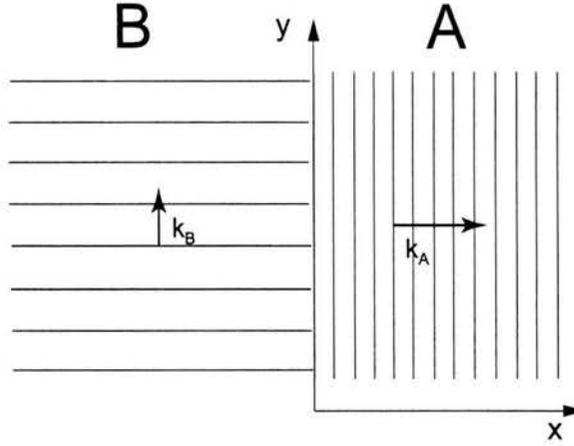


Figura 2.8: Cada dominio de bandas es definido por un vector de onda \vec{k}_i ($i=A,B$) con $\vec{k}_A = k\hat{x}$ y $\vec{k}_B = k_0\hat{y}$, lo que hace que la frontera se extienda a todo lo largo de la coordenada y . Este caso, a diferencia del sistema hexagonal-uniforme que se trata más adelante, involucra a dos patrones de misma simetría, pero con orientación y periodicidad distinta (véanse ecuaciones (2.74) y (2.75)).

n

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \epsilon B + \xi_0^2 \left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{i}{2k_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right)^2 B - (3|B|^2 + 6|A|^2)B, \quad (2.77)$$

donde los términos cruzados provienen de las condiciones de solubilidad, como para las ecuaciones (2.61)-(2.63). A partir de (2.76) y (2.77) se puede mostrar que los patrones cuadrados ($A = B = cst.$) son inestables [27] y en cambio las interfases ($\lim_{x \rightarrow \infty} A(x) = A_0$, $\lim_{x \rightarrow \infty} B(x) = B_0$, etc...) (véase figura 2.8) son estables.

Estas ecuaciones, como las ecuaciones de amplitud en muchos casos, tienen la importante propiedad de poder ser derivadas de un funcional de Lyapunov (o “energía libre”) F , que en este caso toma la forma

$$F(t) = \int f(A, \bar{A}, B, \bar{B}, \partial_x A, \partial_x \bar{A}, \partial_y A, \partial_y \bar{A} \dots) d\vec{r}. \quad (2.78)$$

Donde la integral se calcula sobre toda el área del sistema. Aquí f representa una densidad de “energía libre” por unidad de área y se puede ver como una función de las amplitudes y sus complejos conjugados. Para el ejemplo de las ecuaciones (2.76) y (2.77) (véase figura 2.8), F es dado por

$$\begin{aligned} F(t) = & \int \left(-\epsilon(|A|^2 + |B|^2) + \frac{3}{2}(|A|^4 + |B|^4) + 6|A|^2|B|^2 \right. \\ & \left. + \xi_0^2 \left| \frac{\partial A}{\partial x} - \frac{i}{2q_0} \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} \right|^2 + \xi_0^2 \left| \frac{\partial B}{\partial y} - \frac{i}{2q_0} \frac{\partial^2 B}{\partial x^2} \right|^2 \right) d\vec{r}. \end{aligned} \quad (2.79)$$

A partir de esta definición de F , las ecuaciones (2.76) y (2.77) pueden escribirse simplemente como

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta \bar{A}} \quad (2.80)$$

$$\frac{\partial B}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta \bar{B}}, \quad (2.81)$$

donde $\delta F/\delta \bar{A}$ denota la derivada funcional (derivada de Fréchet) de F respecto del complejo conjugado \bar{A} . Esta propiedad nos indica que la dinámica del sistema tiene una estructura potencial. El origen potencial de las ecuaciones de amplitud es de gran ayuda para la derivación de la ley de movimiento de una interfaz plana, como se verá más adelante.

Usando (2.80) y (2.81) se muestra inmediatamente que

$$\frac{dF}{dt} = -2 \int (|\frac{\partial A}{\partial t}|^2 + |\frac{\partial B}{\partial t}|^2) d\bar{r} \leq 0. \quad (2.82)$$

Por lo tanto la dinámica de las amplitudes es disipativa. Ahora la interpretación de F como un funcional de energía libre adquiere más sentido; F siempre decrece, por lo tanto cualquier patrón estacionario debe corresponder a un mínimo local o global de F .

Regresando al funcional (2.79), cuando evaluamos f lejos de la frontera se tienen los dos límites:

$$x \longrightarrow +\infty$$

$$A \longrightarrow A_0$$

$$B \longrightarrow 0$$

$$x \longrightarrow -\infty$$

$$B \longrightarrow B_0 (\neq A_0)$$

$$A \longrightarrow 0.$$

Lejos de la interfaz, el término cruzado $|A|^2|B|^2$ tiende a cero. Las derivadas $\partial A/\partial x$ y $\partial B/\partial x$ son distintas de cero únicamente cerca de la frontera y $\partial A/\partial y = \partial B/\partial y = 0$, pues la interfaz es invariante en la dirección \hat{y} . Entonces notamos

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} f(A, B, \bar{A}, \bar{B} \dots) \equiv f_\infty(A) \quad (2.83)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} f(A, B, \bar{A}, \bar{B} \dots) \equiv f_\infty(B), \quad (2.84)$$

donde $f_\infty(A)$ y $f_\infty(B)$ son las densidades de energía de los patrones A y B aislados.

Sin necesidad de conocer de forma precisa el perfil $(A(x), B(x))$ de la frontera, es posible emplear un argumento energético para obtener una expresión analítica de la

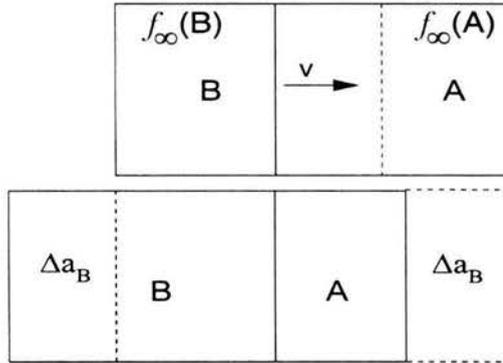


Figura 2.9: El movimiento de la frontera favorece una disminución de la energía libre F , es decir que el patrón con la densidad de energía f_∞ menor tiende a prevalecer.

velocidad, v_{gb} , de la frontera. Suponemos que la interfaz plana se mueve sin deformarse en un intervalo de tiempo Δt a una velocidad constante v_{gb} , por ejemplo, hacia la derecha, (véase figura 2.4.1). El cambio en las áreas a_A y a_B de las regiones A y B, respectivamente, se relaciona como

$$\Delta a_B = v_{gb} \Delta t L_y = -\Delta a_A, \quad (2.85)$$

donde L_y es la longitud de la interfaz. El cambio de “energía” debido a este movimiento es

$$\Delta F = \Delta A_B f_\infty(B) - \Delta A_B f_\infty(A) \quad (2.86)$$

$$\Delta F = v_{gb} \Delta t L_y (f_\infty(B) - f_\infty(A)) \quad (2.87)$$

$$\frac{\Delta F}{\Delta t} = v_{gb} L_y \Delta f_\infty. \quad (2.88)$$

Para escribir las ecuaciones (2.86)-(2.88) hemos usado el hecho de que el movimiento de la frontera es equivalente a un patrón A que disminuye en la misma proporción que el patrón B aumenta. De forma que lejos de la interfaz podemos sustituir un segmento de patrón A perfectamente regular, por un segmento de patrón B perfectamente regular del otro lado del sistema, lejos de la interfaz. El cambio resultante en la “energía” es por lo tanto independiente de la forma de la frontera.

Además, la condición de que avance la frontera sin deformación se puede traducir como

$$A(\vec{r}, t) = A(x - x_i(t)) \quad (2.89)$$

$$B(\vec{r}, t) = B(x - x_i(t)), \quad (2.90)$$

donde $x_i(t)$ es la posición de la interfaz. Esto quiere decir que A y B se propagan

como un frente localizado que conserva su forma. Por lo que necesariamente

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -v_{gb} \frac{\partial A}{\partial x} . \quad (2.91)$$

Ahora, utilizando la relación

$$\frac{dF}{dt} = -2 \int (|\frac{\partial A}{\partial t}|^2 + |\frac{\partial B}{\partial t}|^2) d\vec{r} \quad (2.92)$$

con (2.91) se tiene que

$$\frac{dF}{dt} = -2v_{gb}^2 \int (|\frac{\partial A}{\partial x}|^2 + |\frac{\partial B}{\partial x}|^2) d\vec{r} . \quad (2.93)$$

Pero de (2.88) tenemos también

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta F}{\Delta t} = \frac{dF}{dt} = v_{gb} L_y \Delta f_{\infty} . \quad (2.94)$$

De igualar las dos ecuaciones anteriores resulta la ley de movimiento de la frontera

$$v_{gb} = -\frac{1}{2} \frac{L_y (f_{\infty}(B) - f_{\infty}(A))}{\int (|\frac{\partial A}{\partial x}|^2 + |\frac{\partial B}{\partial x}|^2) dx dy} \quad (2.95)$$

ó

$$v_{gb} = -\frac{1}{2} \frac{f_{\infty}(B) - f_{\infty}(A)}{\int_{-\infty}^{+\infty} (|\frac{\partial A}{\partial x}|^2 + |\frac{\partial B}{\partial x}|^2) dx} . \quad (2.96)$$

En esta expresión de v_{gb} se aprecian dos contribuciones de origen cualitativamente distinto. Mientras que el numerador, Δf_{∞} , depende del valor de las amplitudes lejos de la interfaz, el valor del denominador depende de la estructura de la frontera (donde $\partial A/\partial x \neq 0, \partial B/\partial x \neq 0$). De la ecuación (2.96) se obtiene una condición necesaria para el movimiento de la frontera: la “energía” de los dos patrones tiene que ser distinta, $f_{\infty}(B) \neq f_{\infty}(A)$. Para el sistema de bandas de la figura 2.8 se tiene que [13]

$$f_{\infty}(A) = \frac{-1}{2} \epsilon^2 + |A|^2 \delta k^2 \quad (2.97)$$

$$f_{\infty}(B) = \frac{-1}{2} \epsilon^2 . \quad (2.98)$$

Por lo que la velocidad de la interfaz es

$$v_{gb} = \frac{1}{2} \frac{|A|^2 (k - k_0)^2}{\int_{-\infty}^{+\infty} (|\frac{\partial A}{\partial x}|^2 + |\frac{\partial B}{\partial x}|^2) dx} . \quad (2.99)$$

La interpretación general de la ecuación (2.96) es que la interfaz se mueve de manera que el patrón con menor energía se expande a expensas del otro. Esto se ve claramente en la ecuación (2.96): $v_{gb} > 0$ porque $f_{\infty}(B) < f_{\infty}(A)$. A partir de la ecuación (2.96) se puede hacer una analogía con un sistema mecánico; el numerador $f_{\infty}(B) - f_{\infty}(A)$ puede verse como una fuerza que actúa sobre la frontera y el término $\int (|\partial A/\partial x|^2 + |\partial B/\partial x|^2) dx$ es análogo a un término de fricción que no es conocido analíticamente pero es siempre positivo.

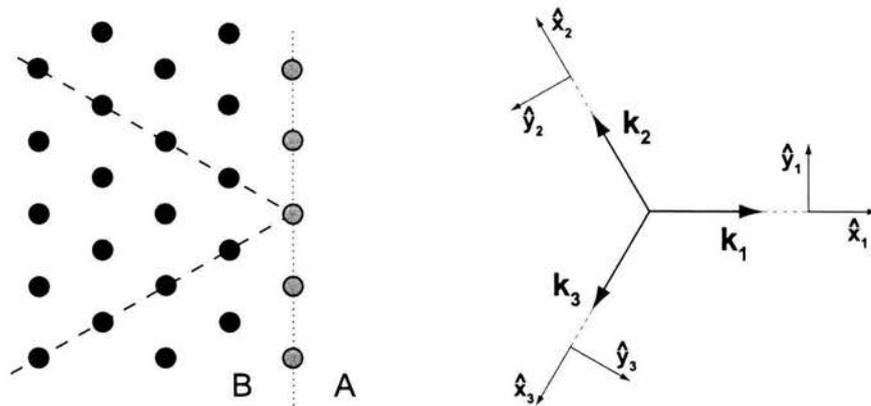


Figura 2.10: El patrón hexagonal B tiene una frontera plana (línea punteada) con la región uniforme A. B es descrito por tres vectores de onda \vec{k}_i ($i=1,2,3$) con $|\vec{k}_i| = k_0$, tales que forman un ángulo de $2\pi/3$ entre ellos (i.e. $\sum_{i=1}^3 \vec{k}_i = 0$). Las direcciones \hat{x}_i, \hat{y}_i están definidas como la dirección paralela y ortogonal a \vec{k}_i respectivamente.

2.4.2. Frontera entre un patrón hexagonal y una región uniforme (o de conducción) en la zona de biestabilidad

En la sección (2.3.4) se obtuvo el diagrama de bifurcaciones (2.7) asociado a la ecuación de Swift-Hohenberg generalizada para patrones hexagonales. Para valores del parámetro de control, ϵ , en el intervalo I_c , definido como

$$\epsilon_m = \frac{-g_2^2}{15} < \epsilon < 0, \quad (2.100)$$

el patrón uniforme ($\psi = 0$) y el patrón hexagonal son estables. Es decir que ambos patrones pueden coexistir si ϵ pertenece a I_c . Esta situación es particular de las bifurcaciones subcríticas (véase figura 2.7). Una geometría que puede resultar de esta coexistencia se ilustra en la figura 2.10, donde los dos tipos de patrones son separados por una interfaz plana. En los experimentos de Bodenschatz *et. al.* [15] sobre la convección de Rayleigh-Bénard, se observó el crecimiento de una “isla” de patrón hexagonal rodeada del estado conductivo.

Ahora conviene recordar la descripción que de este sistema se presentó en la sección 2.3.4. El parámetro de orden local, ψ , es

$$\psi(\vec{r}, t) = A_1(\vec{r}, t)e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} + A_2(\vec{r}, t)e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} + A_3(\vec{r}, t)e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{r}} + c.c., \quad (2.101)$$

con las condiciones

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} A_1, A_2, A_3 = 0 \quad (2.102)$$

y

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} A_1, A_2, A_3 = \frac{g_2 + \sqrt{g_2^2 + 15\epsilon}}{15} = A_0, \quad (2.103)$$

siendo A_0 solución de las ecuaciones (2.61-2.63) para un patrón hexagonal regular de número de onda k_0 . Recordemos que g_2 es el parámetro de los efectos no Boussinesq en la ecuación (2.15).

El funcional de “energía libre” asociado con las ecuaciones (2.61) a (2.63), es

$$\begin{aligned} F(t) = & \int \{ -g_2(A_1 A_2 A_3 + \bar{A}_1 \bar{A}_2 \bar{A}_3) - \epsilon(|A_1|^2 + |A_2|^2 + |A_3|^2) \\ & + \frac{3}{2}(|A_1|^4 + |A_2|^4 + |A_3|^4) + 6(|A_1|^2 |A_2|^2 + |A_1|^2 |A_3|^2 + |A_2|^2 |A_3|^2) \\ & + \xi_0^2 \sum_i^3 \left| \frac{\partial A_i}{\partial x_i} - \frac{i}{2q_0} \frac{\partial^2 A_i}{\partial y_i^2} \right|^2 \} d\vec{r}. \end{aligned} \quad (2.104)$$

Como en el caso anterior, las ecuaciones de amplitud (2.61-2.63) pueden abreviarse como

$$\frac{\partial A_i}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta \bar{A}_i} \quad (i = 1, 2, 3). \quad (2.105)$$

Dada esta simetría, la relación análoga a la ecuación (2.92) es

$$\frac{dF}{dt} = -2 \int (|\frac{\partial A_1}{\partial t}|^2 + |\frac{\partial A_2}{\partial t}|^2 + |\frac{\partial A_3}{\partial t}|^2) d\vec{r}. \quad (2.106)$$

Por lo tanto, el argumento energético y el *ansatz* $A_j(\vec{r}, t) = A(x - x_i(t))$ para una interfaz plana a lo largo de la dirección \hat{y} que se usó antes conduce a

$$v_{gb} = -\frac{1}{2} \frac{f_\infty(B) - f_\infty(A)}{\int_{-\infty}^{+\infty} (|\frac{\partial A_1}{\partial x_1}|^2 + |\frac{\partial A_2}{\partial x_2}|^2 + |\frac{\partial A_3}{\partial x_3}|^2) dx}, \quad (2.107)$$

con

$$f_\infty(A) = 0 \quad (2.108)$$

$$f_\infty(B) = A_0^2 \left[\frac{45}{2} A_0^2 - 4g_2 A_0 - 3\epsilon \right]. \quad (2.109)$$

A_0 esta dado por (2.103), entonces

$$v_{gb} = -\frac{1}{2} \frac{A_0^2 \left[\frac{45}{2} A_0^2 - 4g_2 A_0 - 3\epsilon \right]}{\int_{-\infty}^{+\infty} (|\frac{\partial A_1}{\partial x_1}|^2 + |\frac{\partial A_2}{\partial x_2}|^2 + |\frac{\partial A_3}{\partial x_3}|^2) dx}. \quad (2.110)$$

El sentido de movimiento de la frontera es determinado por el signo de la velocidad. Por lo tanto, el signo de $-f_\infty(B)$, que es una función del parámetro de control, ϵ , indica cuál patrón crece.

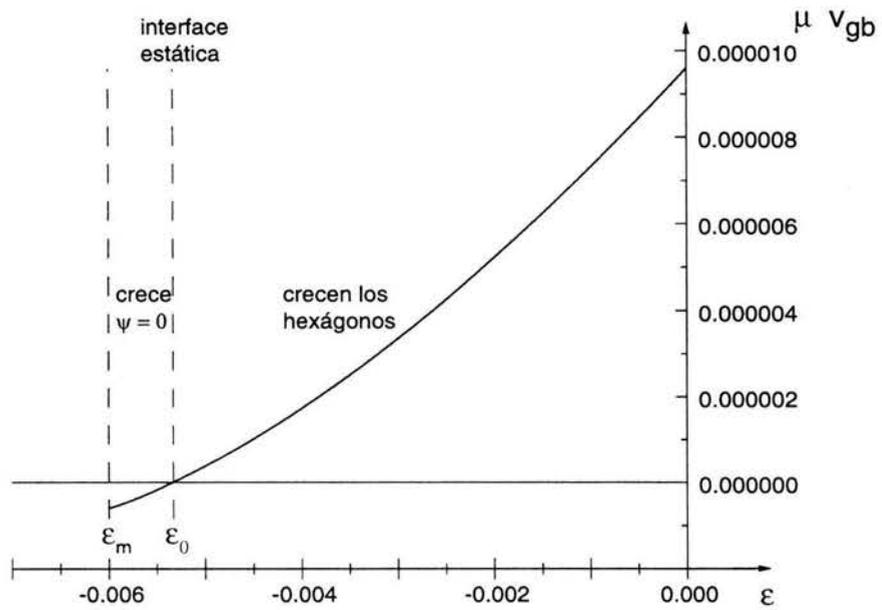


Figura 2.11: El intervalo de biestabilidad es $I_c = [\epsilon_m, 0]$ y μ es dada por (2.111). En el sub-intervalo $[\epsilon_0, 0]$ $v > 0$, por lo que el patrón hexagonal se expande ($\psi=0$ se reduce). En el sub-intervalo más reducido $[\epsilon_m, \epsilon_0]$ $v < 0$: el patrón uniforme, $\psi=0$, crece a expensas del hexagonal. En $\epsilon = \epsilon_0(g_2)$ la interfaz plana es estática.

La gráfica de la figura 2.11 resume el resultado de esta sección, en ella graficamos la velocidad, v_{gb} , de la frontera que separa a los hexágonos del patrón uniforme, en función del parámetro de control ϵ (el número de Rayleigh reducido en la convección de Rayleigh-Bénard). La constante positiva μ que multiplica a la velocidad está definida como

$$\mu = \int_{-\infty}^{+\infty} (|\frac{\partial A_1}{\partial x_1}|^2 + |\frac{\partial A_2}{\partial x_2}|^2 + |\frac{\partial A_3}{\partial x_3}|^2) dx \quad (2.111)$$

y es análoga a una fricción. Para un valor fijo de g_2 , que da cuenta de los efectos no Boussinesq en la ecuación de Swift-Hohenberg, la frontera nunca es estacionaria en el intervalo de coexistencia uniforme-hexagonal I_c , salvo en $\epsilon = \epsilon_0(g_2)$. Cuando $\epsilon = \epsilon_0(g_2)$, los dos patrones tienen la misma "energía".

Capítulo 3

Efectos de bloqueo de fronteras

En la última sección del capítulo anterior se dejó ver que el movimiento de una interfaz en una zona de biestabilidad se traduce en el crecimiento de un patrón sobre otro. Como consecuencia, si consideramos un sistema, por ejemplo, compuesto de una mezcla aleatoria de regiones hexagonales y uniformes, y suponemos que $\epsilon \neq \epsilon_0$, uno de los patrones terminará por ocupar todo el sistema después de un tiempo finito. Una situación análoga en un sistema en equilibrio, es la del fluido de Van der Waals; en una transición de fase de primer orden la fase que se expande corresponde a la fase estable, la que se reduce sería metaestable. Podemos asociar un concepto de orden al hecho de que un patrón termine por ocupar todo el sistema, es decir, que un sistema heterogéneo como el del ejemplo se considera desordenado y al evolucionar hacia una configuración homogénea (un solo patrón) tiende al orden.

Los resultados presentados en el Capítulo 1 son bien conocidos en el estudio de la dinámica de defectos topológicos. En este capítulo mostramos los resultados originales de este trabajo.

Nuestro propósito es mostrar que los estados desordenados de los que hablábamos, pueden existir, ser estacionarios y estables, en contradicción con lo que predice la ecuación (2.110). Es decir que el movimiento de la interfaz puede ser impedido en un intervalo de la región de coexistencia, I_c . Para esto, primero mostramos que los efectos de bloqueo provienen de términos adicionales en las ecuaciones de amplitud que usualmente son despreciados, pero que pueden ser importantes. Son llamados términos “no adiabáticos” porque dependen de la escala rápida de la estructura periódica. Luego, a partir de las nuevas ecuaciones de amplitud, se calcula una expresión corregida de la velocidad y se determina el intervalo donde las interfases no se mueven.

Los efectos de bloqueo (“pinning effects”) que actúan sobre los defectos en fases moduladas, fueron discutidos por primera vez por Pomeau [28], y luego analizados en varios casos [14]. Se ha mostrado en particular que estos efectos pueden ser importantes para interfases bandas-bandas [29] y hexágonos-hexágonos [30].

3.1. Cálculo de los términos no adiabáticos

Para que sea más claro el origen de las llamadas contribuciones no adiabáticas [31], primero hacemos un breve resumen de la deducción de las ecuaciones de amplitud (2.61)-(2.63) hecha en el Capítulo 2.

Para encontrar una solución aproximada de la ecuación modelo bidimensional de Swift-Hohenberg

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \epsilon \psi - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2} (k_0^2 + \Delta)^2 \psi - \psi^3 + g_2 \psi^2, \quad (3.1)$$

se hace un análisis de multiescalas.

Este análisis consiste en desarrollar la ecuación (3.1) en potencias del parámetro de control $\epsilon \ll 1$; primero se desarrolla el operador diferencial $(k_0^2 + \Delta)^2$, considerando que $\psi(x, y, t)$ es función de variables rápidas $\vec{r} = \{x, y\}$ y función de variables lentas $\{X, Y, T\}$ independientes de las rápidas. A continuación, se supone que el parámetro de orden local, ψ , puede escribirse como una serie de potencias

$$\psi = \epsilon^{1/2} \psi_{1/2} + \epsilon \psi_1 + \epsilon^{3/2} \psi_{3/2} + \dots, \quad (3.2)$$

que se sustituye en la ecuación (3.1), obteniendo su expresión en ordenes de $\epsilon^{1/2}$.

En el primer orden $\epsilon^{1/2}$, tenemos la ecuación

$$L_c \psi_{1/2} \equiv (k_0^2 + (\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y})^2) \psi_{1/2} = 0. \quad (3.3)$$

L_c opera únicamente sobre la escala rápida, por lo que la solución de la ecuación (3.3) para una configuración hexagonal es

$$\psi(x, y, t) = A_1(X_1, Y_1, t) e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} + A_2(X_2, Y_2, t) e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} + A_3(X_3, Y_3, t) e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{r}} + c.c., \quad (3.4)$$

donde las amplitudes A_j ($j=1,2,3$) son desconocidas y dependen únicamente de las escalas lentas, *c.c.* denota el complejo conjugado de los primeros tres sumandos. De esta solución es inmediato que $e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}}$, $e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}}$ y $e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{r}}$ pertenecen al núcleo de L_c .

$\psi_{3/2}$ se determina a partir de $\psi_{1/2}$ por la relación

$$L_c \psi_{3/2} = L(\psi_{1/2}) + g_2 \psi_{1/2}^2 - \psi_{1/2}^3, \quad (3.5)$$

donde

$$L = -[\frac{\partial}{\partial T} - 1 + \frac{\xi_0^2}{(4k_0)^2} (2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X})^2] \quad (3.6)$$

es un operador lineal que ha sido derivado en la sección 2.3.2.

Para que la ecuación (3.5) tenga una solución, su parte derecha debe ser ortogonal al núcleo de L_c^\dagger , el adjunto del operador L_c . Como L_c es autoadjunto, entonces la condición de solubilidad es

$$\langle (L(\psi_{1/2}) + g_2\psi_{1/2}^2 - \psi_{1/2}^3) | e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{r}} \rangle = 0 \quad (j = 1, 2, 3). \quad (3.7)$$

De (3.7) se deducen las ecuaciones de amplitud. Por ejemplo, dada la configuración hexagonal-uniforme de la figura 2.10, donde las amplitudes dependen de x solamente, la ecuación para A_1 viene de

$$\begin{aligned} \langle (L(\psi_{1/2}) + g_2\psi_{1/2}^2 - \psi_{1/2}^3) | e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} \rangle &= 0 \\ \int_x^{x+\lambda_0} \frac{1}{\lambda_0} \lim_{l_y \rightarrow +\infty} \int_0^{l_y} \frac{1}{l_y} [L(\psi_{1/2}) + g_2\psi_{1/2}^2 - \psi_{1/2}^3] e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}'} dy' dx' &= 0. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Sustituyendo (3.4) en (3.8) con L dado por (3.6) y expandiendo los términos no lineales, podemos describir (3.8) en dos clases de términos. La primera clase proviene de los términos entre paréntesis rectangulares de la ecuación (3.8) que oscilan como $e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}}$ (llamados resonantes con $e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}}$). Se obtienen de ellos integrales que no involucran términos oscilantes:

$$\int_x^{x+\lambda_0} \frac{1}{\lambda_0} \lim_{l_y \rightarrow +\infty} \int_0^{l_y} \frac{1}{l_y} g(A_j, \bar{A}_j) dy' dx' \quad (j = 1, 2, 3). \quad (3.9)$$

La función g depende de las amplitudes A_j , por lo tanto de las variables lentas.

La segunda clase de términos son llamados no resonantes, son integrales de funciones trigonométricas:

$$n \int_x^{x+\lambda_0} \frac{1}{\lambda_0} \lim_{l_y \rightarrow +\infty} \int_0^{l_y} \frac{1}{l_y} [\sum_{n,m} g_{n,m}(A_j, \bar{A}_j) e^{in k_0 x' + im k_0 y'}] e^{-i k_0 x'} dy' dx', \quad (3.10)$$

donde cada $g_{n,m}(A_j, \bar{A}_j)$ es un producto de amplitudes que viene del desarrollo de los términos no lineales $g_2\psi_{1/2}^2 - \psi_{1/2}^3$, $\psi_{1/2}$ está dado por (3.4). Por ejemplo, de $g_2\psi_{1/2}^2$ se obtienen integrales como

$$2g_2 \int_x^{x+\lambda_0} \frac{1}{\lambda_0} \lim_{l_y \rightarrow +\infty} \int_0^{l_y} \frac{1}{l_y} A_k A_l e^{i(\vec{k}_k + \vec{k}_l - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}'} dy' dx', \quad (3.11)$$

con la notación $A_{-k} = \bar{A}_k$, $\vec{k}_{-k} = -\vec{k}_k$ y $-3 \leq k, l \leq 3$ ($k, l \neq 0$).

Las integrales (3.10) son nulas en el régimen débilmente no lineal porque las A_j son constantes en el intervalo $[x, x + \lambda_0]$, pero pueden ser finitas fuera de este régimen como se ve a continuación.

Dadas las ecuaciones de amplitud (2.61)-(2.63) deducidas en el capítulo anterior, A_j se puede escribir como $A_j(x/\xi)$. La interfaz en la configuración hexagonal-uniforme tiene un ancho ξ que obedece al escalamiento

$$\xi \sim \frac{\xi_0}{\sqrt{|\epsilon|}} \quad \text{ó} \quad \frac{\xi_0}{g_2}, \quad (3.12)$$

donde ξ_0 es la longitud de coherencia. Por lo tanto si $|\epsilon| \ll 1$, $g_2 \ll 1$ y $\xi_0 \sim \lambda_0$, el ancho de la frontera es mucho más grande que la escala de variación λ_0 del patrón. Es decir que en un periodo del patrón, el cambio en la amplitud es despreciable. Entonces la integral (3.10) es siempre 0 (involucra funciones senoidales) y de la condición que (3.9) sea cero, se obtiene la ecuación de amplitud estándar para A_1 a partir de los términos resonantes solamente:

$$g(A_j, \bar{A}_j) = -\frac{\partial A_1}{\partial t} + \epsilon A_1 + 2g_2 \bar{A}_2 \bar{A}_3 - (3 |A_1|^2 + 6 |A_2|^2 + 6 |A_3|^2) A_1 + \xi_0^2 \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 A_1 = 0 .$$

Sin embargo, cuando el parámetro general de control, ϵ , no es arbitrariamente pequeño o si $\xi_0 \ll \lambda_0$, la variación espacial de las amplitudes no es nula en una distancia λ_0 . Esto equivale a que la suposición $\xi \gg \lambda_0$ no se cumple necesariamente. Entonces, las integrales (3.10) pueden contribuir a las ecuaciones de amplitud (los productos $g_{n,m}$ no pueden ser considerados como independientes de la posición).

Dado que en nuestro sistema hemos escogido que la frontera entre la región hexagonal y la región uniforme sea plana y perpendicular a la dirección $\vec{k}_1 = k_0 \hat{x}$, las amplitudes A_j dependen únicamente de x' . Entonces cualquier término en (3.10) con $m \neq 0$ se integra idénticamente a cero y no contribuye a la ecuación de amplitud.

A pesar de que esta condición geométrica elimina una gran cantidad de integrales, restan todas las que cumplen con $n \neq 1$ y $m = 0$. O sea, los exponenciales complejos que dependen exclusivamente de x' . En esta clase, llamamos "subresonantes" a los términos que oscilan con número de onda $\pm k_0$ y los conservamos en la condición de solubilidad. Los términos secundarios oscilan con número de onda lk_0 ($l > 1$) y aunque no integran a cero, los desechamos de las ecuaciones de amplitud por ser despreciables en el cálculo de la velocidad, respecto de los principales. En el Apéndice A se hace un cálculo detallado que nos muestra la validez de este argumento. Un ejemplo de los términos secundarios derivados de $g_2 \psi_{1/2}^2$ es

$$2g_2 \int_x^{x+\lambda_0} \frac{1}{\lambda_0} A_1^2(x') e^{ik_0 x'} dx' . \quad (3.13)$$

Haciendo esta selección de términos para cada una de las direcciones (\vec{k}_1, \vec{k}_2 y \vec{k}_3), encontramos que las condiciones de solubilidad, cuando ϵ no es despreciable respecto de la unidad o cuando $\xi_0 \ll \lambda_0$, quedan como la suma de la ecuación de amplitud estándar y una serie de términos que incorporan explícitamente a la variable espacial x . Después de un cálculo largo obtenemos: (véanse ecuaciones (2.104)-(2.105))

$$\begin{aligned}
\frac{\partial A_1}{\partial t} &= \frac{-\delta F}{\delta \bar{A}_1} \\
&+ \frac{1}{\lambda_0} \int_x^{x+\lambda_0} [e^{-ik_0 x'} (-6(A_1 A_2 A_3 + \bar{A}_1 \bar{A}_2 \bar{A}_3) \\
&+ 2g_2 \sum_{j=1}^3 |A_j|^2) + e^{ik_0 x'} (g_2 A_1^2 - 6A_1 \bar{A}_2 \bar{A}_3)] dx' \quad (3.14)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial A_2}{\partial t} &= \frac{-\delta F}{\delta \bar{A}_2} \\
&+ \frac{1}{\lambda_0} \int_x^{x+\lambda_0} [e^{-ik_0 x'} (3(\bar{A}_1^2 \bar{A}_3 + A_2^2 A_3) + 2g_2 \bar{A}_1 A_2)] dx' . \quad (3.15)
\end{aligned}$$

Y permutando los subíndices 2 y 3 se llega a la ecuación para A_3 (recordemos que $A_2 = A_3$ en nuestro caso):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial A_3}{\partial t} &= \frac{-\delta F}{\delta \bar{A}_3} \\
&+ \frac{1}{\lambda_0} \int_x^{x+\lambda_0} [e^{-ik_0 x'} (3(\bar{A}_1^2 \bar{A}_2 + A_3^2 A_2) + 2g_2 \bar{A}_1 A_3)] dx' . \quad (3.16)
\end{aligned}$$

3.2. Velocidad con contribución no adiabática

En el cálculo de la velocidad de la frontera hexagonal-uniforme, abandonamos el método de “energía” empleado en la sección 2.4.1 a favor de uno más general, pues las ecuaciones (3.14)-(3.16) no tienen una estructura potencial *a priori*. Con este procedimiento no es necesario suponer que las ecuaciones de las amplitudes A_j se derivan funcionalmente del funcional de Lyapunov, pues basta con conocer las ecuaciones (3.14)-(3.16) que se acaban de deducir.

Para derivar la ecuación de movimiento de la frontera multiplicamos la ecuación (3.14) [Ec. (3.15), Ec. (3.16)] por $\partial \bar{A}_1 / \partial t$ [$\partial \bar{A}_2 / \partial t$, $\partial \bar{A}_3 / \partial t$], las sumamos e integramos en la dirección x en el intervalo $[-\infty, +\infty]$.

Los términos del lado izquierdo dan

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{j=1}^3 \left| \frac{\partial A_j}{\partial t} \right|^2 dx \quad (j = 1, 2, 3). \quad (3.17)$$

Los términos del lado derecho se pueden escribir como la suma de una parte de origen potencial POT y otra de origen no adiabático NA :

$$POT = - \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \bar{A}_j}{\partial t} \frac{\delta F}{\delta \bar{A}_j} dx \quad (3.18)$$

$$NA = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \bar{A}_j}{\partial t} TNA(j) dx , \quad (3.19)$$

donde $TNA(j)$ es la parte no adiabática en la ecuación de la amplitud A_j .

Suponemos una vez más que las soluciones se pueden escribir en la forma

$$A_j = A_j(X) \quad (3.20)$$

$$X = x - x_{gb}(t) . \quad (3.21)$$

Entonces

$$\frac{\partial A_j}{\partial t} = -v_{gb} \frac{\partial A_j}{\partial x} . \quad (3.22)$$

Presentamos el cálculo por separado para NA y POT con el fin de distinguir sus contribuciones a la ley de velocidad de la interfaz. De la relación (3.22) y dado que la ecuación (3.17) es un número real, POT se expresa como

$$POT = \frac{v_{gb}}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{j=1}^3 \left[\frac{\delta F}{\delta \bar{A}_j} \frac{\partial \bar{A}_j}{\partial x} + \frac{\delta F}{\delta A_j} \frac{\partial A_j}{\partial x} \right] dx , \quad (3.23)$$

donde se reconoce la derivada total de f (recordemos que $F = \int f dr$), por lo que

$$POT = \frac{v_{gb}}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f}{\partial x} dx = \frac{v_{gb}}{2} (f_{\infty}(A) - f_{\infty}(B)) . \quad (3.24)$$

Si despreciamos la parte no adiabática, ecuación (3.19), e igualamos las ecuaciones (3.17) y (3.18) se obtiene la ley de movimiento

$$v_{gb} = \frac{1}{2} \frac{f_{\infty}(A) - f_{\infty}(B)}{\int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{j=1}^3 \left| \frac{\partial A_j}{\partial x} \right|^2 dx} ,$$

recuperando la expresión de la velocidad, ecuación (2.107), que obtuvimos con el argumento de “energía”.

Ahora calculamos la contribución de NA dado por (3.19) a la ley de movimiento v_{gb} . Primero explicitamos NA:

$$\begin{aligned} NA &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \bar{A}_1}{\partial t} TNA(1) dx \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \bar{A}_2}{\partial t} TNA(2) dx \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \bar{A}_3}{\partial t} TNA(3) dx \equiv I + II + III . \end{aligned} \quad (3.25)$$

Cada sumando de NA está asociado a una amplitud A_j ($j=1,2,3$) y $TNA(j)$ es la corrección a la ecuación de amplitud correspondiente. A continuación se detalla el cálculo del término asociado a A_1 ($j=1$). Cálculos análogos al de I , dan las expresiones de II y III , por lo tanto se omiten aquí.

En la ecuación (3.25), I está dado por

$$\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\lambda_0} \frac{\partial \bar{A}_1}{\partial t} \int_x^{x+\lambda_0} [e^{-ik_0x'} (-6(A_1A_2A_3 + \bar{A}_1\bar{A}_2\bar{A}_3) \\
&\quad + 2g_2(|A_1|^2 + |A_2|^2 + |A_3|^2)) \\
&\quad + e^{ik_0x'} (g_2A_1^2 - 6A_1\bar{A}_2\bar{A}_3)] dx' dx .
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Expresando $\partial A_1/\partial t = -v_{gb}\partial A_1/\partial x$ e integrando por partes se llega a

$$I = \frac{v_{gb}}{\lambda_0} \int_{-\infty}^{+\infty} A_1 \cos(k_0x) [-18(A_1A_2A_3) + g_2(2 \sum_{j=1}^3 A_j^2 + A_1^2)]_{x+\lambda_0} dx .$$

Luego sustituimos al término entre los paréntesis cuadrados, por su serie de Taylor a primer orden alrededor de x . Esta sustitución es válida si A_j varía poco en $[x, x+\lambda_0]$. Se obtiene

$$I = v_{gb} \int_{-\infty}^{+\infty} A_1 \cos(k_0x) \frac{\partial(-18(A_1A_2A_3) + g_2(2 \sum_{j=1}^3 A_j^2 + A_1^2))}{\partial x} dx .$$

Dado el *ansatz* (3.20)-(3.21), hacemos el cambio de variable $x = X + x_{gb}(t)$, obteniendo

$$I = v_{gb} \int_{-\infty}^{+\infty} A_1 \cos(k_0(X + x_{gb}(t))) \frac{\partial(-18(A_1A_2A_3) + g_2(2 \sum_{j=1}^3 A_j^2 + A_1^2))}{\partial X} dX \tag{3.27}$$

Las integrales *II* y *III* tienen una forma similar a la de *I*. Las tres (*I*, *II*, *III*) son funciones de $x_{gb}(t)$ mediante el término trigonométrico de la ecuación (3.27). De la ecuación (3.27) se cumple la ecuación diferencial

$$\frac{d^2(NA)}{dx_{gb}^2} = -k_0^2(NA) . \tag{3.28}$$

Entonces

$$NA = p \cos(k_0x_{gb}(t) + \varphi) .$$

La constante p se obtiene de la ecuación (3.27) y de las ecuaciones similares para *II* y *III*:

$$\begin{aligned}
p &= \max_{\Theta} \int_{-\infty}^{+\infty} \cos(k_0X + \Theta) [A_1 \frac{\partial(-18(A_1A_2^2) + g_2(3A_1^2 + 4A_2^2))}{\partial X} \\
&\quad + 2A_2 \frac{\partial(3(A_1^2A_2 + A_2^3) + 2g_2A_1A_2)}{\partial X}] dX .
\end{aligned} \tag{3.29}$$

En resumen, igualando la relación (3.17) con (3.18) y (3.19), se obtiene la velocidad con sus varias contribuciones:

$$\mu v_{gb} = -\frac{1}{2}A_0^2 \left[\frac{45}{2}A_0^2 - 4g_2A_0 - 3\epsilon \right] + p \cos(k_0x_{gb} + \varphi) . \quad (3.30)$$

Con

$$\mu = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{j=1}^3 \left| \frac{\partial A_j}{\partial x} \right|^2 dx . \quad (3.31)$$

3.3. Comentarios sobre el resultado

La velocidad v_{gb} , incluida la contribución no adiabática, se escribe genéricamente

$$v_{gb} = \frac{\Delta f_\infty}{\mu} + \frac{p}{\mu} \cos(k_0x_{gb}) . \quad (3.32)$$

Donde Δf_∞ es la diferencia de “energías libres” entre los patrones uniforme y hexagonal que se calculó en la sección 2.4.2.

Haciendo una analogía mecánica, podemos decir que el movimiento de la frontera imita el de una partícula viscosa que se mueve bajo el potencial efectivo V_{eff} . Es decir que

$$\mu \dot{x}_{gb} = -\frac{\partial V_{eff}}{\partial x} \quad (3.33)$$

$$V_{eff} = -\Delta f_\infty x - \frac{1}{k_0} p \sin(k_0x) + V_0 , \quad (3.34)$$

con V_0 una constante arbitraria. Según la forma de $V_{eff}(x)$, existen dos regímenes de movimiento de la frontera. En la figura 3.1 se muestra como se modifica $V_{eff}(x)$ según el valor de Δf_∞ y p ; cuando $|\Delta f_\infty| \geq p$, el potencial no tiene mínimos, por lo tanto la interfaz avanza siempre. Cuando $|\Delta f_\infty| \leq p$, el potencial V_{eff} adquiere una serie de mínimos locales separados entre si por una distancia $2\pi/k_0$. En estos mínimos locales, la velocidad de la frontera es nula. Después de alcanzar tales posiciones, la frontera está bloqueada, por lo tanto en esta situación el patrón hexagonal no se expande ni se contrae. Por este efecto, a p se le llama potencial de bloqueo (“pinning potential”). De hecho, p representa la magnitud del potencial de bloqueo.

De la aproximación de p obtenida en el Apéndice A, a partir de la ecuación (3.29), tenemos que la dependencia de p respecto del ancho de la frontera ξ es

$$p \sim A_0^4 e^{-c\xi k_0} = A_0^4 e^{-c\frac{1}{\Xi}} \sim \epsilon^2 e^{-\xi_0/\lambda_0\sqrt{\epsilon}} \quad \Xi \equiv \frac{1}{\xi k_0} , \quad (3.35)$$

donde k_0 es el vector de onda base del patrón hexagonal, c es una constante de orden unidad. Lo que es importante notar en esta expresión es su no analiticidad, que hace

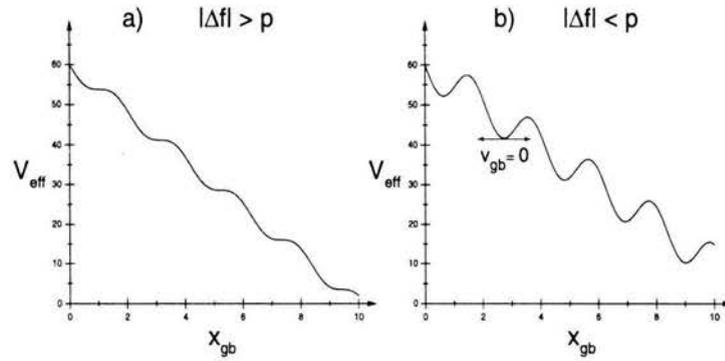


Figura 3.1: La forma de V_{eff} se modifica según el valor relativo de Δf_∞ y p . En a) $\Delta f_\infty > p$, no existen mínimos locales del potencial y la velocidad nunca es nula: la frontera avanza a “tumbos” pero nunca se detiene; en b) $\Delta f_\infty < p$, V_{eff} tiene mínimos locales en los que $v_{gb} = 0$: la interfaz se encuentra bloqueada.

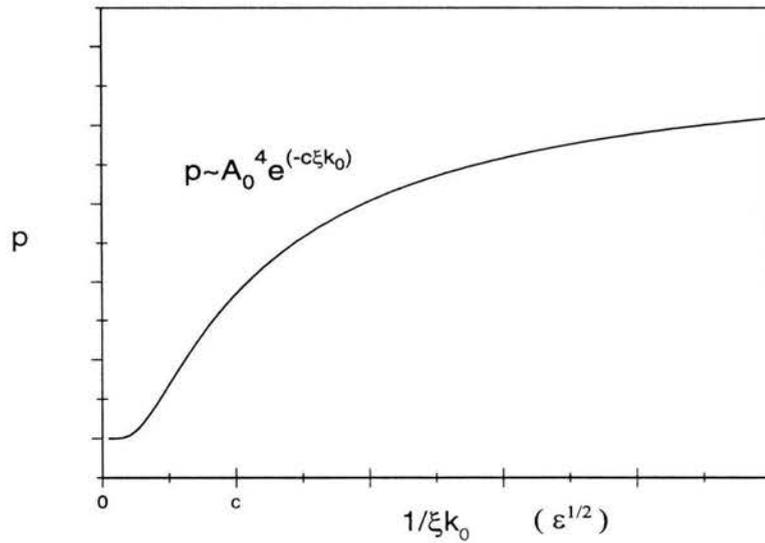


Figura 3.2: El potencial de bloqueo p muestra un comportamiento no analítico cuando la escala de variación de las amplitudes, ξ , tiende hacia infinito o $1/\xi k_0 \sim \sqrt{\epsilon} \rightarrow 0$.

que p crezca de manera dramática como función de ξ^{-1} ; es decir que la magnitud de p , respecto de los parámetros físicos del sistema, es prácticamente una función escalón (véase figura 3.2).

Capítulo 4

Resultados numéricos

En los capítulos anteriores se han deducido expresiones semianalíticas para la velocidad de la interfaz hexagonal-uniforme. En este capítulo mostraremos como se determinó numéricamente la dinámica de la frontera, a partir del resultado de la aproximación no adiabática, y como se compara esta con la que se obtiene de la resolución numérica directa de la ecuación de Swift-Hohenberg (2.15).

Para llegar a esto resolvimos las ecuaciones de amplitud (2.61)-(2.63) de primer orden, sin efectos no adiabáticos, obteniendo los perfiles numéricos estacionarios de las amplitudes A_j ($j = 1, 2, 3$). A partir de estos cálculos se verificaron algunos resultados analíticos sobre la velocidad presentados en el Capítulo 2 (véase figura 2.11). Como la ley de movimiento con contribución no adiabática (3.30) contiene el nuevo término $p \cos(k_0 x_{gb} + \phi)$, donde p depende de los mismos perfiles A_1, A_2, A_3 , evaluamos la intensidad p del potencial empleando los perfiles numéricos obtenidos previamente.

Al incluir las correcciones no adiabáticas contenidas en p , fijando g_2 , encontramos que la frontera puede ser bloqueada en un intervalo del parámetro ϵ , cuyo tamaño aumenta a medida que la longitud de coherencia ξ_0 (véanse ecuaciones (2.15),(2.61)-(2.63)) decrece y se hace mucho más pequeña que la longitud de onda, λ_0 , del patrón. Para un valor $\xi_0^p(g_2)$ la frontera tiene velocidad cero en todo el intervalo de coexistencia, $I_c = [\epsilon_m, 0]$, estableciendo lo que llamamos el régimen de bloqueo total.

El análisis que sigue permite concluir que el avance de los frentes puede bloquearse únicamente en el régimen fuertemente no lineal ($\xi_0 \ll \lambda_0$). Sin embargo, este resultado tiene principalmente un valor cualitativo pues los cálculos se basan en una aproximación débilmente no lineal. Una comparación con los resultados de la solución numérica directa del modelo de Swift-Hohenberg se hará en la sección 4.1.5.

4.1. Cálculo numérico de la magnitud p del potencial de bloqueo

4.1.1. Solución de las ecuaciones de amplitud de primer orden

Dada la simetría $A_2 = A_3$ de nuestro sistema (véase figura 2.10) y eligiendo la fase del patrón de tal manera que las A_j sean reales, las ecuaciones de amplitud del sistema de base (2.61)-(2.63) se reducen a

$$\begin{aligned}\frac{\partial A_1}{\partial t} &= \epsilon A_1 + 2g_2 A_1 A_2 - (3A_1^2 + 6A_2^2 + 6A_3^2)A_1 + \xi_0^2 \frac{\partial^2 A_1}{\partial x^2} \\ \frac{\partial A_2}{\partial t} &= \epsilon A_2 + 2g_2 A_2^2 - (3A_2^2 + 6A_1^2 + 6A_2^2)A_2 + \xi_0^2 \frac{\partial^2 A_2}{\partial x^2} .\end{aligned}\quad (4.1)$$

El sistema de ecuaciones (4.1) corresponde al régimen débilmente no lineal de la ecuación de Swift-Hohenberg y se aplican cuando $|\epsilon| \ll 1$, $\xi_0 \ll \lambda_0$. Como es evidente, este sistema de ecuaciones acopladas no se puede resolver analíticamente. Los resultados numéricos que se presentan más adelante fueron obtenidos discretizando las derivadas espaciales y temporales de las ecuaciones (4.1). La discretización de la derivada temporal se hizo con el método de Euler y aproximamos las segundas derivadas espaciales con una fórmula de cinco puntos. Veamos rápidamente cómo hicimos esto.

Rescribiendo el par de ecuaciones (4.1) simplemente como

$$\frac{\partial A_1}{\partial t} = F(A_1, A_2) \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial A_2}{\partial t} = G(A_1, A_2) , \quad (4.3)$$

las series de Taylor (primeros dos términos) de A_1 y A_2 al rededor del punto (x, t_0) son

$$\begin{aligned}A_1(x, t) &= A_1(x, t_0) + (t - t_0) F(A_1, A_2) \\ A_2(x, t) &= A_2(x, t_0) + (t - t_0) G(A_1, A_2) .\end{aligned}\quad (4.4)$$

Definimos el intervalo mínimo de tiempo $\Delta t \equiv t - t_0$, de donde $t \equiv t_0 + \Delta t$. Enseguida se discretiza la coordenada espacial x en un paso que llamamos Δx , es decir que dos puntos consecutivos del espacio, x_i y x_{i+1} , están separados por una distancia Δx .

La aproximación de las segundas derivadas espaciales se hizo usando una fórmula que evalúa la función $\partial^2 A_1 / \partial x^2$ en el punto x_i , empleando el valor de A_1 en los puntos x_{i-2} , x_{i+2} , x_{i-1} , x_{i+1} y x_i :

$$\frac{\partial^2 A_1}{\partial x^2}(x_i) = \left(\frac{\lambda_0}{\Delta x}\right)^2 \frac{1}{12} [-A_1(x_{i+2}) - A_1(x_{i-2}) + 16A_1(x_{i+1}) + 16A_1(x_{i-1}) - 30A_1(x_i)] \quad (4.5)$$

Aunque una aproximación con tres puntos podría ser suficiente, la que usamos nosotros nos garantiza de una vez una buena precisión.

En resumen, el algoritmo para calcular numéricamente las amplitudes en el tiempo t se escribe

$$A_1(i, t + \Delta t) = A_1(i, t) + \Delta t F(A_1(i-2, i-1, i, i+1, i+2, t), A_2(i-2, i-1, i, i+1, i+2, t))$$

$$A_2(i, t + \Delta t) = A_2(i, t) + \Delta t G(A_1(i-2, i-1, i, i+1, i+2, t), A_2(i-2, i-1, i, i+1, i+2, t)),$$

donde el subíndice i denomina el punto x_i . En el tiempo $t = 0$, tomamos una condición inicial analítica inspirada en la solución aproximada conocida de las ecuaciones de amplitud del sistema bandas-uniforme. Esta condición es una tangente hiperbólica, pues la variación espacial de esta función es propicia para describir una frontera que, por definición, es la zona de transición entre los dos valores, A_0 y 0, que toman las amplitudes. El programa `perfil` en lenguaje FORTRAN de este algoritmo, se encuentra en el Apéndice B.

Para distintos valores del parámetro ϵ , obtuvimos los perfiles de las amplitudes en un tiempo final t_f tal que se ha alcanzado un régimen estacionario, es decir, que la frontera hexagonal-uniforme se mueve con velocidad constante. Registramos la evolución temporal de la interfaz, siguiendo la posición del punto $x_{gb}(t)$ desde $t = 0$ hasta $t = t_f$. Definimos x_{gb} como $A(x = x_{gb}) = A_0/2$ (véase figura 4.1 a)).

De la sección 2.4.2, sabemos que la velocidad de la interfaz se anula en $\epsilon_0 \equiv \epsilon = -8g_2^2/135$, es positiva si $\epsilon > \epsilon_0$ y negativa cuando $\epsilon < \epsilon_0$. Los cálculos numéricos confirman este comportamiento; en la figura 4.1 se representa $x_{gb}(t)$ para tres valores de ϵ en el intervalo I_c . La frontera se detiene justo cuando $\epsilon = \epsilon_0$, pues la pendiente de la función $x_{gb}(t)$ es nula después de un tiempo suficientemente largo. Una pendiente positiva o negativamente constante se establece en los otros dos casos, mostrando respectivamente el signo de v_{gb} .

4.1.2. Calculando p

Para determinar el valor numérico de p , sustituimos los perfiles calculados numéricamente en la igualdad (3.29). La magnitud p del potencial es en principio una función de las amplitudes A_i que solucionan las ecuaciones (3.14)-(3.16) con contribución no adiabática. Para simplificar el análisis, los perfiles que elegimos sustituir en (3.29) son los perfiles soluciones de (2.61)-(2.63) (sin contribución no adiabática), es decir las soluciones de las ecuaciones de amplitud de primer orden. La aproximación que supone emplear estos perfiles con $v_{gb}(\epsilon) \neq 0$ en una ecuación que prevé la ocurrencia de $v_{gb}(\epsilon) = 0$, se justifica suponiendo que la forma de las amplitudes (véase figura 4.1) no depende importantemente del estado de sus velocidades. En el Apéndice C se puede consultar el código del programa `potencial` en lenguaje FORTRAN que se escribió para calcular p .

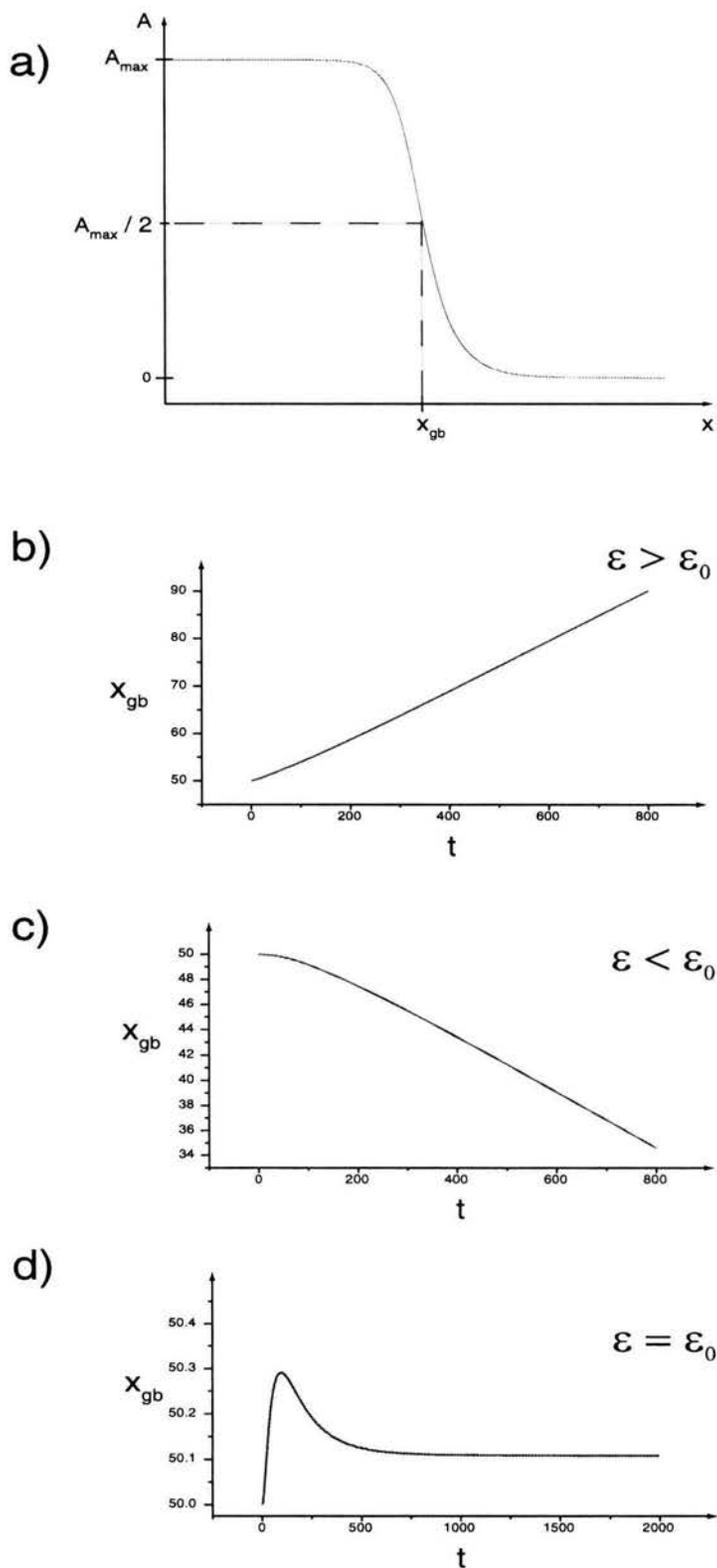


Figura 4.1: a) Perfil numérico de la amplitud A_1 después de un tiempo largo, $\epsilon = -0.003$, $g_2 = 0.4$. b), c), d) Posición x_{gb} de la frontera con respecto al tiempo para tres valores distintos del parámetro ϵ , aquí $g_2 = 0.4$. Es notorio que la velocidad $v_{gb} = dx_{gb}/dt$ es una función monótona creciente de ϵ .

Más adelante mostraremos que, cuando la longitud de coherencia ξ_0 es menor que un valor característico, p es suficientemente grande para que la interfaz hexagonal-uniforme se detenga en todo el intervalo de coexistencia, I_c , contrariamente al diagrama de la figura 2.11.

4.1.3. Regímenes dinámicos

De acuerdo con la ecuación (3.32), una vez calculado p , debemos de compararlo con la magnitud $|F| \equiv \Delta f_\infty$ de la “fuerza externa” para averiguar el estado de movimiento de la interfaz. Consideramos que ϵ y ξ_0 son los dos parámetros importantes del problema. En la figura 4.2 se grafican $|F|$ y p como funciones de ϵ . Escogimos $g_2 = 0.3$ sin restringir la generalidad. La constante g_2 de efectos no Boussinesq impone la escala del intervalo de coexistencia (podríamos graficar los resultados como función del parámetro reducido ϵ/g_2^2), pero no afecta la forma de las amplitudes. El potencial p se grafica también para distintos valores de la longitud de coherencia ξ_0 .

Para un valor fijo de ξ_0 , la intersección de las curvas $|F|$ y p define tres intervalos en los que la dinámica es distinta. En el intervalo $\epsilon_{sup} < \epsilon < 0$, donde $|F| > p$, el patrón hexagonal avanza para cubrir toda la extensión del sistema, mientras que en $\epsilon_m < \epsilon < \epsilon_{inf}$ el patrón uniforme ($\psi = 0$) prevalece. En un intervalo $\epsilon_{inf} < \epsilon < \epsilon_{sup}$, se observa un régimen donde $v_{gb} = 0$: $p > |F|$ y la interfaz está bloqueada. Esta posibilidad se anunció en la sección 3.3, ver también la figura 3.1. A medida que la longitud de coherencia ξ_0 incrementa, la región $\epsilon_{inf} < \epsilon < \epsilon_{sup}$ donde la interfaz no avanza disminuye de tamaño; por tanto podemos decir que los efectos de bloqueo aumentan a medida que ξ_0 decrece y se aleja del valor de λ_0 .

Por debajo de un valor determinado de la longitud de coherencia ξ_0 , notado $\xi_0^{(p)}$, se tiene que $p > |F|$ en todo el intervalo I_c de coexistencia. Esto es, las fronteras hexagonal-uniforme tienen $v_{gb} = 0$ para todo ϵ , a esto llamamos régimen de bloqueo total. Para cada valor de la constante no Boussinesq g_2 existe un único valor de $\xi_0^{(p)}$ en que se establece este régimen. En la figura 4.3 se grafica $\xi_0^{(p)}$ en función de g_2 , la relación es lineal. Encontramos numéricamente

$$\frac{\xi_0^{(p)}}{\lambda_0} \simeq 0.158g_2 . \quad (4.6)$$

En la figura 4.4 se muestra el ancho relativo del intervalo de bloqueo como función de $\xi_0/\xi_0^{(p)}$. La curva teórica proviene del presente análisis débilmente no lineal de la ecuación de Swift-Hohenberg, la curva (llamada numérica) se obtuvo de resolver la misma ecuación con un método numérico directo.

4.1.4. Validez de los resultados

La relación (4.6) entre la longitud de coherencia “crítica”, $\xi_0^{(p)}$, y el parámetro g_2 , muestra que el régimen de bloqueo es posible cuando ξ_0 es más pequeño que λ_0 .

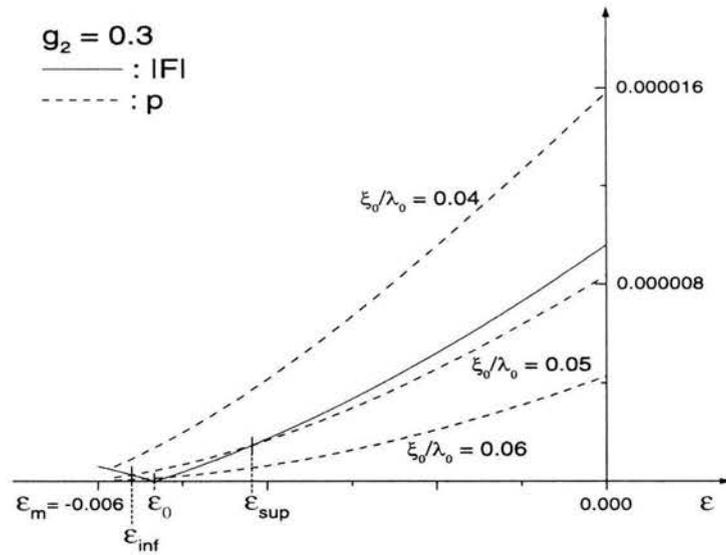


Figura 4.2: Intensidad de la fuerza $|F|$ y del potencial de bloqueo p como función de ϵ . p es también una función de la longitud de coherencia, ξ_0 .

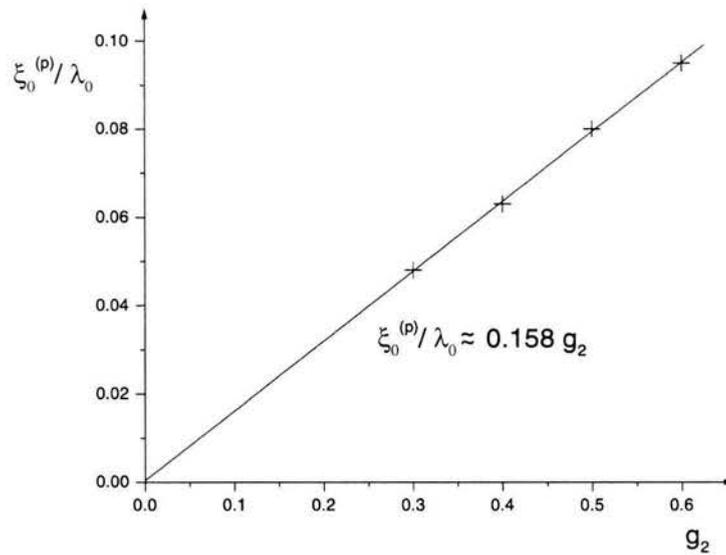


Figura 4.3: Se representa la longitud de coherencia de bloqueo, $\xi_0^{(p)}$, como función de g_2 . La interfaz tiene $v_{gb} = 0$ en todo I_c si $\xi \leq \xi_0^{(p)}$.

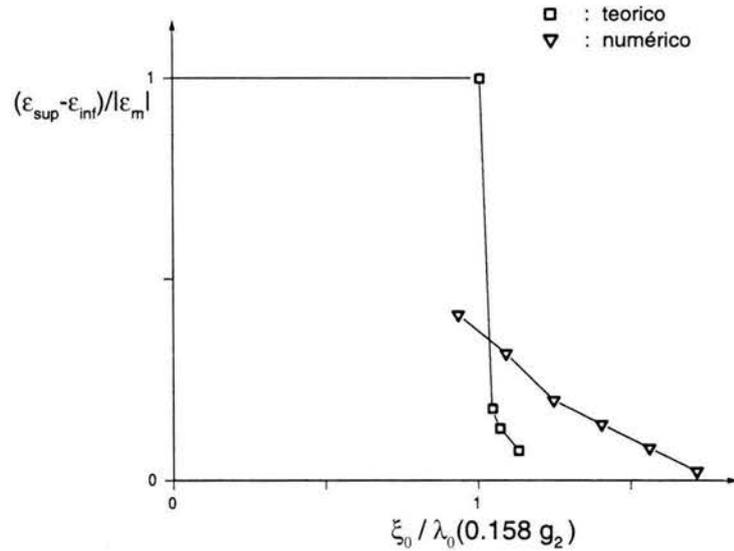


Figura 4.4: Aquí se muestra el ancho relativo del intervalo de bloqueo como una función de $\xi_0^{(p)}/(0.158g_2\lambda_0)$. La curva teórica imita el comportamiento de la curva numérica, que es más suave.

Recordemos que la escala de variación de las amplitudes, ξ , o el ancho de la interfaz, es aproximadamente dada por la ley de escala

$$\xi \sim \frac{\xi_0}{g_2}, \quad (4.7)$$

por lo que inmediatamente se deduce que el régimen de bloqueo sólo se alcanza cuando

$$\xi \leq 0.158\lambda_0 \quad (4.8)$$

$$\text{ó } \xi \ll \lambda_0. \quad (4.9)$$

Esta condición es exactamente opuesta a la que nos permitió deducir las ecuaciones de amplitud no adiabáticas, donde se supone que el ancho de la interfaz es mucho mayor que λ_0 . De hecho, (4.9) define el comportamiento fuertemente no lineal de la ecuación de Swift-Hohenberg, donde las ecuaciones (3.14)-(3.15) y lo que se deduce de ellas no es válido. Con el objetivo de saber en que medida los resultados de la sección describen la dinámica real de la interfaz, se resolvió la ecuación de Swift-Hohenberg con un método numérico directo, en la siguiente sección se abunda sobre esta comparación.

4.1.5. Resultados numéricos para dos dimensiones

Los resultados numéricos que se presentan en esta sección se obtuvieron resolviendo la ecuación (2.15) usando un método pseudo espectral y un procedimiento de integración temporal descrito en [32]. El espacio está discretizado en una malla cuadrada con 2048 nodos a lo largo de la dirección \hat{x} , 128 nodos a lo largo de \hat{y} , y condiciones de frontera periódicas. La condición inicial es un dominio rectangular de patrón hexagonal de longitud 1028 y ancho 128, que se encuentra entre dos regiones de conducción con $\psi = 0$. Las dos interfases son paralelas a la dirección \hat{y} y coinciden con un frente del patrón hexagonal (interfase facetada). El intervalo Δx es la unidad espacial. El periodo del patrón $\lambda_0 = 2\pi/k_0$ es $4\sqrt{3}\Delta x$.

Para determinar si las interfases se encuentran bloqueadas o no, se calculó la evolución temporal de la cantidad

$$a(t) = \int_0^{l_x} \int_0^{l_y} \frac{\psi^2}{\lambda_0 l_y} dx dy, \quad (4.10)$$

donde l_x y l_y son las dimensiones del sistema. La función $a(t)$ está directamente relacionada con las posiciones relativas de las interfases, pues es proporcional a la longitud del patrón hexagonal.

La figura 4.5 muestra las transiciones entre los regímenes de movimiento y de bloqueo a medida que cambia ϵ , para g_2 y ξ_0 dados. Como se esperaba, la superficie hexagonal se expande, permanece del mismo tamaño o se contrae. Cuando las fronteras avanzan o retroceden, el movimiento es notoriamente ondulado, tal y como predice cualitativamente la ecuación (3.30)

$$\mu v_{gb} = -\frac{1}{2}A_0^2 \left[\frac{45}{2}A_0^2 - 4g_2A_0 - 3\epsilon \right] + p \cos(k_0 x_{gb} + \varphi). \quad (4.11)$$

A partir de la condición inicial descrita en el primer párrafo, se dejó evolucionar el sistema por un tiempo numérico $t=8000$. El estado final se muestra en la figura 4.6 para los mismos valores de ϵ , g_2 y ξ_0 que en la figura 4.5.

En la figura 4.7 se muestra el diagrama (ϵ, ξ_0) de estabilidad de la frontera hexagonal uniforme; el grupo de curvas N (“Numéricas”) proviene de la aplicación del método numérico descrito en los párrafos anteriores, las curvas T (“Teóricas”) se obtuvieron de la aproximación descrita en los Capítulos 1 y 2. Dada una longitud de coherencia ξ_0 , T y N dividen al diagrama 4.7 en tres o cuatro zonas dinámicas distintas. Veamos cuáles son las diferencias y similitudes entre los resultados numéricos y teóricos:

- Si $\epsilon < \epsilon_m$, el patrón uniforme ($\psi = 0$) es la única solución estable. El ϵ_m encontrado con el análisis débilmente no lineal es independiente de la longitud de coherencia y difiere en más del doble del encontrado numéricamente en el régimen fuertemente no lineal ($\xi_0 \ll \lambda_0$). Sin embargo, en el límite $\xi_0 \rightarrow \lambda_0$, el valor numérico tiende al valor teórico $\epsilon_m^{(te)}$.

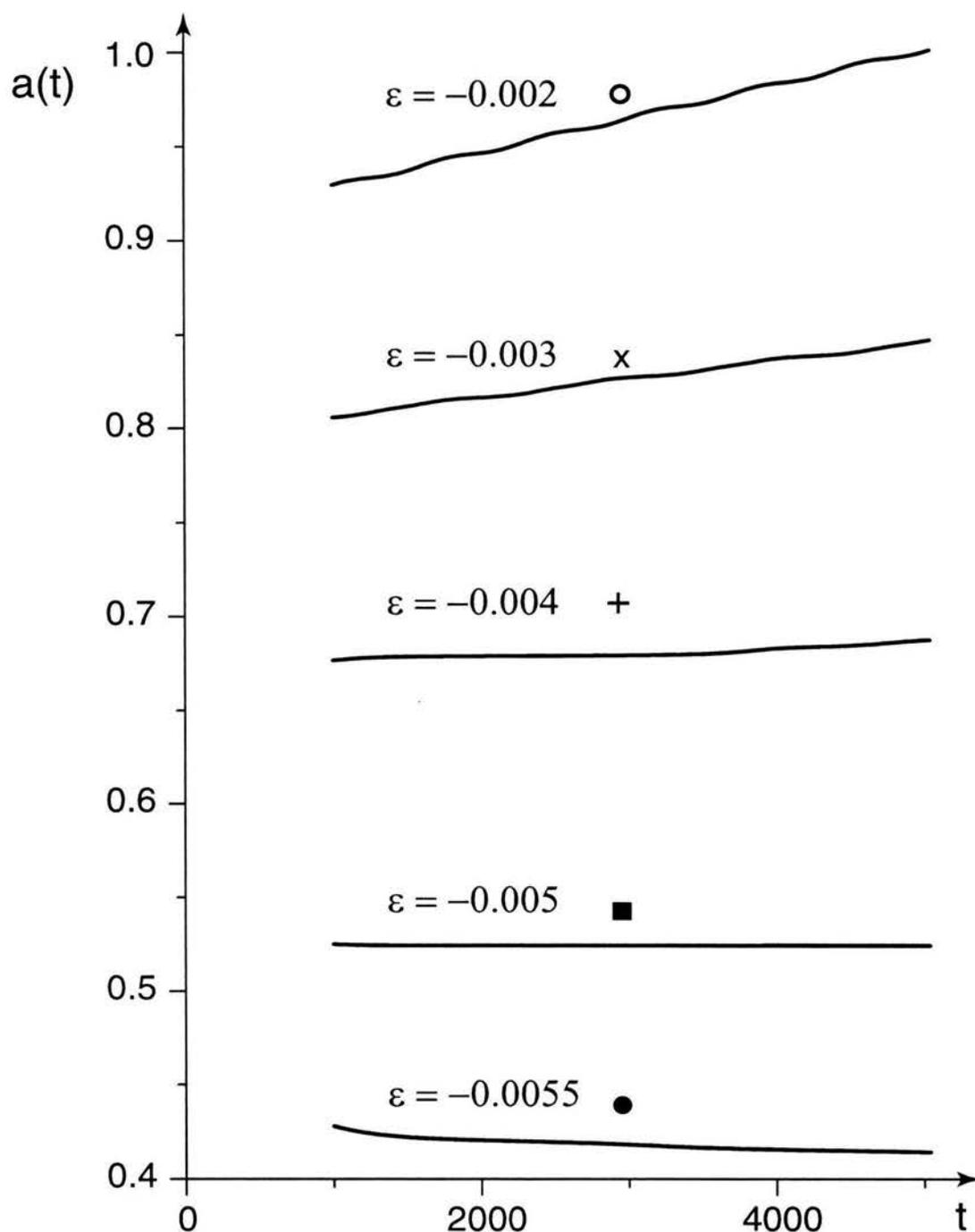


Figura 4.5: Posición de una interfaz como función del tiempo, obtenida de la resolución numérica de la ecuación (2.15), para varios valores del parámetro de control, ϵ . Las tres curvas superiores muestran cómo la frontera avanza sobreponiéndose al potencial de bloqueo, el dominio hexagonal crece a expensas de la región de conducción ($\epsilon > \epsilon_{sup} \simeq -0.0038$). La curva siguiente corresponde a una interfaz bloqueada ($\epsilon_{inf} < \epsilon < \epsilon_{sup}$), y la inferior al retroceso del patrón hexagonal ($\epsilon_m < \epsilon < \epsilon_{inf}$). Aquí $\xi_0 = 0.04$ y $g_2 = 0.2$. Cada curva corresponde a un punto en el diagrama (ϵ_0, ξ_0) de la figura 4.7.

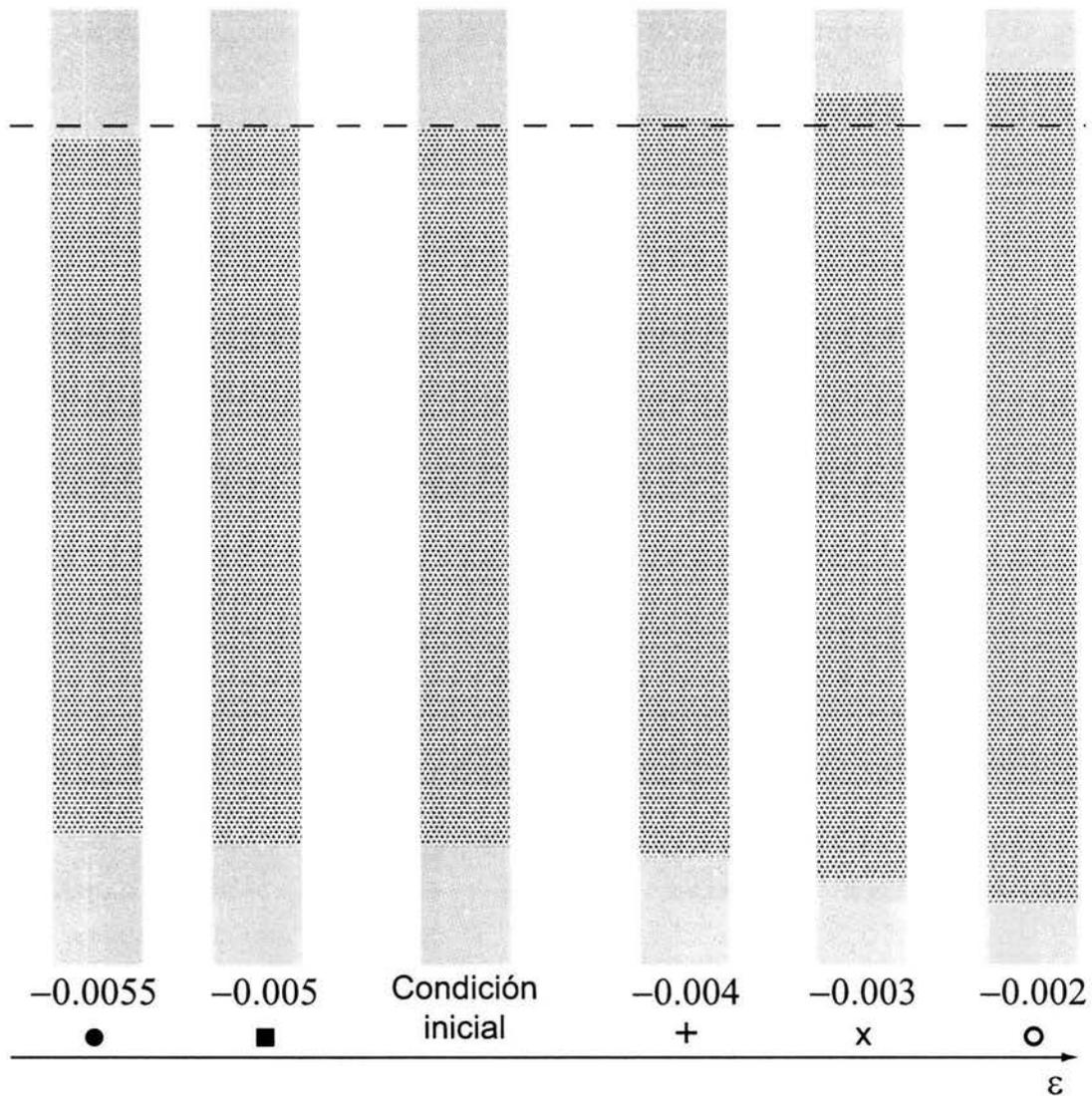


Figura 4.6: Se permitió que el sistema evolucionara libremente por un tiempo numérico $t=8000$. Aquí mostramos los estados finales para cinco valores de ϵ en el intervalo de coexistencia. Se aprecia claramente como el dominio hexagonal crece, disminuye o permanece del mismo tamaño. Aquí $\xi_0 = 0.04$ y $g_2 = 0.2$. Cada curva corresponde a un punto en el diagrama (ϵ_0, ξ_0) de la figura 4.7.

- Entre las curvas ϵ_m y ϵ_{inf} , el patrón hexagonal retrocede a favor de la solución $\psi = 0$. En ambos diagramas estas curvas convergen en el límite $\xi_0/\lambda_0 \rightarrow 0$.
- El bloqueo de la interfaz sucede en la región comprendida entre ϵ_{inf} y ϵ_{sup} . A medida que $\xi_0 \rightarrow \lambda_0$, ambas curvas convergen al valor ϵ_0 (aquí notado $\epsilon_0^{(te)}$) conocido desde la sección 2.4.2. En el régimen débilmente no lineal ($\xi_0 \sim \lambda_0$), el intervalo de bloqueo es sumamente pequeño, imposible de determinar en la práctica. Cuando ξ_0/λ_0 es pequeño, el diagrama N se distingue del T, en que no muestra la aparición del régimen de bloqueo total, es decir, que no existe un $\xi_0^{(p)}$ tal que $v_{gb} = 0$ en todo el intervalo de coexistencia, $I = [\epsilon_m; 0]$. No obstante, el intervalo de bloqueo en N crece desde cero hasta ser comparable con I_c , ver también la figura 4.4. Las curvas ϵ_{inf} y ϵ_{sup} divergen alrededor del mismo valor característico ξ_0^p .
- A la derecha de ϵ_{sup} , la solución hexagonal se expande sobre el estado uniforme.

Por todo lo anterior podemos afirmar que la descripción de la dinámica de una frontera hecha en los Capítulos 1 y 2, reproduce cualitativamente los resultados numéricos presentados en esta sección. Desgraciadamente, la dinámica deducida de las ecuaciones (2.61)-(2.63) con contribución no adiabática no nos permite predecir más que el orden de magnitud correcto de los valores de transición ϵ_{inf} , ϵ_{sup} y $\xi_0^{(p)}$.

4.2. La dinámica de las fronteras y la estabilidad de los estados desordenados

Capítulos atrás mencionamos que la inmovilidad de las fronteras es una de las explicaciones posibles para la estabilización de configuraciones desordenadas. De la figura 4.7 podemos concluir que esto es posible cuando el valor de la longitud de coherencia es del orden de ξ_0^p y que por encima de este valor, cuando las curvas ϵ_{inf} y ϵ_{sup} convergen, no hay posibilidad de que existan configuraciones mezcladas.

Para ilustrar estos resultados, hemos resuelto numéricamente la ecuación de Swift-Hohenberg (2.15) en dos regiones del plano (ϵ, ξ_0) de la figura 4.7, con $g_2 = 0.2$ y condiciones iniciales aleatorias. $\psi(\vec{r}, t = 0)$ es un campo aleatorio gaussiano con $\langle \psi \rangle = 0$ y $\langle \psi^2 \rangle = \alpha A_0^2$, con α una constante ajustable de orden unidad. Los cálculos se realizaron en una malla de 256×256 nodos, durante un periodo de tiempo suficiente para alcanzar un estado estacionario. Fijamos el valor de la longitud de coherencia $\xi_0 = 0.04\lambda_0$.

En la región limitada por las curvas ϵ_{inf} y ϵ_{sup} , donde las interfases hexagonal-uniforme están bloqueadas, las configuraciones mezcladas de regiones hexagonales y cúmulos de puntos tienen tiempos de vida largos. En la figura 4.8 se muestra la evolución de un estado inicial aleatorio en $\epsilon = -0.00453$. Las fronteras regulares o (faceteadas) en el estado intermedio 4.8 a) son estáticas. Aquellas que no lo son, avanzan

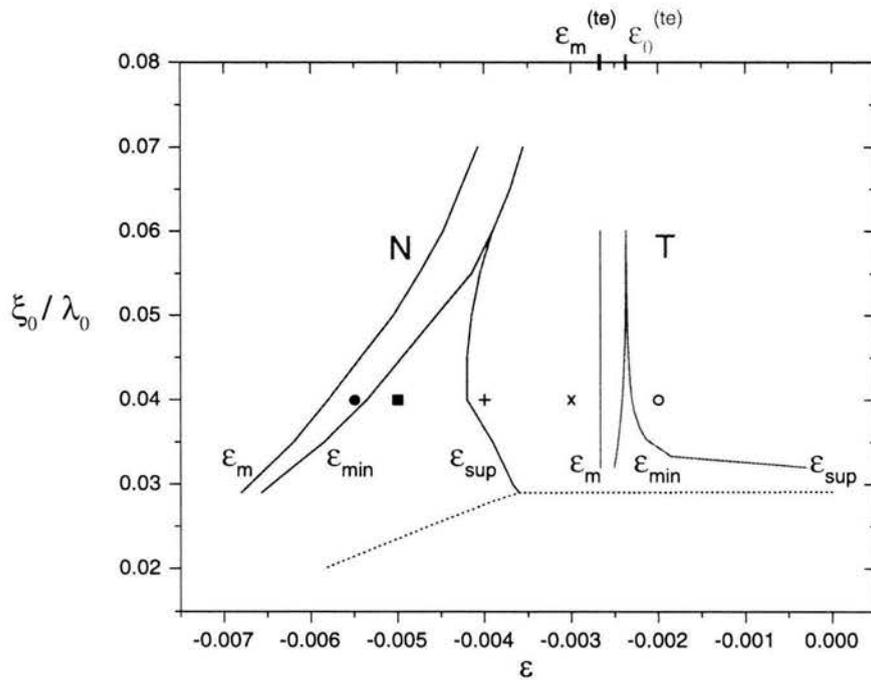


Figura 4.7: Diagramas dinámicos de la interfaz hexagonal-uniforme. Las curvas N fueron obtenidas numéricamente mientras que el diagrama T viene del análisis débilmente no lineal y su corrección no adiabática ($\xi_0 \sim \lambda_0$). Aquí $g_2 = 0.2$, pero no es relevante para la forma de las curvas pues únicamente establece las escalas horizontal y vertical según las ecuaciones (2.100) y (4.6).

de manera que se complete un dominio hexagonal regular con fronteras faceteadas. Cuando esto sucede se detienen. De hecho, podemos mostrar que las fronteras tienen que ser faceteadas para ser estáticas. Como se ve en el cálculo de los términos no adiabáticos de las ecuaciones de amplitud (sección 3.1), si ninguno de los números de onda k_i del patrón hexagonal coincide con la dirección perpendicular a la frontera, los términos dependientes de la escala rápida en (3.10) siempre se integran a cero, regresando a la dinámica de la figura 2.11.

También en 4.8 observamos que pequeños cúmulos de 1, 2, 3 y 4 puntos son estables. De cierto modo estos cúmulos se pueden ver como dominios de tamaño de orden λ_0 . Aun más, es notable que para estos cúmulos se pueden determinar, de manera independiente, las curvas $\epsilon_{inf}^{(CU_n)}$ y $\epsilon_{sup}^{(CU_n)}$ con $n=2,3,4\dots$, análogas a las ϵ_{inf} y ϵ_{sup} de los frentes hexagonales. Para valores de ϵ a la derecha de $\epsilon_{sup}^{(CU_n)}$, los cúmulos de n puntos funcionan como núcleos para la formación de patrones hexagonales que después se expanden libremente. A la izquierda de $\epsilon_{inf}^{(CU_n)}$, los cúmulos se encogen hasta desaparecer (véase figura 4.10). En resumen, las estructuras localizadas tienen transiciones dinámicas similares a los de los dominios grandes. Para verificar que esto es posible, determinamos numéricamente algunos puntos de $\epsilon_{inf}^{(CU_3)}$ en el espacio (ξ_0, ϵ) con $g_2 = 0.2$ y los graficamos junto con el diagrama de estabilidad de las fronteras. Estos resultados son consistentes con el análisis cualitativo de estructuras localizadas en una dimensión espacial, publicado recientemente en [33].

En contraste, la figura 4.9 ilustra la inestabilidad de un estado desordenado, por el avance de las fronteras. Fijamos los valores $\xi_0 = 0.04\lambda_0$ y $\epsilon = -0.0038$. En este régimen se llega, en tiempos largos, a estados ordenados de patrones hexagonales. Los cúmulos estables del estado desordenado inicial (4.9 a), son rápidamente engullidos por las regiones hexagonales crecientes. Evidentemente, para tiempos largos, las regiones conductoras son también barridas por los hexágonos. En el intervalo $\epsilon_{sup} < \epsilon < \epsilon_{sup}^{(CU_n)}$ los cúmulos estables constituyen un estado metaestable.

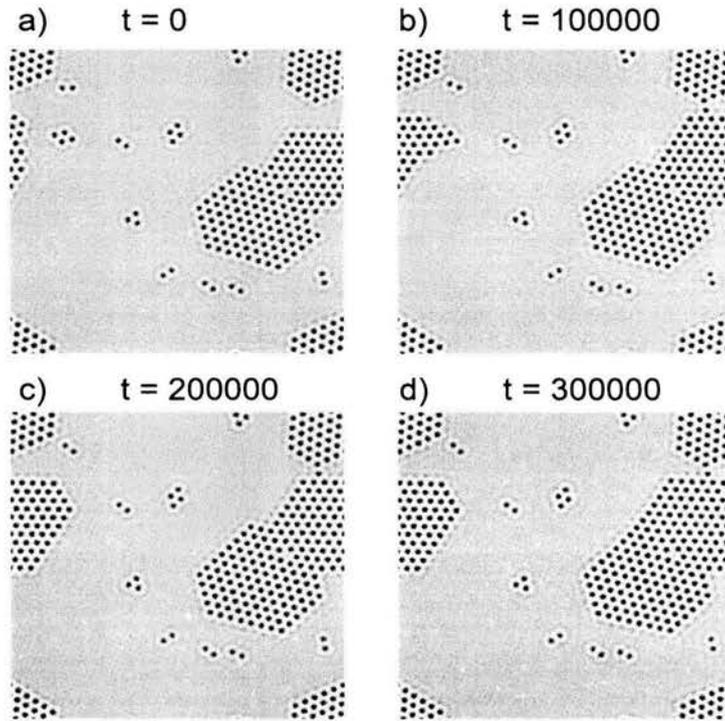


Figura 4.8: Evolución hacia una configuración desordenada estacionaria del parámetro de orden ψ ($g_2 = 0.2$). La longitud de coherencia es $\xi_0 = 0.04\lambda_0$, $\epsilon_{inf} < \epsilon = -0.00453 < \epsilon_{sup}$. En el régimen de bloqueo, las fronteras inmóviles favorecen que el estado desordenado prevalezca. a) El estado intermedio; b) $t=100000$ unidades de tiempo después, es notorio que las fronteras que no estaban facetadas han avanzado; c) $t=200000$ todas las fronteras están facetadas, sin embargo algunas avanzarán hasta el estado de la figura d) ($t=300000$).

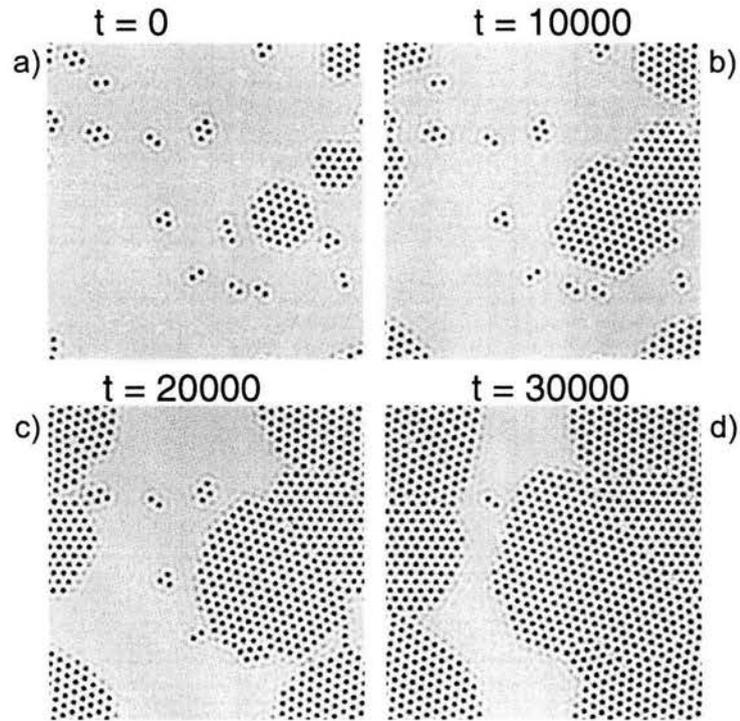


Figura 4.9: Evolución de los patrones para $\epsilon_{n\sup} < \epsilon = -0.0038 < \epsilon_{\sup}^{(CU_2)}$. Los otros parámetros son $\xi_0 = 0.04\lambda_0$ y $g_2 = 0.2$. En a) tenemos el estado inicial, en b), c) y d) tres configuraciones sucesivas de la misma corrida, respectivamente en tiempos $t=10000$, 20000 , 30000 . Los cúmulos de estructuras localizadas son estables pero finalmente son engullidos por el patrón hexagonal creciente. Dicho de otra forma, en este régimen los “muéganos” son un estado metaestable.

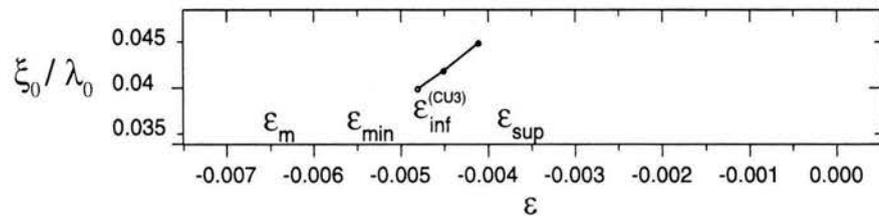


Figura 4.10: La curva pequeña es un segmento de $\epsilon_{\inf}^{(CU_3)}$. Si $\epsilon < \epsilon_{\inf}^{(CU_3)}$ los cúmulos de tres puntos desaparecen.

Capítulo 5

Conclusiones

Estudiamos la dinámica de una frontera en la región de biestabilidad de la ecuación de Swift-Hohenberg (2.57). De un análisis débilmente no lineal ($\xi_0 \sim \lambda_0$) e incluyendo efectos no adiabáticos, encontramos que el régimen de bloqueo total de la interfaz hexagonal-uniforme, es consecuencia de la interacción entre las dos escalas naturales del sistema: la lenta que describe la modulación del patrón (por lo tanto la frontera) y la rápida que describe la estructura periódica local.

El tamaño del intervalo de bloqueo $[\epsilon_{inf}, \epsilon_{sup}]$ es importante tan pronto como la longitud de coherencia ξ_0 es del orden (o menor) que un valor característico $\xi_0^{(p)}$, descrito por la fórmula (4.6). Los efectos no lineales aumentan a medida que ξ_0 decrece (con ϵ y g_2 constantes), y disminuye el intervalo $[\epsilon_m; \epsilon_{inf}]$ donde los hexágonos retroceden a favor del estado uniforme. Es decir que en el régimen no lineal, el patrón hexagonal es dominante.

Exploramos rápidamente las consecuencias que tiene la dinámica de las fronteras en la existencia de las configuraciones desordenadas. Los estados estacionarios desordenados son posibles únicamente en el régimen no lineal ($\xi_0/\lambda_0 \ll 1$), donde el movimiento de las interfases está bloqueado. En el régimen de movimiento, la fase hexagonal constituye una fase estable, pues el patrón uniforme ($\psi = 0$) y las estructuras localizadas son barridas por los frentes al avanzar.

En la región de biestabilidad, donde concentramos nuestro estudio, aparecen frecuentemente las llamadas estructuras localizadas. Estas han sido estudiadas ampliamente y se ha encontrado que tienen un papel importante en la producción de estados desordenados [5, 34, 35]. Sin embargo, no se cuenta aún con modelos para una interpretación completa de su estabilidad y dinámica. Esto es más notorio en el caso de los cúmulos de más de dos partículas [36], donde los estudios son predominantemente numéricos. En particular, parece interesante buscar una interpretación cuantitativa que explique la similitud entre la dinámica de las estructuras localizadas y aquella de los frentes de patrones hexagonales. Una discusión cualitativa ha sido presentada para patrones unidimensionales [33].

Como explicamos en el Capítulo 2, las ecuaciones (2.14) y (2.15) tienen estructu-

ra potencial. Esta propiedad nos permitió determinar el sentido del movimiento de la interfase entre dos patrones ideales distintos: la frontera se mueve de forma que el patrón que minimiza una “energía libre” crezca; la selección del número de onda también se puede explicar por la minimización del funcional de “energía”. Sin embargo, muchos sistemas, en particular convectivos, no son potenciales en la práctica. Las ecuaciones de amplitud que describen sus patrones contienen algunos términos no potenciales, es decir que no son derivables de un potencial. Se ha investigado la influencia que estos términos pueden tener en la dinámica de los frentes de la fase hexagonal [37]. La selección del número de onda es alterada de forma que los patrones no están compuestos de hexágonos regulares. Cerca del umbral, la velocidad de la interfaz hexagonal-uniforme, en el caso no potencial, no es muy distinta de la que se obtiene del análisis débilmente no lineal estándar. Lejos del umbral, como en el régimen de bloqueo discutido arriba, todo indica que los términos no potenciales deberían modificar notablemente la dinámica y las distintas transiciones. Falta investigar el resultado conjunto de los términos no adiabáticos y los no potenciales sobre la dinámica discutida aquí.

Otra posible continuación de este trabajo es la aplicación de los mismos métodos y aproximaciones a la investigación de otros modelos que describen sistemas ecológicos, químicos u ópticos, que fueron presentados rápidamente en la sección 2.2.

Apéndice A

Estimación de la magnitud p del potencial de bloqueo

En la sección 3.2 se calculó la magnitud del llamado potencial de bloqueo, p , en la aproximación no adiabática y se obtuvo

$$p = \max_{\Theta} \int_{-\infty}^{+\infty} \cos(k_0 X + \Theta) \left[A_1 \frac{\partial(-18(A_1 A_2^2) + g_2(3A_1^2 + 4A_2^2))}{\partial X} + 2A_2 \frac{\partial(3(A_1^2 A_2 + A_2^3) + 2g_2 A_1 A_2)}{\partial X} \right] dX . \quad (\text{A.1})$$

De [27] sabemos que las amplitudes cambian aproximadamente en el espacio como la función $\tanh(x/\xi)$, con ξ el ancho de la frontera. En una primera aproximación, la integral (A.1) tiene el mismo orden de magnitud que la parte imaginaria de

$$A_0^4 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_0 x} \tanh(x/\xi) dx , \quad (\text{A.2})$$

donde A_0 esta dado por la ecuación (2.103).

Si integramos la función compleja

$$f(z) = e^{ik_0 z} \tanh(z/\xi) \quad (\text{A.3})$$

sobre el contorno Γ (véase la figura A.1), la parte sobre el eje real coincide con la integral (A.2) cuando $R \rightarrow \infty$.

Entonces calculamos

$$\int_{\Gamma} e^{ik_0 z} \frac{1 - e^{-2z/\xi}}{1 + e^{-2z/\xi}} dz . \quad (\text{A.4})$$

Por un lado, del teorema del residuo obtenemos

$$\int_{\Gamma} e^{ik_0 z} \frac{1 - e^{-2z/\xi}}{1 + e^{-2z/\xi}} dz = 2i\pi\xi \sum_{n=0}^{\infty} e^{-k_0 \frac{\xi}{2}(2n+1)\pi} . \quad (\text{A.5})$$

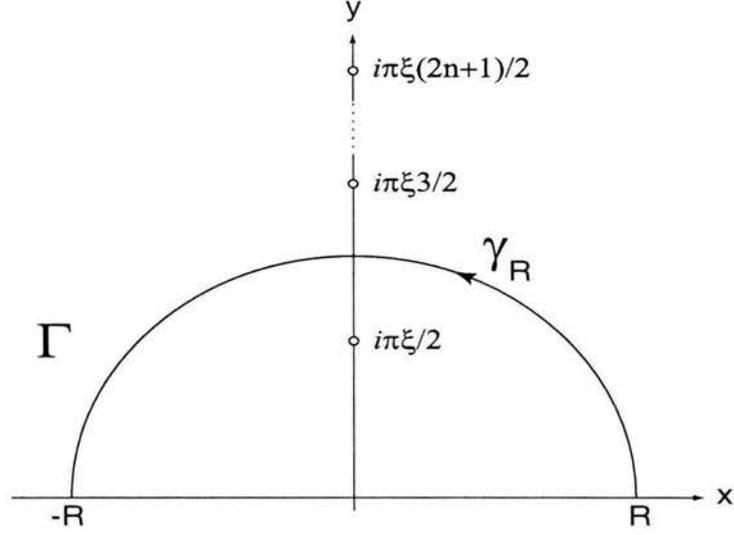


Figura A.1: Los polos z_n de la función $f(z)$ son $z_n = \frac{i\xi}{2}(2n+1)\pi$, cuando $R \rightarrow \infty$, todos quedan dentro del contorno Γ .

Por otro, la integral (A.4) tiende a cero en los puntos sobre el semicírculo γ_R por lo tanto esta se reduce a

$$p \approx A_0^4 \text{Im} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_0 x} \tanh(x/\xi) dx \right) = A_0^4 \sum_{n=0}^{\infty} 2\pi \xi e^{-k_0 \frac{\xi}{2}(2n+1)\pi}. \quad (\text{A.6})$$

Esta aproximación de p es una suma infinita y podemos evaluar la aportación de cada sumando. En el régimen en que $\xi k_0 \gg 1$, tenemos que $e^{-ck_0\xi} \ll 1$, de donde el primer término ($n = 0$) de la suma es dominante: $p \approx e^{-\frac{\pi}{2}k_0\xi} \ll 1$. El segundo sumando ($n = 1$) es $e^{-\frac{3\pi}{2}k_0\xi}$, el tercero ($n = 2$) $e^{-\frac{5\pi}{2}k_0\xi}$. Si consideramos valores mayores de n , sumamos potencias del primer sumando, que son pequeñas comparadas con la unidad, y por lo tanto términos de orden cada vez menor a la suma de p . Por lo tanto p se aproxima únicamente por el primer término.

El vector de onda en la expresión (A.1) de p es k_0 , pues en la deducción de los términos no adiabáticos de las ecuaciones de amplitud se eliminaron todos los términos subresonantes que oscilaban con vector de onda lk_0 , $l > 1$. Esa eliminación se justifica ahora. Si se les hubiera conservado, a la aproximación (A.6) se agregarían sumas con primer término dominante proporcional a $e^{-lk_0 \frac{\xi}{2}(2n+1)\pi}$. El mayor de estos términos es despreciable comparado con el término dominante $e^{-\frac{\pi}{2}k_0\xi}$ de (A.6).

Apéndice B

Programa “perfil”

Los perfiles numéricos $A_1(x, t)$ y $A_2(x, t)$, usados para calcular el potencial de bloqueo p , se obtuvieron resolviendo las ecuaciones (4.1) usando un algoritmo de Euler descrito en la sección 4.1.1. En el programa, el sistema tiene un tamaño 1 a lo largo de la dirección \hat{x} y está discretizado en `1*nstep` segmentos iguales, donde `nstep` es el número de nodos en los que subdividimos una unidad de distancia. La condición analítica inicial es una función tangente hiperbólica centrada en el punto medio del espacio, es decir que la posición inicial de la frontera es $x_{gb}(t = 0) = 1/2$. Definimos la longitud de onda del patrón hexagonal $\lambda_0 = 1$.

En la salida del programa obtenemos las amplitudes $A_1(x, T)$ y $A_2(x, T)$ en un régimen estacionario, es decir que después de un tiempo numérico T , la velocidad de la frontera es constante. En el preámbulo del programa podemos definir y modificar los valores de

los parámetros g_2 , ϵ y ξ_0 . Hicimos corridas que cubren los intervalos $0.3 < g_2 < 0.7$ y $I_c : -8.5g_2^2/135 < \epsilon < 0$. Fijamos el valor $\xi_0 = 1$ porque hicimos el cambio de variables $x = \xi_0 x$, de forma que los perfiles obtenidos son independientes de ξ_0 .

A continuación está el código FORTRAN del programa.

```

      program perfil
      implicit none
c se dan todas las constantes
c# define "parametros.def.F"
# define g2      0.4
# define epsilon -((8./135.)*(g2)**2)
# define gp      3
# define go      6
# define deltat  0.0005
# define xi0     1.
# define lambda0 1.
# define nstep   20

```

```

# define l      200
# define T      2000
# define ncalc  2000
# define lx     (l*(nstep))
c
c se definen las variables
  real*8 a1i,a2i,a1(lx),a2(lx)
  real*8 d2a1,d2a2,f(lx),g(lx)
  real*8 pi,a0,x(lx),x01,x02
  real*8 time,fi1,fi2,fi,gi,s2,s3
  integer i,n,nt,ntcalc
  pi=dacos(-1.0d0)
  a0=(g2/15. +(1./15.)*(g2**2
& + 15.*epsilon)**(0.5))
  open(unit=3,file='pfe8-nst20-g20.4',
&   form='formatted',status='unknown')
c las condiciones iniciales analiticas c
c   open(unit=4,file='p1e0-nst30_600',
c   &   form='formatted',status='old')
c   open(unit=5,file='p2e0-nst30_600',
c   &   form='formatted',status='old')
  do 1 i=1,lx
c   read(4,*) x(i), a1(i)
c   read(5,*) x(i), a2(i)
  fi1=0.5*(1.-tanh((real(i)/real(nstep)- real(1)/4.0)*g2))
  fi2=0.
  a1(i)=a0*(fi1+fi2)
  a2(i)=a0*(fi1+fi2)
  x(i)=lambda0*real(i)/real(nstep)
1  continue
c calculo del perfil
  nt=int(real(T)/deltat)
  ntcalc=int(real(nt)/real(ncalc))
  do 4 n=1,nt
    time=n*deltat
c   do 2 i=2,lx-1
c     d2a1=(real(nstep)/lambda0)**2*(a1(i+1)+a1(i-1)-2.*a1(i))
c     d2a2=(real(nstep)/lambda0)**2*(a2(i+1)+a2(i-1)-2.*a2(i))
    do 2 i=3,lx-2
      d2a1=(real(nstep)/lambda0)**2*(1./12.)*(-a1(i+2)-a1(i-2)
& + 16.*a1(i+1)+16.*a1(i-1)-30.*a1(i))
      d2a2=(real(nstep)/lambda0)**2*(1./12.)*(-a2(i+2)-a2(i-2)

```

```

& + 16.*a2(i+1)+16.*a2(i-1)-30.*a2(i))
  f(i)=epsilon*a1(i) + 2.*g2*a2(i)**2 - gp*a1(i)**3
&   - 2.*go*a1(i)*a2(i)**2 +d2a1*(xi0**2)
  g(i)=epsilon*a2(i)+2.*g2*a1(i)*a2(i)
&   -(gp+go)*(a2(i)**3)
&   - go*a2(i)*a1(i)**2 + d2a2*(xi0*cos(pi/3.))**2
2  continue
  f(1)=f(3)
f(2)=f(3)
  g(1)=g(3)
g(2)=g(3)
  f(lx)=f(lx-2)
f(lx-1)=f(lx-2)
  g(lx)=g(lx-2)
g(lx-1)=g(lx-2)
  do 3 i=1,lx
    fi=f(i)
    gi=g(i)
    s2=deltat*fi
    s3=deltat*gi
    a1(i)=a1(i)+s2
    a2(i)=a2(i)+s3
3  continue
  if (mod(n,ntcalc).eq.0) then
    do 6 i=2,lx
      if((a0/2.-a1(i-1))*(a0/2.-a1(i)).le.0.) then
        x01= (lambda0/real(nstep))*(a1(i)-a0/2.)/(a1(i-1)-a1(i))+x(i)
      endif
      if((a0/2.-a2(i-1))*(a0/2.-a2(i)).le.0.) then
        x02= (lambda0/real(nstep))*(a2(i)-a0/2.)/(a2(i-1)-a2(i))+x(i)
      endif
6  continue
  write(*,*) time,x01,x02
  write(3,*) time,x01,x02
  endif
4  continue
  open(unit=1,file='p1e8-nst20-g20.4',
&   form='formatted',status='unknown')
  open(unit=2,file='p2e8-nst20-g20.4',
&   form='formatted',status='unknown')
  do 5 i=1,lx
    write(1,*) x(i), a1(i)

```

```
        write(2,*) x(i), a2(i)
5      continue
        close(1)
        close(2)
        close(3)
c      close(4)
c      close(5)
        end
```

Apéndice C

Programa “potencial”

Este programa sirve para obtener la magnitud p del potencial de bloqueo, resolviendo la integral (3.29). Para calcular la integral se ocupa un sencillo método del trapecoide, las primeras derivadas se calculan con una fórmula de tres puntos similar a la que se empleó en el programa `perfil`.

A la entrada del programa se encuentran las amplitudes $A_1(x, T)$ y $A_2(x, T)$ calculadas con el programa `perfil`, a la salida obtenemos p como función de ϵ para un valor particular del cociente ξ_0/λ_0 . Recordemos que además de ϵ , el otro parámetro importante en nuestro problema es ξ_0 , pues la razón ξ_0/λ_0 mide la importancia de la contribución no adiabática a la dinámica de la frontera. Las corridas se hicieron en los intervalos $0.3 < g_2 < 0.7$, $I_c : -8.5g_2^2/135 < \epsilon < 0$ y $0.03 < \xi_0 < 0.06$. A partir de los resultados de este programa, pudimos determinar la existencia de un $\xi_0^{(p)}$ para el cuál las fronteras están bloqueadas en todo el intervalo de coexistencia I_c (véase figura 4.2).

A continuación está el código FORTRAN del programa.

```

      program potencial
      implicit none
c se dan las constantes
c# define "parametros.def.F"
# define g2      0.3
# define epsilon -(8./135.*(g2)**2)
# define gp      3
# define go      6
# define deltat  0.0005
# define xi0     0.0
# define lambda0 1.
# define nstep   20
# define l       200
# define T       600

```

```

# define ncalc    600
# define lx      (1*(nstep))
c
c se definen las variables
  real*8 p,p2,p1,pi,phi,ap
  real*8 d1a1(lx),d1a2(lx),a1(lx)
  real*8 a2(lx),f(lx),g(lx),x(lx)
  integer i
  pi=dacos(-1.0d0)p
c
  open(unit=1,file='p1e8-2811',
    &   form='formatted',status='old')
  open(unit=2,file='p2e8-2811',
    &   form='formatted',status='old')
do 2 i=1,lx
  read(1,*) x(i), a1(i)
  read(2,*) x(i), a2(i)
2   continue
  close(1)
  close(2)
c calculo de las primeras derivadas
  do 3 i=3,lx-2
    d1a1(i)= (real(nstep)/(12.*lambda0)) *(a1(i-2)-8.*a1(i-1)
    & +8.*a1(i+1)-a1(i+2))
    d1a2(i)=(real(nstep)/(12.*lambda0))*(a2(i-2)-8.*a2(i-1)
    & +8.*a2(i+1)-a2(i+2))
3   continue
  d1a1(2)= d1a1(3)
  d1a1(1)= d1a1(3)
  d1a1(lx-1)= d1a1(lx-2)
  d1a1(lx)= d1a1(lx-2)
  d1a2(2)= d1a2(3)
  d1a2(1)= d1a2(3)
  d1a2(lx-1)= d1a2(lx-2)
  d1a2(lx)= d1a2(lx-2)
c calculo de las integrales con metodo del trapezoide
c primero se calculan los integrandos f y g
  do 4 i=1,lx
    x(i)=lambda0*real(i)/real(nstep)
    f(i)=(cos(2.*pi*xi0*(real(i)/real(nstep)))*(a1(i)*
    & (-18.*(d1a1(i)*a2(i)**2+2.*a1(i)*a2(i)*d1a2(i))
    & +g2*(6.*a1(i)*d1a1(i)+8.*a2(i)*d1a2(i)))

```

```

& +2.*a2(i)*(-3*(2.*a1(i)*d1a1(i)*a2(i)+a1(i)**2*d1a2(i)
& +3*a2(i)**2*d1a2(i))+2*g2*(d1a1(i)*a2(i)+a1(i)*d1a2(i))))
  g(i)=(sin(2.*pi*xi0*(real(i)/real(nstep)))*(a1(i)*
& (-18.*(d1a1(i)*a2(i)**2+2.*a1(i)*a2(i)*d1a2(i))
& +g2*(6.*a1(i)*d1a1(i)+8.*a2(i)*d1a2(i)))
& +2.*a2(i)*(-3*(2.*a1(i)*d1a1(i)*a2(i)+a1(i)**2*d1a2(i)
& +3*a2(i)**2*d1a2(i))+2*g2*(d1a1(i)*a2(i)+a1(i)*d1a2(i))))
4  continue
    open(unit=4,file='int1e8-xi00.048-nst20-g20.3',
&   form='formatted',status='unknown')
    open(unit=5,file='int2e8-xi00.048-nst20-g20.3',
&   form='formatted',status='unknown')
    open(unit=8,file='rese8-xi00.048-nst20-g20.3',
&   form='formatted',status='unknown')
    open(unit=7,file='pvse8-xi00.048-nst20-g20.3',
&   form='formatted',status='unknown')
    do 5 i=1,lx
      write(4,*) x(i), f(i)
      write(5,*) x(i), g(i)
5    continue
      close(4)
    close(5)
      p1=0.
      p2=0.
c el intervalo de suma es menor en realidad, hay que reducirlo
      do 6 i=1,lx-1
        p1=p1+0.5*(lambda0/real(nstep))*(f(i)+f(i+1))
        p2=p2+0.5*(lambda0/real(nstep))*(g(i)+g(i+1))
6    continue
c una vez calculadas las integrales podemos encontrar la fase phi
c en la que p=cos(phi)*p1-sin(phi)*p2 es maximo
      phi=atan(-p2/p1)
      p=cos(phi)*p1-sin(phi)*p2
      ap=abs(p)
      write(*,*) p1,p2, phi,p
      write(8,*) p1,p2, phi,p
      write(7,*) epsilon, ap
      close(8)
      close(7)
      end

```

Bibliografía

- [1] M.C. Cross y P.C. Hohenberg, Review of Modern Physics **65**, 851 (1993).
- [2] M. Seul y D. Andelman, Science **267**, 476 (1995).
- [3] R. Neubecker y E. Benkler, Empirical bifurcation analysis of optical pattern formation, Physical Review A **65**, 066206 (2002).
- [4] D. Binks y W. van de Water, Physical Review Letters **78**, 4043 (1997)
- [5] M.I. Rabinovich, A.B. Ezersky y P.D. Weidman, *The dynamics of patterns*, World Scientific (2001).
- [6] J. von Hardenberg, E. Meron, M. Shachak y Y. Zarmi, Diversity of vegetation patterns and desertification, Physical Review Letters **87**, 198101-1 (2001).
- [7] O. Lejeune, M. Tlidi y P. Couteron, Localized vegetation patches: A self-organized response to resource scarcity, Physical Review E **66**, 010901-1 (2002).
- [8] R. Cotterill, *The Cambridge guide to the material world*, Cambridge University Press, Cap. **5**, 67 (1985)
- [9] D. Walgraef, *Spatio-temporal pattern formation*, Springer-Verlag, (1997).
- [10] P. Chaikin y T. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*, Cambridge University Press, **9**(1995).
- [11] E.D. Siggia y A. Zippelius, Dynamics of defects in Rayleigh-Bénard convection, Physical Review A **24**, 1036 (1981).
- [12] A. Bray, Theory of phase ordering kinetics, Advances in Physics **43**, 357 (1994).
- [13] P. Manneville e Y. Pomeau, A grain boundary in cellular structures near the onset of convection, Philosophical Magazine A **48**, 607 (1983).
- [14] B.A. Malomed, A.A. Nepomnyashchy y M.I. Tribelsky, Domain boundaries in convection patterns, Physical Review A **42**, 7244 (1990).

- [15] E. Bodenschatz, J.R. de Bruyn, G. Ahlers y D.S. Cannell, Transitions between Patterns in Thermal Convection, *Physical Review Letters* **67**, 3078 (1991).
- [16] M. Assenheimer y V. Steinberg, *Physical Review Letters* **76**, 756 (1996).
- [17] F. Melo, P.B. Umbanhowar y H.L. Swinney, *Physical Review Letters* **75**, 3838 (1995).
- [18] Y. A. Astrov y Y. A. Logvin, Formation of clusters of localized states in a gas discharge system via a self-completion scenario, *Physical Review Letters* **79**, 2983 (1997).
- [19] M. Tlidi, Paul Mandel y R. Lefever, Localized structures and localized patterns in optical bistability, *Physical Review Letters* **73**, 640 (1994).
- [20] J. Swift y P.C. Hohenberg, Hydrodynamic fluctuations at the convective instability, *Physical Review A* **15**, 329 (1977).
- [21] Y. Shiwa, The amplitude and phase-diffusion equation for lamellar patterns in block copolymers, *Physics Letters A* **228**, 279 (1997).
- [22] L. Leibler, *Macromolecules* **13**, 1602 (1980).
- [23] T. Otha y K. Kawasaki, *Macromolecules* **19**, 2621 (1986).
- [24] K. Staliunas y Víctor J. Sánchez-Morcillo, Dynamics of phase domains in the Swift-Hohenberg equation, *Physica Letters A* **241** (1998).
- [25] A. C. Newell y J. A. Whitehead, *Journal of Fluid Mechanics* **38**, 279 (1969)
- [26] L. A. Segel, *J. Fluid Mech.* **38**, 203 (1969)
- [27] P. Manneville, *Dissipative structures and weak turbulence*, Academic Press (1990).
- [28] Y. Pomeau, Front motion, metastability and subcritical bifurcations in hydrodynamics, *Physica D* **23**,3 (1986).
- [29] D. Boyer y J. Viñals, Grain boundary pinning and glassy dynamics in stripe phases, *Physical Review E* **65**, 046119 (2002).
- [30] D. Boyer y J. Viñals, Weakly nonlinear theory of grain boundary motion in patterns with crystalline symmetry, *Physical Review Letters* **89**, 055501 (2002).
- [31] D. Bensimon, B. Shraiman, y V. Croquette, *Physical Review A* **38**, 5461 (1988).
- [32] M. Cross, D. Meiron y Y. Tu, *Chaos* **4**, 607 (1997).

- [33] P. Coulet, C. Riera y C. Tresser, Stable static localized structures in one dimension, *Physical Review Letters* **84**, 3069 (2000).
- [34] P. Coulet, C. Elphick y D. Repaux, *Physical Review Letters* **58**, 431 (1987).
- [35] K.A. Gorshkov, L.N. Korzinov, M.I. Rabinovich y L.S. Tsmiring, *Journal of Statistical Physics* **74**, 1033 (1994).
- [36] C. Schenk, P. Schutz, M. Bode y H.-G. Purwins, Interaction of self-organized quasiparticles in a two dimensional reaction-diffusion system: The formation of molecules, *Physical Review E* **57**, 6488 (1998).
- [37] A. Hari y A. Nepomnyashchy, Nonpotencial effects in dynamics of fronts between convection patterns, *Physical Review E* **61** 4835 (2000).