

---

Universidad Nacional Autónoma  
de México

---

---

Instituto de Física

Dinámica de formación de patrones en mezclas  
ternarias: ecuaciones de Ginzburg-Landau  
y Swift-Hohenberg

Tesis presentada al

**Instituto de Física de la Universidad Nacional  
Autónoma de México**

como requisito parcial para la obtención del grado de

**Maestría en Ciencias Físicas**

por

Marco Antonio Morales Sánchez

*Director de Tesis*

Dr. Denis Pierre Boyer

MIEMBROS DEL COMITE TUTORAL:

Dra. Carmen Varea Gilabert

Dr. Alberto Robledo Nieto





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.

# Índice general

<b>1. Formación de patrones en sistemas fuera de equilibrio y sistemas en equilibrio</b>	<b>1</b>
1.1. La ecuación de Ginzburg-Landau compleja para sistemas fuera de equilibrio . . . . .	1
1.2. Descripción cualitativa de la convección de Rayleigh-Bénard . . . . .	4
1.3. Características de los patrones periódicos y modelo de Swift-Hohenberg	6
1.3.1. El modelo de Swift-Hohenberg . . . . .	7
1.3.2. Derivación de la ecuación de amplitud compleja a partir del modelo de Swift-Hohenberg . . . . .	8
1.4. Patrones de sistemas en equilibrio termodinámico local . . . . .	9
1.4.1. Modelación de patrones de dominios magnéticos . . . . .	10
1.4.2. Descripción continua de dominios magnéticos . . . . .	13
1.4.3. Aproximación de campo medio para un gas de malla de tres componentes . . . . .	17
1.4.4. Modelo de gas de malla en mezclas con interacciones de largo alcance . . . . .	17
<b>2. Modelación de sistemas ternarios con parámetros de orden no conservados</b>	<b>23</b>
2.1. Modelo con dos parámetros de orden para la morfogénesis en sistemas ternarios . . . . .	23
2.2. Análisis del sistema dinámico para fases uniformes . . . . .	26
2.3. Análisis numérico . . . . .	30
<b>3. Resultados</b>	<b>33</b>
3.1. Solución numérica de las ecuaciones de Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg acopladas . . . . .	33
3.2. Caracterización morfológica de varios patrones de interés . . . . .	39
3.2.1. Patrón espacial del tipo A . . . . .	39
3.2.2. Patrón espacial del tipo B . . . . .	43
3.2.3. Patrón espacial del tipo C . . . . .	46
3.2.4. Patrón espacial del tipo D . . . . .	49
3.2.5. Patrón espacial del tipo E . . . . .	53

3.3. Estructuras interfaciales . . . . .	57
3.3.1. Ubicación de las interfases y defectos . . . . .	57
3.3.2. Reducción drástica de la tensión superficial . . . . .	63
3.4. Dinámica de ordenamiento (coarsening) . . . . .	65
3.4.1. Coarsening en sistemas binarios y ternarios . . . . .	66
3.4.2. Resultados para el modelo de las ecuaciones Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg acopladas . . . . .	67
<b>4. Conclusiones</b>	<b>77</b>
<b>A. Cálculos matemáticos</b>	<b>79</b>
A.1. Análisis de estabilidad de las ecuaciones de Ginzburg-Landau y Swift- Hohenberg sin acoplamiento . . . . .	79
A.2. Análisis de Estabilidad para Pequeñas Oscilaciones . . . . .	82
A.3. Clasificación de estabilidad de las soluciones: valores propios y su jacobiano . . . . .	85
A.4. Deducción de las ecuaciones aproximadas en el espacio de Fourier para el sistema GL-SH[27] . . . . .	87
A.5. Ecuaciones para graficar las soluciones uniformes $u_0$ y $v_0$ . . . . .	91

# Declaración de originalidad

1. Los modelos expuestos en el capítulo 1, no son contribución de los autores de este trabajo. Solamente los empleamos para ejemplificar aspectos que posteriormente utilizamos en nuestros resultados.
2. El modelo dado por la ecuación (2.1), lo tomamos del artículo con referencia [7], para mostrar un ejemplo de las propiedades de un modelo con dos parámetros de orden conservado para un sistema ternario.
3. El modelo propuesto y desarrollado en esta tesis, dado por la ecuación (2.2), es una idea similar a la idea dada a conocer como una de las conclusiones del artículo con referencia [6] y que consiste en generalizar el modelo de Swift-Hohenberg con dos parámetros de orden conservado para la energía libre. Sin embargo, en esta investigación trabajamos con un modelo no conservado y con un funcional tipo Ginzburg-Landau.
4. A partir de la ecuación (2.7) hasta la ecuación (2.19) pertenecientes a la sección 2.2 de esta tesis, son ecuaciones que obtenemos de nuestros propios cálculos.
5. El algoritmo numérico de la transformada rápida de Fourier definido por la ecuación (2.21) y empleado en este trabajo fué tomado de la referencia [27].
6. La forma explícita de la extensión del algoritmo de la referencia [27] a un sistema de dos ecuaciones diferenciales parciales no lineales, esto es, las ecuaciones (2.25) y (2.26), ecuaciones que fueron empleadas para resolver numéricamente el sistema de ecuaciones diferenciales parciales no lineal (2.5), son cálculos obtenidos por nosotros.
7. Los resultados expuestos en el capítulo 3, son propios de nuestro experimento numérico, los cuales se obtienen al resolver numéricamente las ecuaciones (2.25) y (2.26) para diferentes valores de los parámetros de control  $\alpha$ ,  $\omega$ , y  $\varepsilon$ .
8. Finalmente, el capítulo 4, son conclusiones nuestras obtenidas del trabajo global de toda la tesis.



# Resumen

Estudiamos fenómenos de formación de patrones en una ecuación de Swift-Hohenberg acoplada a una ecuación de Ginzburg-Landau. El modelo propuesto en esta tesis produce una riqueza de patrones morfológicamente similares a los obtenidos mediante otros modelos de parámetro de orden local continuo, modelos de tipo Ising para la modelación del ferromagnetismo, modelos de mezclas ternarias con dos parámetros de orden acoplados, modelos de formación de patrones periódicos con modulaciones espaciales, y modelos tipo Ginzburg-Landau de mezclas ternarias donde uno de los componentes de la mezcla es un tensoactivo. El objetivo de esta investigación es modelar un sistema bidimensional de mezclas ternarias, para entender sus diferentes fases y su dinámica fuera de equilibrio. Dicho modelo se elabora considerando interacciones de corto y de largo alcance entre los elementos de los componentes de la mezcla. El procedimiento empleado para la realización de este trabajo es una generalización del modelo de Swift-Hohenberg, resuelto con métodos numéricos.





# Introducción

Existen dos perspectivas para estudiar la morfogénesis: un enfoque con punto de apoyo en la física estadística, y otro en base a la dinámica de sistemas no lineales. La primera rama trata de explicar patrones en equilibrio mediante analogías con problemas de transiciones de fase en mecánica estadística. La segunda rama estudia la formación de un patrón en un sistema mediante la elaboración y el análisis de ecuaciones diferenciales parciales no lineales, las cuales tienen soluciones triviales o con rompimiento de simetrías según el valor de sus parámetros de control. Más aún, el concepto central en este último enfoque para el entendimiento de la formación de patrones es el de inestabilidad. Se sabe que las variaciones temporales y espaciales de patrones son relativamente sencillas de describir cerca del umbral de aparición de los estados inestables. En estos casos, pequeñas perturbaciones crecen exponencialmente con el tiempo. Asintóticamente, el sistema forma un patrón, que se estabiliza mediante algún mecanismo no lineal.

En una gran variedad de sistemas termodinámicos forzados fuera de equilibrio, o en sistemas en equilibrio termodinámico donde interacciones repulsivas de largo alcance compiten con interacciones atractivas de corto alcance, aparecen espontáneamente, estructuras espaciales con periodicidad bien definida (fases moduladas). Casos de especial interés son algunas mezclas de fluidos binarias con interacciones electrostáticas dipolares repulsivas donde existen dos tipos de interacciones que compiten y que involucran escalas de longitudes muy diferentes[1]. Los patrones más comunes que pueden aparecer son rayas (simetría lineal), patrones de simetría cuadrada y hexagonal. Cabe mencionar que tales estructuras aparecen de manera muy general en la naturaleza, incluyendo sistemas de reacciones químicas con difusión, compuestos magnéticos, o sistemas biológicos[2, 3, 4, 5].

La dinámica en sistemas trifásicos ha sido relativamente poco estudiada. Existen estudios recientes de modelos que se enfocan sobre mezclas de tres componentes con interacciones dipolares. Estos modelos pueden describir una mono-capa de Langmuir compuesta de dos tipos de moléculas polares en una interfase aire/agua. El diagrama de fases de estos sistemas presenta una riqueza de comportamientos que no se observa en sistemas binarios usuales, aparecen nuevos patrones, tales como hexagonales mixtos, rayas mixtas, o equilibrio de dos fases entre fases hexagonales y gotas de mayor tamaño que en sistemas binarios[6]. En particular, se observan fases parcialmente ordenadas (o vítreas) constituidas de dominios ordenados separados por interfases. A veces aparecen otros defectos inducidos por el movimiento de las

interfases entre dominios vecinos.

En el capítulo 1 de la presente tesis se exponen dos ejemplos de sistemas binarios bien conocidos que forman fases con rompimiento de simetría, que son los modelos de Ginzburg-Landau y de Swift-Hohenberg. También se menciona el ejemplo de sistemas magnéticos con interacciones de largo alcance y su relación con la formación de patrones. Los modelos de mezclas binarias tipo Ginzburg-Landau forman patrones que tienen dos fases uniformes, mientras que los modelos tipo Swift-Hohenberg, presentan patrones con fases ordenadas en forma de rayas.

En el capítulo 2, se propone un modelo matemático espacialmente continuo para el estudio de una mezcla de tres componentes, como alternativa a un modelo similar de gas de malla propuesto anteriormente[7]. El modelo se construye mediante el acoplamiento (por un término no lineal) de una ecuación de Ginzburg-Landau con una ecuación de Swift-Hohenberg. Adicionalmente en este capítulo se presenta un análisis lineal del modelo.

En el capítulo 3, se muestra la gran riqueza de los patrones generados por el modelo propuesto. Algunos patrones son similares a los de modelos anteriores. Se resumen las fases formadas en un diagrama como función de dos parámetros principales del modelo. En alguna parte del diagrama, se forman fases uniformes que tienen la propiedad de formar interfases con tensión superficial muy baja, de manera análoga a las interfases en sistemas binarios con tensoactivos[8]. Otra forma de caracterizar los patrones del modelo, es mediante el estudio de la dinámica fuera de equilibrio del crecimiento de la longitud de correlación  $L(t)$  de los patrones a partir de estados desordenados. El crecimiento de la longitud característica  $L(t)$  para los patrones de tipo Ginzburg-Landau es dada por la ley de potencias  $L(t) \propto t^{1/2}$ [9], y en el caso de patrones tipo Swift-Hohenberg, está dada por  $L(t) \propto t^{1/3}$ [10]. En el presente modelo, se obtiene dinámicas más lentas (a veces detenidas o "congeladas") que tienden hacia estados parcialmente ordenados, y su principal propiedad es la de no obedecer a alguna ley de escalamiento dinámico. Para desarrollar este trabajo, se usan métodos numéricos y en particular se emplea el método de la transformada rápida de Fourier.

El capítulo 4, se refiere a las conclusiones de este trabajo. Los apéndices de dicho trabajo se incluyen para detallar cálculos teóricos de posible interés para el lector.

# Capítulo 1

## Formación de patrones en sistemas fuera de equilibrio y sistemas en equilibrio

### 1.1. La ecuación de Ginzburg-Landau compleja para sistemas fuera de equilibrio

Los procesos físicos fuera del equilibrio se caracterizan por diferentes tipos de propiedades que varían espacial y temporalmente. Propiedades que sin importar sus características específicas se repiten en forma similar en varios ámbitos de la naturaleza; a tales configuraciones de la materia se les nombrará como *patrones*. En una rama de la ciencia como la mecánica estadística, se estudian fenómenos como las transiciones de fase que se vuelven interesantes en procesos físicos fuera de su estado de equilibrio. Otro rama de la física, como los sistemas dinámicos no lineales, estudia sistemas físicos como los fluidos sometidos a intercambio de energía en forma de calor o rotaciones, los cuales exhiben secuencias de incremento de complejidad en la formación de patrones espacio-temporales. Por ende, al conocimiento en común sobre este tema, generado por las distintas ramas se le llamará *morfogénesis*[2].

A continuación se describen experimentos que son ejemplos de formación de patrones en fluidos como la *convección de Rayleigh-Bénard* y los *vórtices del flujo de Taylor*[3, 11]. El arreglo experimental de Rayleigh-Bénard es el siguiente: se encierra un fluido en un recipiente rectangular. Por debajo del recipiente se le coloca una fuente de calor que mantiene el fondo a una temperatura constante  $T_2$ , la parte superior del fluido se mantiene a una temperatura constante  $T_1 < T_2$ . El grosor de la capa de fluido es  $d$ .

El sistema está fuera de equilibrio, como consecuencia de someter al fluido a esta diferencia de temperatura  $\Delta T = T_2 - T_1$ . Cuando dicha diferencia de temperatura es pequeña, el fluido tiene un campo de velocidad nulo, campo que además no depende de las coordenadas horizontales  $(x, y)$ , sino que sólo depende de la coordenada

vertical  $z$  ( $T = T(z)$ ). Bajo estas condiciones, se dice que el fluido se encuentra en *estado uniforme* o de *conducción*. El sistema entra en *estado de convección* cuando debido a la diferencia de temperatura  $\Delta T$ , aparece un flujo hidrodinámico. El fluido en su conjunto empezará a moverse hacia arriba y hacia abajo formando un patrón espacial, como por ejemplo en forma de una de las estructuras más simples: en forma de rollos paralelos.

Nuevamente se encierra un fluido, para el experimento de los vórtices de Taylor, pero ahora entre dos cascarones cilíndricos concéntricos los cuales pueden girar con velocidades angulares  $\omega_1$  para el cilindro interior y  $\omega_2$  para el cilindro exterior. Si se considera que sólo rota el cilindro interior ( $\omega_2 = 0$ ), la velocidad angular  $\omega_1$  de dicho cilindro determina la distancia al equilibrio. Si  $\omega_1$  supera cierto valor crítico  $\omega_c$ , el flujo laminar de Couette entre los dos cilindros, se vuelve inestable y da lugar a vórtices de Taylor que rompen la simetría traslacional a lo largo del eje de los cilindros. Así, la velocidad  $\vec{v}(r, \theta, z)$  es periódica en la dirección axial  $z$ .

Estos fenómenos con dinámica fuera de equilibrio, se pueden modelar mediante ecuaciones diferenciales. Más aún, en otro contexto ecuaciones similares describen el fenómeno de la superconductividad, la modelación de sistemas de reacción-difusión y de medios excitables, así como la evolución de campos de resonadores ópticos no lineales. Muchos de ellos están expresados fenomenológicamente por la ecuación *dissipativa de Ginzburg-Landau* cuya forma más simple, es la siguiente[4]:

$$\tau_0 \frac{dA}{dt} = \xi_0^2 \nabla^2 A + \epsilon A - g |A|^2 A \quad (1.1)$$

donde  $g$ ,  $\tau_0$  son números reales.  $\xi_0$  también es un número real y el responsable de la escala del término difusivo,  $\epsilon$  es el parámetro de control que determina el nivel de inestabilidad lineal del sistema.  $A$  representa la amplitud de los modos de oscilación de alguna observable física y es una cantidad que es compleja. Inclusive, respecto a la amplitud  $A$  se puede decir que su origen tiene lugar cuando a modo de reflexión M. I. Ravinovich se cuestiona:

¿Cuál es la forma de un modelo universal que describe la evolución de un parámetro de orden que en principio toma un estado homogéneo y pierde estabilidad a través de una bifurcación de Andronov-Hopf<sup>1</sup>? La experiencia ganada en sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias muestra que debe ser una ecuación con amplitud de onda compleja en forma de una ecuación de Stuart-Landau.<sup>2</sup>

---

<sup>1</sup>Esta bifurcación es el origen de un ciclo límite cuando el sistema se encuentra en estado de equilibrio. Por ejemplo en el oscilador de Van der Pol:  $\ddot{x} - (\alpha - x^2)\dot{x} + x = 0$  ocurre que al cambiar de positivo a negativo el parámetro de control  $\alpha$ , y cuando hay un foco estable en el origen del espacio fase, da lugar a un ciclo límite cuya amplitud para un valor pequeño de  $\alpha$  es  $O(\alpha^{1/2})$ , es decir el foco se vuelve inestable.

<sup>2</sup>La ecuación de Stuart-Landau tiene la forma:  $\frac{dA}{dt} = \epsilon A - (1 + i\beta)|A|^2 A$  donde  $\beta$  es la responsable de las oscilaciones isócronas.

## 1.1 La ecuación de Ginzburg-Landau compleja para sistemas fuera de equilibrio

---

Ahora bien, para los propósitos de esta sección a esta ecuación se le considera con dependencia en  $x$  y  $t$ [3]. Entonces:

$$\tau_0 \dot{A} = \xi_0^2 \partial_x^2 A + \epsilon A - g |A|^2 A$$

en donde para el caso de la convección de Rayleigh-Bénard  $A = A(x, t)$  es la amplitud de las modulaciones de la velocidad vertical en el plano medio desde  $z = d/2$ , y es la amplitud del flujo hidrodinámico cuya magnitud  $v_z(x, z = d/2, t)$  está dado por una onda cuya propagación espacial es ascendente y otra onda con propagación descendente ( $v_z(x, d/2, t) = A(x, t) \exp(iq_c x) + c.c.$  donde  $2\pi/q_c$  es el periodo de las modulaciones y  $q_c$  es el número de onda).  $\tau_0, \xi_0$  son constantes,  $\epsilon = r - 1$  es el número de Rayleigh reducido con  $r = \Delta T / \Delta T_c$  para el experimento de convección de Rayleigh-Bénard con  $\Delta T_c$  la diferencia de temperaturas crítica, y  $r = \omega / \omega_c$  para el experimento de los vórtices del flujo de Taylor,  $g$  es una constante de acoplamiento real que depende de la escala de  $A$ . Esta ecuación, puede ser aplicada para explicar algunos aspectos cuantitativos y cualitativos de los diagramas de bifurcaciones y la formación de patrones de sistemas de fluidos.

A continuación, se presentan las soluciones de esta ecuación y su estabilidad. También se presenta el diagrama de bifurcación.

Para estudiar la transición de conducción a convección en forma de rollos con número de onda del sistema  $q = q_c$ , es decir consideramos patrones dados por la amplitud  $A = A_0 \exp i\phi$  donde  $A_0$  y  $\phi$  son dos constantes reales. Bajo estas condiciones y para este caso el término  $\xi_0^2 \partial_x^2 A = 0$ . Entonces, se obtiene que la ecuación de Landau se transforma en:

$$\tau_0 \dot{A}_0 = \epsilon A_0 - g A_0^3$$

Para el caso en el que  $g > 0$  tenemos términos no lineales estabilizantes, cuando  $\dot{A} = 0$ , entonces  $\epsilon A_0 - g A_0^3 = 0$ . De esto se sigue que  $A_0$  tiene tres soluciones:  $A_0 = 0, A_0 = \pm \sqrt{\epsilon/g}$  de las cuales la primera está permitida para todo valor de  $\epsilon$ , pero para las últimas dos solo están definidas para  $\epsilon > 0$ .

Graficando las soluciones de la ecuación de Landau para la amplitud como una función de  $\epsilon$ , lo que se obtiene son dos curvas simétricas respecto al eje horizontal para  $\epsilon > 0$ , cuyo punto de unión se encuentra exactamente en el origen (bifurcación "tenedor", ver la figura 1.1). A dicha gráfica se le nombra como *bifurcación perfecta supercrítica*. Bifurcación supercrítica porque se separa en dos la solución cuando  $\epsilon < 0$  y  $\epsilon > 0$ , y lo de perfecta se debe a que  $A = 0$  es la solución para cualquier  $\epsilon > 0$ . La solución  $A = 0$  es inestable para  $\epsilon > 0$ .

---

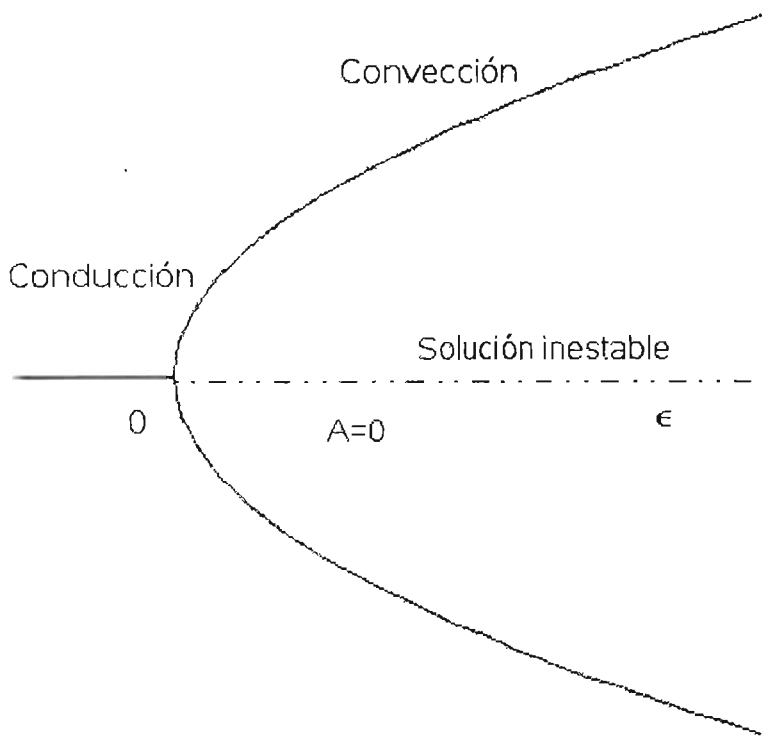


Figura 1.1: Gráficas de  $A(\epsilon) = \pm\sqrt{\epsilon/g}$  y  $A = 0$ . Sin pérdida de la generalidad y en forma de ejemplo  $g = 1$ .

## 1.2. Descripción cualitativa de la convección de Rayleigh-Bénard

Esta sección se dedica a la explicación cualitativa del fenómeno de convección de Rayleigh-Bénard para después generalizar este enfoque mediante un modelo matemático más detallado.

La diferencia de temperatura  $\Delta T$  causa gradientes en el sistema, provocando un flujo de calor y con ello un cambio en la densidad. Esto implica que, un diferencial de volumen del fluido, digamos de forma esférica, localizado en el fondo del recipiente es más ligero que uno de la parte superior. Entonces, al ser empujada una burbuja de fluido de distancia infinitesimal  $\delta x$ , sobre ella actúa una *fuerza de flotación*  $\delta \vec{F}_f$ , debido a que se encuentra en un entorno de densidad ligeramente diferente. Además como evidentemente siempre está actuando la gravedad sobre el fluido, las burbujas diferenciales de fluido más pesadas tienden a hundirse y las más ligeras a subir, dando lugar con ello a un *movimiento convectivo* (un flujo en el fluido).

## 1.2 Descripción cualitativa de la convección de Rayleigh-Bénard

Por otro lado, si caracterizamos el tiempo que una burbuja tarda en subir el ancho  $d$  del fluido por  $\tau_s$ , entonces  $\delta F_e = \delta ma = \delta V \delta \rho / \tau_s = \delta V \delta \rho d / \tau_s^2$ . Se encuentra que:

$$f_e = \delta \rho \frac{d}{\tau_s^2} \quad (1.2)$$

$$\implies f_e = g \rho \alpha \Delta T \quad (1.3)$$

donde  $f_e = \delta F_e / \delta V$  y  $\alpha$  es el coeficiente de expansión térmica definido como  $\alpha = -(1/\rho) d\rho/dT$ .

Haciendo un análisis de unidades es fácil notar que los coeficientes de *viscosidad cinemática*  $\nu$  y la *difusividad del calor*  $\kappa$ , tienen dimensiones de longitud cuadrada por unidad de tiempo. A partir de esto se puede definir el *tiempo de disipación viscosa*  $\tau_\nu$  y el *tiempo de difusión de calor*  $\tau_\kappa$  como:

$$\tau_\nu = \frac{d^2}{\nu} \quad (1.4)$$

$$\tau_\kappa = \frac{d^2}{\kappa} \quad (1.5)$$

Observando los cocientes  $\tau_\nu/\tau_s, \tau_\kappa/\tau_s$ , se obtiene una medida de la rapidez con la cual sube o baja una burbuja comparando con los fenómenos de disipación viscosa y térmica. Entonces, si el producto es tal que:

$$\frac{\tau_\nu}{\tau_s} \cdot \frac{\tau_\kappa}{\tau_s} \gg 1$$

implicaría que la fuerza  $\vec{f}_e$  supera a la fuerza de fricción y a la burbuja no le da tiempo de cambiar de temperatura o de experimentar fricción. Así, se encuentra una condición cualitativa para el establecimiento de la *convección del fluido*. Por el contrario si:

$$\frac{\tau_\nu}{\tau_s} \cdot \frac{\tau_\kappa}{\tau_s} \ll 1$$

entonces la fuerza desestabilizante  $\vec{f}_e$ , no es lo suficientemente grande para hacer subir o bajar a la burbuja (caliente o fría respectivamente) tan rápido como en el caso de la convección. Esto ocurre en un tiempo suficientemente largo para que los procesos difusivos contrarresten las perturbaciones del estado uniforme, que caracteriza al estado de *conducción del fluido*.

Si además notamos que:

$$\begin{aligned} \frac{\tau_\nu}{\tau_s} \cdot \frac{\tau_\kappa}{\tau_s} &= \frac{d^2/\nu}{\tau_s} \frac{d^2/\kappa}{\tau_s} \text{ (sustituyendo (1.4) y (1.5))} \\ &= \frac{d^4}{\nu\kappa} \cdot \frac{1}{\tau_s^2} \\ &= \frac{d^4}{\nu\kappa} \frac{g\rho\alpha\Delta T}{d} \text{ (por las ecs. (1.2) y (1.3))} \\ &= \frac{g\rho\alpha\Delta T d^3}{\nu\kappa} \end{aligned}$$

entonces del último desarrollo podemos definir lo que se conoce como *número adimensional de Rayleigh*  $R$ :

$$R = \frac{g\alpha\Delta T d^3}{\nu\kappa}$$

Al valor de éste parámetro, por arriba del cual se establece la convección, se llama *valor crítico*  $R_c$ , y es a éste valor cuando el sistema alcanza una bifurcación. También, a partir de  $R$  se define el *parámetro de control*  $\epsilon$  tal como lo introdujimos en las ecuaciones anteriores. Si  $\epsilon = R/R_c - 1$  y  $\epsilon > 0$  ( $R \geq R_c$ ), el estado de conducción desaparece debido a la transición del sistema al estado de convección. Esto implica la formación de un patrón espacial, y que en la forma más simple adquiere la forma de rollos paralelos. Mas aún, esto se observa cuando  $0 < \epsilon \ll 1$ . Si en el sistema se incrementa  $\epsilon$ , pueden ocurrir bifurcaciones secundarias y eventualmente *comportamientos caóticos*.

### 1.3. Características de los patrones periódicos y modelo de Swift-Hohenberg

Algunos patrones periódicos bidimensionales con simetría de bandas se forman en reacciones químicas, en sistemas ópticos y en la convección térmica de Rayleigh-Bénard. También se pueden formar en los mismos sistemas patrones de simetría tres, o hexagonal. La estructura espacial de un patrón está compuesta por propiedades que se repiten, las cuales corresponden a la modulación espacial o temporal de una variable física local (digamos la concentración, el índice de refracción o la temperatura). Ejemplos de estos diseños geométricos complicados se encuentran en la naturaleza en las pieles de los mamíferos, reptiles, peces, conchas de caracoles marinos, colonias de bacterias y en estructuras vegetales en zonas semiáridas[2, 4, 12].

Otro modelo matemático para explicar procesos de formación de patrones de forma más general, es el modelo de Swift-Hohenberg. Pero para entender dicho modelo, primero es necesaria dar una descripción cualitativa de los *patrones periódicos*.

1. La formación de patrones se hace mediante el rompimiento de simetrías de rotación y traslación de un sistema inicialmente uniforme.
2. Al parejo de la formación de un patrón, es común que aparezcan estructuras espaciales que conectan estados estables diferentes del sistema, a los que les llamaremos *defectos topológicos*.

Ejemplos de estos defectos topológicos son las *dislocaciones* y las *fronteras de grano*. Los primeros se dan en patrones de bandas y aparecen en donde una banda termina dejando indefinida la fase  $\varphi$  de la amplitud del patrón; el otro, es una región que aparece cuando se encuentran dos patrones de orientaciones diferentes.



3. La disminución de la densidad de defectos topológicos en un sistema, causa el crecimiento de un determinado orden en el sistema.

### 1.3.1. El modelo de Swift-Hohenberg

En esta sección, para una mejor descripción del fenómeno de convección, se pretende generalizar la explicación cualitativa anterior, mediante la construcción de una ecuación diferencial con derivadas parciales: la ecuación de Swift-Hohenberg[13].

Debido a la *inestabilidad lineal* del sistema para  $\epsilon > 0$ , se introduce una función  $\psi$ , a la cual se le nombra *parámetro de orden local*. El significado físico de  $\psi(x, t)$  para la convección de Rayleigh-Bénard, es representar la componente vertical de la velocidad del fluido medida en el plano medio  $z = d/2$ . En el estado conductivo,  $\psi = 0$ . Se consideran perturbaciones de este estado en forma de modulaciones de número de onda  $k$ :

$$\psi(x, t) = \psi_0 \exp(\sigma t + ikx) + \psi_0^* \exp(\sigma t - ikx) \quad (1.6)$$

donde  $\sigma$  es un número real a priori que denota la *tasa de crecimiento*.  $k$  el vector de onda del modo, y  $\psi^*$  es complejo conjugado de  $\psi$ <sup>3</sup>.

Entonces, al sustituir (1.6) en las ecuaciones constitutivas y linealizadas del problema, se obtiene una relación  $\sigma = \sigma(k)$  llamada relación de dispersión. Es evidente que para el estado conductivo (cuando  $\epsilon < 0$ ),  $\psi$  tiene que tender a cero cuando  $t \rightarrow \infty$ , esto implica que  $\sigma < 0, \forall k$ . Si existe un número de onda  $k_0$  que maximiza  $\sigma$  y si  $\sigma(k_0) > 0$ , los valores de  $k$  cercanos a  $k_0$  serán los modos con crecimiento mas rápido y por lo tanto característicos del sistema en su estado final, que se espera sea un patrón con número de onda alrededor de  $k_0$ . Por ende, un desarrollo en serie de Taylor a primer orden en  $\epsilon$  alrededor del punto ( $\epsilon = 0, k = k_0$ ) da:

$$\sigma(\epsilon, k) = \left. \frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon} \right|_0 \epsilon + \left. \frac{\partial \sigma}{\partial k} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \sigma}{\partial^2 k^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \dots \quad (1.7)$$

Nótese de esta ecuación que:

$$\begin{aligned} \sigma > 0, k \sim k_0 & \iff \epsilon > 0 \wedge \left. \frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon} \right|_0 > 0 \\ \sigma < 0, k \sim k_0 & \iff \epsilon < 0 \wedge \left. \frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon} \right|_0 > 0 \end{aligned}$$

---

<sup>3</sup>Recordemos que la necesidad de representar observables físicas por números complejos, tiene la finalidad de dar comportamientos complejos en las ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales de sistemas físicos, y cuyas soluciones son estados inestables del sistema (como por ejemplo el caso de un sistema cuyo comportamiento es descrito por la ecuación (1.1) donde la observable  $A$  de dicho sistema es un escalar complejo).

Tomando  $\partial\sigma/\partial\epsilon|_0 = 1$  se tiene que  $\sigma(\epsilon, k_0) = \epsilon$ . Adicionalmente, se requiere que  $\partial^2\sigma/\partial k^2 < 0$  para que  $\sigma$  sea máximo en  $k = k_0$ , y esto a su vez implica  $\partial\sigma/\partial k|_{k_0} = 0$ . Cuando la capa de fluido se extiende infinitamente en dos dimensiones, el vector de onda del modo creciente no adopta una dirección particular. Por lo cual, se necesita que la ecuación (1.7) sea invariante por rotación, es decir  $\sigma = \sigma(k^2)$ . A segundo orden se obtiene la relación de dispersión:

$$\sigma(\epsilon, k^2) = \epsilon - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2}(k^2 - k_0^2)^2 \quad (1.8)$$

con  $1/2\partial^2\sigma/\partial^2k^2|_{k_0} = -\xi_0^2/4k_0^2$  elegida por conveniencia. La forma de  $\sigma$  es la de una parábola invertida.

Recordando que la ecuación que satisface  $\psi$  dada por (1.6) debe cumplir la relación (1.8), entonces dicha relación debería obtenerse de la ecuación en derivadas parciales:

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = \epsilon\psi - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2}(\nabla^2 + k_0^2)^2\psi.$$

Ecuación cuyo caracter es lineal. Los modos inestables corresponden a  $\sigma > 0$ , es decir,  $\epsilon > 0$ ,  $k \sim k_0$ . La amplitud de estos modos diverge cuando  $t \rightarrow \infty$ . Entonces, si a la última ecuación le agregamos un término  $-\psi^3$ , compensamos el crecimiento y las soluciones estacionarias hacia formas límites cuando  $t \rightarrow \infty$ . El término cúbico deja la ecuación *invariante bajo una reflexión* ( $\psi \rightarrow -\psi$ ). Si añadimos un término cuadrático se rompe esta simetría. Por lo tanto, la construcción de la ecuación diferencial parcial más simple queda como:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\psi = \epsilon\psi - \frac{\xi_0^2}{4k_0^2}(\nabla^2 + k_0^2)^2\psi - \psi^3.} \quad (1.9)$$

Esa ecuación diferencial parcial no lineal es conocida como *el modelo de Swift-Hohenberg*[14].

### 1.3.2. Derivación de la ecuación de amplitud compleja a partir del modelo de Swift-Hohenberg

En adelante se buscan soluciones de la ecuación de Swift-Hohenberg (ecuación (1.9)) con la forma de un patrón de bandas:

$$\psi(\vec{r}, t) = A(\vec{r}, t) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) + A^*(\vec{r}, t) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (1.10)$$

donde  $\vec{r}$  es un vector en dos dimensiones y  $|\vec{k}| = k_0$ . Este patrón corresponde a rayas perpendiculares para  $\vec{k}_0$ . Si  $A = \text{constante}$ , el patrón es perfectamente regular. Si

---

## 1.4 Patrones de sistemas en equilibrio termodinámico local

---

$A = A(\vec{r}, t)$  el patrón esta distorsionado. Se puede mostrar que la ecuación para  $A$  es de la forma (1.1). esto es:

$$\boxed{\frac{\partial A}{\partial t} = \epsilon A + \xi_0^2 \left[ \frac{\partial}{\partial x} - \frac{i}{2k_0} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right]^2 A - 3 |A|^2 A.} \quad (1.11)$$

Ecuación muy parecida a (1.1) que se llama como *ecuación de Ginzburg-Landau compleja dependiente del tiempo*. Una derivación se puede encontrar en la referencia [15].

No obstante, esta ecuación diferencial parcial no lineal se puede expresar de manera mas compacta, acomodando el lado izquierdo de dicha ecuación mediante un funcional de las funciones  $A(\vec{r}, t)$  y  $A^*(\vec{r}, t)$

$$F(t) = \int d\vec{r} \left[ -\frac{\epsilon}{2} |A|^2 - \frac{3}{2} |A|^2 + \frac{1}{2} \left| \left[ \frac{\partial}{\partial x} - \frac{i}{2k_0} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] A \right|^2 \right]$$

Así, se obtiene que la ecuación (1.11) equivale a

$$\boxed{\frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta A^*},} \quad (1.12)$$

donde  $\delta$  representa la derivada funcional. Además, el funcional  $F$  cumple con que:

$$\frac{dF}{dt} = -2 \int d\vec{r} \left| \frac{\partial A}{\partial t} \right|^2 < 0. \quad (1.13)$$

## 1.4. Patrones de sistemas en equilibrio termodinámico local

Una gran variedad de fenómenos cooperativos como por ejemplo el ferromagnetismo y antiferromagnetismo, las transiciones de fase de gas a líquido y de líquido a sólido, las transiciones orden-desorden en aleaciones, las separaciones de fase en soluciones binarias, etc. pueden ser entendidas mediante un modelo muy simple llamado el modelo de Ising[16]. Tal modelo en el presente trabajo, se presenta como la base de otros modelos que presentan fases con rompimiento de simetría.

El modelo de Ising considera la energía de intercambio de Heisenberg entre espines de los átomos en una red.  $J$ . Si además se omite la energía cinética de los átomos que ocupan un sitio en la malla y se adiciona un término de energía  $-\mu B S_i$ , que modela la interacción del espín  $i$  con un campo magnético externo  $B$ , entonces el hamiltoniano  $H$  para este sistema es:

$$H\{S_i\} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \mu B \sum_i S_i \quad (1.14)$$


---

en donde  $J > 0$ ,  $S_i$  (o  $S_j$ ) = +1 si el espín apunta hacia “arriba” y -1 si el espín apunta hacia “abajo”. La primera suma denota suma sobre pares de vecinos más cercanos.

Otro modelo que se mapea al modelo de Ising es *el modelo de gas de malla*[17]. En este modelo, se define una colección  $N_a$  átomos, los cuales pueden ocupar posiciones en una malla con  $N$  “cajas” (o celdas). Cada caja contiene 0 o 1 átomo y está rodeado por  $q$  cajas vecinas (a  $q$  se le nombra: número de coordinación). Cada celda ocupada por un átomo tiene una energía  $-\varepsilon_0$ , por posición vecina ocupada por otro átomo. Entonces, la energía de la configuración del gas está dada por

$$E = -\varepsilon_0 N_{aa}$$

donde  $N_{aa}$  es el número total de pares (de posiciones vecinas ocupadas) en una configuración dada del sistema.

Continuando con el desarrollo teórico, en las siguientes dos secciones se presentan extensiones de los modelos de Ising y de gas de malla para describir sistemas que forman patrones.

### 1.4.1. Modelación de patrones de dominios magnéticos

El modelo de Ising para temperaturas bajas (con  $B = 0$ ), presenta una fase de equilibrio uniforme dada por  $\langle S_i \rangle = m$ , o bien, otra fase uniforme para  $\langle S_i \rangle = -m$  donde  $m$  es la magnetización espontánea, que para temperaturas bajas resulta ser igual a  $N\mu$  siendo  $N$  el número total de espines del sistema (siendo  $N = N_\uparrow - N_\downarrow$  con  $N_\uparrow$  es el número total de espines hacia arriba y  $N_\downarrow$  el número total de espines hacia abajo). Entonces, la fase  $\langle S_i \rangle = \mu N > 0$  se da cuando el sistema tiene más espines hacia arriba ( $N_\uparrow > N_\downarrow$ ), y la otra fase  $\langle S_i \rangle = -\mu N < 0$  ocurre, si hay más espines hacia abajo ( $N_\downarrow > N_\uparrow$ )<sup>4</sup>. Por lo tanto, no hay modulaciones espaciales de  $\langle S_i \rangle$ .

El siguiente modelo presenta una generalización del hamiltoniano de Ising en una malla cuadrada mostrando patrones periódicos[18]. Se proponen términos para modelar la competencia de interacción ferromagnética entre los espines de vecinos cercanos y las interacciones dipolares de largo alcance. También se incluye un campo magnético externo y anisotropía. Si el campo magnético externo ( $h$ ), se toma como formado por componentes tangencial  $H_t$  y longitudinal  $H_l$  ( $h = H_t + H_l$ ), entonces se tiene:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - \sum_i [H_t S_i + H_l (1 - S_i^2) + A S_i^2] \quad (1.15)$$

donde el símbolo de la prima (') indica que los términos de la sumatoria para los cuales  $i = j$  se excluyen de la suma cuando  $S_i = 1, 0, -1$  y  $A > 0$ . El campo

---

<sup>4</sup>Cuando ocurre que hay igual número de espines hacia y hacia abajo ( $N_\uparrow = N_\downarrow$ ) no hay magnetización espontánea  $m$  pues  $N = 0$ .

---

### 1.4.1 Modelación de patrones de dominios magnéticos

---

magnético transversal y la anisotropía juegan un papel similar.  $A$  puede ser considerada como una *característica microscópica* del sistema.  $H_i$  y  $H_l$  son parámetros bien controlados (con valores fijos).

Ahora bien, se propone una constante de acoplamiento  $J_{ij} > 0$  a corto alcance y  $J_{ij} < 0$  a largo alcance para modelar alguna interacción dipolar. Así:

$$J_{ij} = J_0 \frac{\cos(kr_{ij})}{(kr_{ij})^3}. \quad (1.16)$$

donde  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  es la distancia entre sitios  $i$  y  $j$ . Por conveniencia se adopta una unidad de energía de intercambio  $\Gamma$  entre primeros vecinos definida como

$$\Gamma = J_0 \frac{\cos(ka)}{(ka)^3} = 1.$$

en donde  $a$  es un parámetro de la malla. Este tipo de acoplamiento garantiza que la interacción entre más vecinos cercanos es siempre ferromagnética (pues la condición para esto es  $J_{ij} > 0$ ), mientras la magnitud y el signo del acoplamiento con el resto de los vecinos cercanos depende de la distancia de separación a través  $k$ .

Los resultados numéricos obtenidos por Iglesias y Goncalves[18], en este modelo, consideran  $J_{ij} > 0$  hasta los primeros siete vecinos, para una malla de  $N \times N$  siendo  $N = 200$ . El método numérico empleado para realizar dichos cálculos fue el método convencional de Monte Carlo y se emplean varios valores de la temperatura  $T$  y el campo externo.

Además investigan el comportamiento de la malla por dos procedimientos diferentes:

**Encendido** Se elige una temperatura  $T$  alta para hacer evolucionar el sistema (se generan los espines iniciales mediante una función aleatoria), y empleando el algoritmo Metrópolis como herramienta de cálculo, al primer paso Monte Carlo, se hace descender la temperatura  $T$  a un valor muy bajo ( $T=0.005$ ). Posteriormente al sistema se le permite evolucionar hasta 1000 pasos Monte Carlo. En esta forma el sistema tiene toda probabilidad de encontrarse en un estado de energía diferente del estado mínimo más bajo de energía.

**Relajación** Se alcanza el relajamiento térmico mediante la variación lenta de la temperatura desde un valor inicial ( $T = 5$ ) hasta alcanzar la temperatura final  $T = 0$ , en intervalos de  $\Delta T = 0.05$ . Tal relajación térmica es alcanzada después de 1000 pasos Monte Carlo, y se necesita un total de  $10^5$  pasos Monte Carlo. También en este procedimiento se utiliza como herramienta de cálculo el algoritmo Metrópolis.

La simulación del comportamiento de la malla presenta tres tipos de patrones, mediante los dos tipos de procedimientos para producirlos; patrones a los que se les denomina a) *patrones de rayas*, b) *patrones de celdas* y c) *patrones de laberintos*.

---

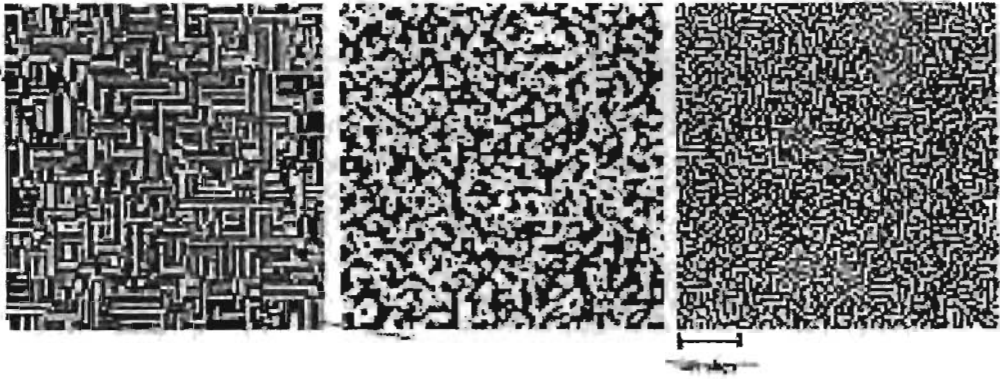


Figura 1.2: Resultados de patrones obtenidos por el método de encendido. El patrón de rayas (hacia la derecha de la figura). corresponde a los parámetros  $k = 4.2$  y  $A = -0.5$ . El patrón de celdas (el centro de la figura) es para  $k = 0$  y  $A = -0.1$ . Y el patrón de laberintos (hacia la izquierda de la figura) es para  $k = 1.2$  y  $A = -0.8$  (figuras tomadas de [18]).



Figura 1.3: Resultados de patrones obtenidos por el método de relajación. La estructura del patrón de celdas (hacia la izquierda de la figura). corresponde al parámetro de temperatura  $T = 2$ . El proceso de ordenamiento para el patrón de celdas (el centro de la figura) inicia en  $T = 0.8$ . Y el patrón de rayas (hacia la derecha de la figura) es para  $T = 0.1$  (figuras tomadas de [18]).

los cuales se muestran en las figuras 1.2 y 1.3 respectivamente. Las rayas en color negro, se obtienen para  $k \neq 0$  y a bajas temperaturas, e indican que el estado de los espinos es hacia arriba.

### 1.4.2. Descripción continua de dominios magnéticos

La formación de patrones en sistemas magnéticos presentada en la sección anterior, se puede discutir con modelos de un parámetro de orden local continuo en los que se introduce un funcional de energía el cual modela las interacciones ferromagnéticas de corto alcance y dipolares de largo alcance. Estos modelos tienen características similares al modelo de Swift-Hohenberg[19, 1].

Consideremos un campo escalar  $\phi(\vec{r}, t)$  definido en un espacio bidimensional. Este campo representa un parámetro de orden local, como por ejemplo la magnetización. En una aproximación de "grano grueso" (*coarse graining*),  $\phi$  representa la variable  $S_i$  promediada localmente. Se propone un Hamiltoniano  $H_l$  de este sistema con la siguiente forma:

$$H_l = \alpha_0 \int d\vec{r} \left( -\frac{1}{2} \dot{\phi}(\vec{r}, t)^2 + \frac{1}{4} \phi(\vec{r}, t)^4 \right) - h_0 \int d\vec{r} \phi(\vec{r}) \quad (1.17)$$

en donde los factores  $1/2$  y  $1/4$  aseguran que  $H_l$  es mínimo para  $\phi_0(\vec{r}, t) = \pm 1$  en ausencia de campo externo,  $h_0 = 0$ .

Es necesario adicionar un término de interacción de corto alcance que tome en cuenta variaciones espaciales de  $\phi$ . Los términos de interacción entre vecinos más cercanos en el modelo de Ising son constantes hasta segundo orden en las variaciones espaciales. Entonces, para sistemas continuos introducimos el siguiente término que modela las interacciones de corto alcance[20]

$$H_{rig} = \frac{\beta_0}{2} \int d\vec{r} |\nabla \phi(\vec{r})|^2 \quad (1.18)$$

en donde el factor  $\beta_0 > 0$ . Este término es de carácter "atractivo" dado que es mínimo para  $\phi = constante$ , y  $H_{rig}$  es positivo en presencia de inhomogeneidades (*interfaces*). En el modelo de Ising este término se mapea a una interacción ferromagnética entre vecinos cercanos, como en la ecuación (1.14) con  $J > 0$ .

Se define la cantidad  $H$  tal que considere todas las interacciones anteriormente planteadas como:  $H = H_l + H_{rig}$  donde  $H_l$  y  $H_{rig}$  están definidos por las ecuaciones (1.17) y (1.18) respectivamente. La ecuación que describe la relajación en el tiempo del campo  $\phi(\vec{r}, t)$  hacia estados de equilibrio (mínimos de  $H$ ) es [9]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta H}{\delta \phi}, \quad (1.19)$$

donde  $\delta$  es la derivada funcional de Fréchet. En esta ecuación, el campo escalar  $\phi$  no obedece a una ecuación de conservación:  $\int d\vec{r} \phi(\vec{r}, t)$  depende del tiempo a priori. Al sustituir  $H$  en la ecuación anterior se obtiene:

$$\boxed{\frac{\partial \phi(\vec{r})}{\partial t} = h_0 + \alpha_0 \phi(\vec{r}) - \alpha_0 \phi^3(\vec{r}) + \beta_0 \nabla^2 \phi(\vec{r})} \quad (1.20)$$


---

ecuación conocida como *ecuación de Ginzburg-Landau real dependiente del tiempo* y es una ecuación importante en este trabajo. En el **apéndice A.1** se expone el bien conocido análisis lineal de pequeñas perturbaciones para las soluciones estacionarias uniformes de la ecuación de Ginzburg-Landau.

Los sistemas que forman fases no uniformes (o modulaciones) pueden ser descritos por un término adicional de interacción dipolar repulsiva de largo alcance, de la forma[1]

$$H_{dip} = \gamma_0 \int d\vec{r} d\vec{r}' \phi(\vec{r}) \phi(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') \quad (1.21)$$

donde  $\gamma > 0$  y  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  está dada por  $\nabla^2 G(\vec{r}, \vec{r}') = -\delta(\vec{r} - \vec{r}')$  lo cual implica que  $G(\vec{r}, \vec{r}') \sim 1/|\vec{r} - \vec{r}'|^3$  para distancias grandes.

Entonces, adicionando las ecuaciones (1.18) y (1.21) a la ecuación (1.17) se obtiene

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{total} = \int d\vec{r} \left[ \alpha_0 \left( -\frac{1}{2} \phi(\vec{r})^2 + \frac{1}{4} \phi(\vec{r})^4 \right) - h_0 \phi(\vec{r}) + \right. \\ \left. + \frac{\beta_0}{2} |\nabla \phi(\vec{r})|^2 + \gamma_0 \int d\vec{r}' \phi(\vec{r}) \phi(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') \right] \quad (1.22) \end{aligned}$$

donde  $\mathcal{H}_{total} = H_l + H_{rig} + H_{dip}$ . Para explicar por qué los términos  $H_{rig}$  y  $H_{dip}$  pueden llevar a la formación de patrones, se define el término de interacción denotado por  $H_{int}$  como  $H_{int} = H_{rig} + H_{dip}$ . Sustituyendo las ecuaciones (1.18) y (1.21) en  $H_{int}$  tenemos:

$$H_{int} = \int d\vec{r} \left[ \frac{\beta_0}{2} |\nabla^2 \tilde{\phi}(\vec{r})|^2 + \gamma_0 \int d\vec{r}' \phi(\vec{r}) \phi(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') \right]$$

Denotando por  $\tilde{\phi}(\vec{k})$  la transformada de Fourier de  $\phi(\vec{r})$ , y sustituyéndola en la última ecuación se obtiene  $H_{int}$  en el espacio de Fourier:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{int} &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{k} \left[ \frac{\beta_0}{2} k^2 |\tilde{\phi}(\vec{k})|^2 + \gamma_0 G(\vec{k}) \tilde{\phi}(\vec{k}) \tilde{\phi}(-\vec{k}') \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{k} \left[ \frac{\beta_0}{2} k^2 + \gamma_0 \frac{1}{k^2} \right] |\tilde{\phi}(\vec{k})|^2 \quad (1.23) \end{aligned}$$

en donde se ha empleado el hecho de que si  $\nabla^2 G(\vec{r}, \vec{r}') = -\delta(\vec{r} - \vec{r}')$  entonces  $G(\vec{k}) = 1/k^2$ . Debido al prefactor de  $|\tilde{\phi}(\vec{k})|^2$  los modos  $\vec{k}$  que hacen  $\tilde{H}_{int}$  mínimo son de número de onda  $k_0 = (2\gamma_0/\beta_0)^{1/4}$ , lo cual implica formación de patrones o la presencia de fases moduladas. El funcional (1.22) ha sido empleado para describir patrones en monocapas de Langmuir[1] y en la disolución de copolímeros dibloque[21, 22].

En un estudio reciente[19], dado el funcional (1.22) se describe la simulación temporal del sistema para una dinámica sobreamortiguada (disipativa) que lleva el



## 1.4.2 Descripción continua de dominios magnéticos

campo  $\phi(\vec{r})$  hacia funciones que minimizan  $H_{total}$ . De manera similar a la ecuación (1.19), en este estudio, se considera un parámetro de orden no conservado

$$\frac{\partial \phi(\vec{r})}{\partial t} = -\lambda \frac{\delta \mathcal{H}_{total}}{\delta \phi(\vec{r})},$$

donde  $\lambda$  es una movilidad positiva y  $\delta$  es la derivada funcional de Fréchet. Al sustituir la ecuación (1.22) en la última expresión, se obtiene [19]

$$\frac{\partial \phi(\vec{r})}{\partial t} = -\lambda \left( -h_0 + \alpha_0 (-\phi(\vec{r}) + \phi(\vec{r})^3) + \beta_0 \nabla^2 \phi(\vec{r}) + \gamma_0 \int d\vec{r}' \phi(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') \right) \quad (1.24)$$

Note que esta ecuación se reduce a la ecuación de Ginzburg Landau real (ec. (1.20)), si  $\lambda = 1$ ,  $\gamma_0 = 0$ ,  $\phi_0 = \pm 1$  siendo la solución uniforme (estado de equilibrio). Para resolver eficientemente esta ecuación mediante el uso de la computadora y de tal manera que se pueda evaluar directamente el término que contiene la integral, se emplea el método pseudo espectral. Entonces, se escribe esta ecuación en el espacio de Fourier, la cual se transforma en

$$\frac{\partial \tilde{\phi}(\vec{k})}{\partial t} = \lambda h_0 \delta(\vec{k}) + \lambda \alpha_0 (\tilde{\phi}(\vec{k}) - \tilde{\phi}^3(\vec{k})) - (\lambda \beta_0 k^2 + \lambda \gamma_0 g(\vec{k})) \tilde{\phi}(\vec{k}) \quad (1.25)$$

En esta forma, el término proveniente de la interacción dipolar de largo alcance es un término algebraico que se aproxima como  $g(\vec{k}) \simeq a_0 - a_1 |\vec{k}|$  para  $k$  pequeña. El término que involucra la transformada de Fourier de  $\tilde{\phi}^3$  puede obtenerse fácilmente mediante el empleo de la transformada rápida de Fourier de  $\phi^3$ .

La ecuación (1.25), se puede transformar en otra que sólo dependa de cuatro parámetros, mediante un escalamiento adecuado. Entonces, al elegir un nuevo campo  $\tilde{\phi} = A^{-1} \phi(\vec{r}/C, t/B)$  donde  $A$  es

$$A = \sqrt{1 + \frac{a_0 \gamma_0 (C - 1)}{\alpha_0}}.$$

la nueva ecuación de la dinámica del sistema en el espacio de Fourier es

$$\frac{\partial \tilde{\phi}(\vec{k})}{\partial t} = h \delta(\vec{k}) + \alpha (\tilde{\phi}(\vec{k}) - \tilde{\phi}^3(\vec{k})) - (\beta k^2 + \gamma [a_0 - a_1 |\vec{k}|]) \tilde{\phi}(\vec{k}) \quad (1.26)$$

donde

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\lambda \alpha_0 A^2}{B} & \beta &= \frac{\lambda \beta_0 C^2}{B} \\ h &= \frac{\lambda h_0}{AB} & \gamma &= \frac{\lambda \gamma_0 C}{B} \end{aligned}$$

En la solución numérica de la ec. (1.26) E. A. Jagla [19] considera los valores  $a_0 \approx 9.05$ ,  $a_1 = 2\pi$ ,  $\beta = 2.0$ ,  $\gamma = 0.19$ . El resto de los parámetros son variables del sistema.

Al asignar una condición inicial arbitraria en la ec. (1.26), dicha ecuación describe una evolución en la cual la energía total del sistema  $\mathcal{H}_{total}$  se reduce hasta alcanzar un mínimo local, en el cual  $\partial\phi/\partial t$  es cercano a cero. Se observa que el mínimo absoluto de  $\mathcal{H}_{total}$  no se alcanza, más bien, el sistema obtiene uno de muchos posibles estados metaestables que contienen muchos defectos. Dicha simulación se hace utilizando condiciones de frontera periódicas. Se discretiza el espacio en una malla cuadrada  $512 \times 512$  de longitud de malla unidad.

Los resultados de la simulación numérica muestran la existencia de cuatro tipos de patrones (ver figura 1.4). Al mismo tiempo, estos patrones tienen principalmente tres comportamientos diferentes, a los cuales se les denomina como:

1. Patrones de burbujas y rayas.
2. Transición de una fase de burbujas a fase de rayas, con coexistencia.
3. Colapso del patrón de burbujas en un patrón poligonal.

En el modelo que se estudia en esta tesis, se obtienen patrones similares, entre otros.

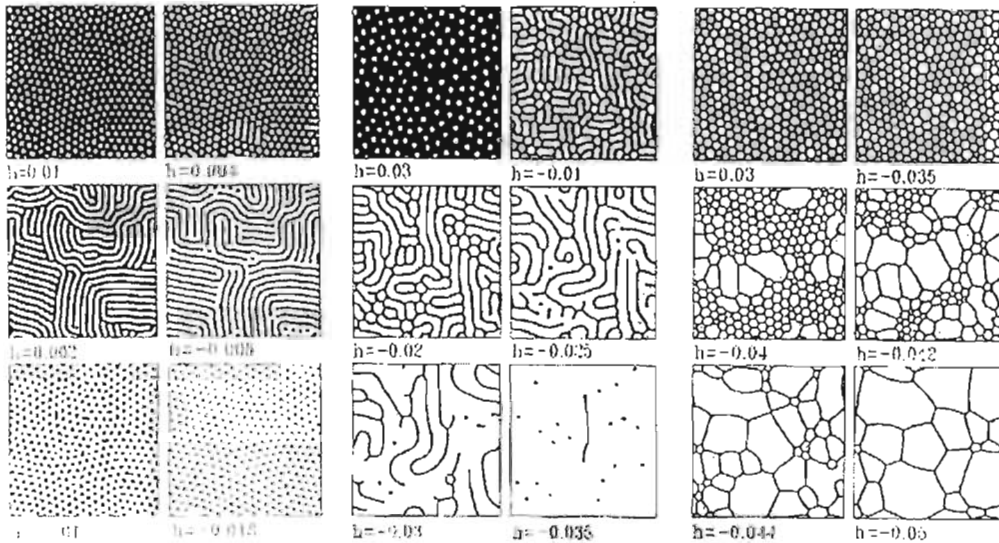


Figura 1.4: En las 6 imágenes de la izquierda se presentan *patrones de burbujas y rayas* para el caso de la evolución de la magnetización para un campo  $h$  que varía como se indica para  $\alpha = 1.6$ . En las 6 imágenes del centro, se presenta la transición de una *fase de burbujas a fase de rayas*. Finalmente, en las imágenes de la derecha de esta figura se muestra el *colapso de burbujas en un patrón poligonal* para valores grandes de  $\alpha = 1.8$ . Figuras tomadas de [19].

### 1.4.3. Aproximación de campo medio para un gas de malla de tres componentes

En esta sección, mostraremos como una descripción de campo medio para un gas de malla con tres componentes (propuesta por Furman, Dattagupta y Griffiths)[23], puede conducir a la formación de patrones. Este modelo nos permite dar un ejemplo de modelación de patrones en mezclas de tres componentes.

Suponemos que el volumen ocupado por el gas está dividido en celdas cuyos centros forman una malla regular. Cada celda contiene una y sólo una molécula, la cual puede ser del tipo 1, 2 o 3. Si la  $j$  - ésima celda contiene una molécula del tipo  $\alpha$ , entonces la cantidad  $P_j^{(\alpha)}$  es igual a 1 y cero para las otras especies. El hamiltoniano del sistema es[23]:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{q} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} E_{\alpha\beta} \sum_{\langle ij \rangle} P_i^{(\alpha)} P_j^{(\beta)} - \sum_{\alpha} \mu_{\alpha} \sum_i P_i^{(\alpha)} \quad (1.27)$$

donde  $q$  es el número de coordinación de la malla,  $E_{\alpha\beta} = E_{\beta\alpha} > 0$  es el opuesto de la energía de interacción entre moléculas del tipo  $\alpha$  y  $\beta$  ubicadas en celdas vecinas,  $\langle ij \rangle$  denota pares de celdas más cercanas, y  $\mu_{\alpha}$  es el potencial químico de la especie  $\alpha$ . En la aproximación de campo medio la energía libre  $\mathcal{F}$  para un sistema con  $N$  celdas está dada por

$$\frac{\mathcal{F}}{N} = kT \sum_{\alpha} A_{\alpha} \ln A_{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} E_{\alpha\beta} A_{\alpha} A_{\beta} - \sum_{\alpha} \mu_{\alpha} A_{\alpha} \quad (1.28)$$

donde  $k$  es la constante de Boltzmann,  $T$  es la temperatura del sistema,  $A_{\alpha} = \langle P_j^{(\alpha)} \rangle$  es el promedio térmico de  $P_j^{(\alpha)}$  o la probabilidad de que la  $j$  - ésima celda este ocupada por una molécula del tipo  $\alpha$  (se supone que es independiente de  $j$ ).

Un comportamiento muy similar al diagrama de fases del modelo de Van der Waals se presenta en este modelo, aunque en partes del diagrama existen diferencias significativas, la similitud se encuentra en que ambos modelos presentan un punto triple.

A continuación se expone una extensión de este modelo que permite observar patrones similares a los patrones de dominios magnéticos discutidos previamente.

### 1.4.4. Modelo de gas de malla en mezclas con interacciones de largo alcance

Se presenta un modelo introducido por C. Varea de evolución temporal de una mezcla ternaria cuya energía libre contiene dos parámetros de orden local acoplados e incluye un término de interacción a largo alcance para uno de los parámetros locales[6] de manera similar al funcional (1.22). Esa energía libre modela en el caso de tres especies, una competencia entre fases moduladas y fenómenos de separación de

fases uniformes debido al exceso de energía libre en interfases. Este modelo en general conduce a la formación de estados metaestables policristalinos, los cuales le impiden al sistema alcanzar el equilibrio. La energía libre  $F$  incluye términos de interacción dependientes de las distancias de separación entre celdas. En la aproximación de campo medio se escribe como

$$F = \sum_{i,\alpha} kT u_i^\alpha \ln u_i^\alpha + \frac{1}{2} \sum_{i,j,\alpha,\beta} V^{\alpha,\beta}(r_{ij}) u_i^\alpha u_j^\beta \quad (1.29)$$

donde  $u_i^\alpha$  es el número de ocupación de la especie  $\alpha$  en el sitio  $i$ ,  $T$  es la temperatura,  $V^{\alpha,\beta}(r_{ij})$  es el potencial de interacción y  $r_{ij}$  es la distancia de separación entre  $i$  y  $j$ . Dado que todos los sitios de la malla están ocupados, se implica la condición  $\sum_{\alpha=1}^3 u_i^\alpha = 1$ . Por lo tanto, en cada posición  $i$  hay dos concentraciones independientes ( $u^1, u^2$ ). El potencial de interacción es *atractivo* para los primeros vecinos cercanos, *se anula* para los segundos vecinos y es *repulsivo* a distancias mayores:  $V^{\alpha,\beta}(r_{ij}) \sim \nu^\alpha \nu^\beta / r_{i,j}^3$ , lo cual corresponde a una interacción dipolar con momento,  $\nu^\alpha$  para la especie  $\alpha$ .

Ahora, para el caso de una malla cuadrada, la parte atractiva del potencial de interacción en la energía libre  $F$  se obtiene considerando los primeros vecinos en (1.29), y se escribe en la siguiente forma

$$\frac{1}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} (a u_i^2 u_j^3 + b u_i^3 u_j^1 + c u_i^1 u_j^2) \quad (1.30)$$

donde la suma sobre  $j$  es para los cuatro primeros vecinos de  $i$ ,  $a + b + c = 1$  los cuales determinan la escala de temperatura y momento dipolar. Adicionalmente, en la referencia [6],  $b = a \cdot \nu^1 = \nu^2 = \nu$  y  $\nu^3 = 0$  para que la mezcla sea simétrica, y se elige  $c = 0.285$ ,  $kT = 0.08$  y  $\nu = 0.2$ . Así, para resolver las ecuaciones que determinan el estado del sistema, hay que encontrar mínimos de la energía libre y se hace empleando las ecuaciones de Euler-Lagrange,

$$\frac{\delta F}{\delta u_i^\alpha} = \mu^\alpha,$$

para los dos números de ocupación independientes  $u_i^1$  y  $u_i^2$  en donde  $\mu^\alpha$  es el potencial químico. Dichas ecuaciones de Euler-Lagrange, se han resuelto por iteraciones sucesivas con un error global menor a  $10^{-8}$  y suponiendo que  $\mu^1 = \mu^2$  [6].

Además, para estudiar la dinámica del sistema, se necesita minimizar el gran potencial  $\Omega$  el cual se define como

$$\Omega = F - \sum_i (\mu^1 u_i^1 - \mu^2 u_i^2)$$

Finalmente, al diferenciar esta última ecuación y tomando en cuenta la concentración del número de partículas para cada especie, se obtiene:

$$\frac{\partial u_i^\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_i^\alpha = 0$$

con  $\bar{J}_i^\alpha = -\nabla \left( \frac{\delta\Omega}{\delta u_i^\alpha} \right)$ , la fuerza termodinámica, o:  $\frac{\partial u_i^\alpha}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta\Omega}{\delta u_i^\alpha}$ . Varea[6] encuentra que a las tres fases de la mezcla se le puede asociar tres tipos diferentes de patrones: *patrones hexagonales de gotas*, *patrones laminares de rayas* y *patrones hexagonales de burbuja*. Adicionalmente, en los patrones hexagonales de burbuja, se encuentran regiones de mojado (interfases) y en los patrones de rayas muestran además del mojado, la formación de defectos topológicos (ver figura 1.5). En las figuras 1.6, 1.7 y 1.8 se presentan ampliaciones de los patrones de las regiones I, II y III, a diferentes tiempos.

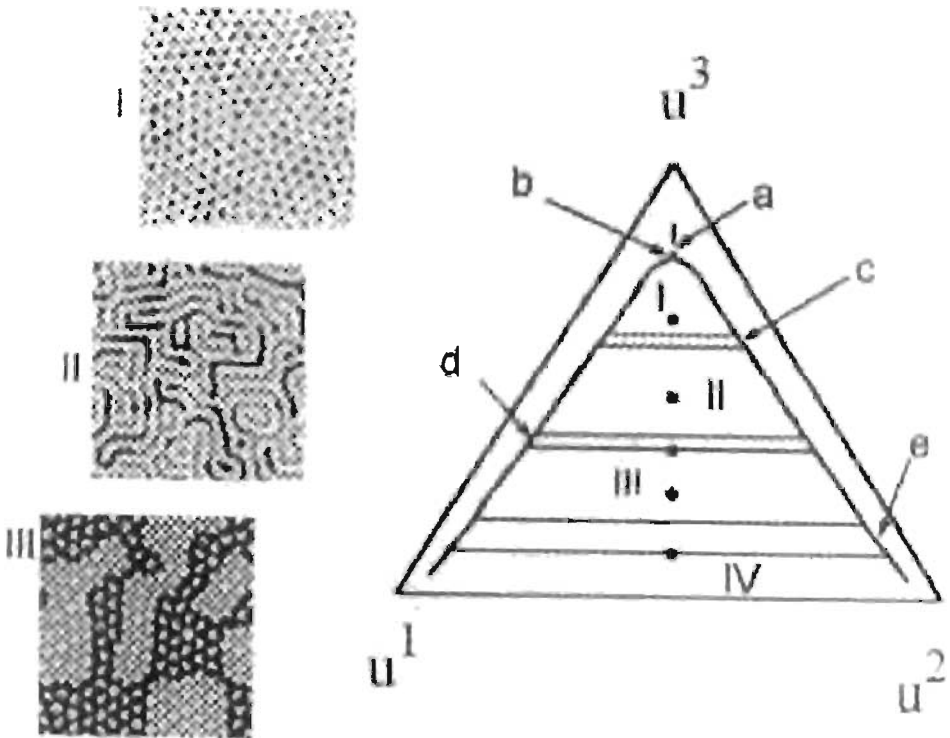


Figura 1.5: Diagrama de fases de una mezcla de tres componentes. Las letras *a, c, d* y *e* señalan las regiones de inmiscibilidad para transiciones de fase de primer orden. El punto *b* señala una transición de fase de segundo orden donde hay una fase de segregación de gotas. En la región I las fases estables son fases de gotas hexagonales de las distintas especies. En la región II hay una fase lamelar y en la región III se obtienen dos fases en equilibrio entre dos fases hexagonales con interfases de burbujas. Los puntos representan (de arriba a bajo) concentraciones  $u^1 = u^2 = 0.18$ ,  $u^1 = u^2 = 0.27$ ,  $u^1 = u^2 = 0.33$ ,  $u^1 = u^2 = 0.382$  y  $u^1 = u^2 = 0.45$  donde se estudia la dinámica (figura tomada de [6]).

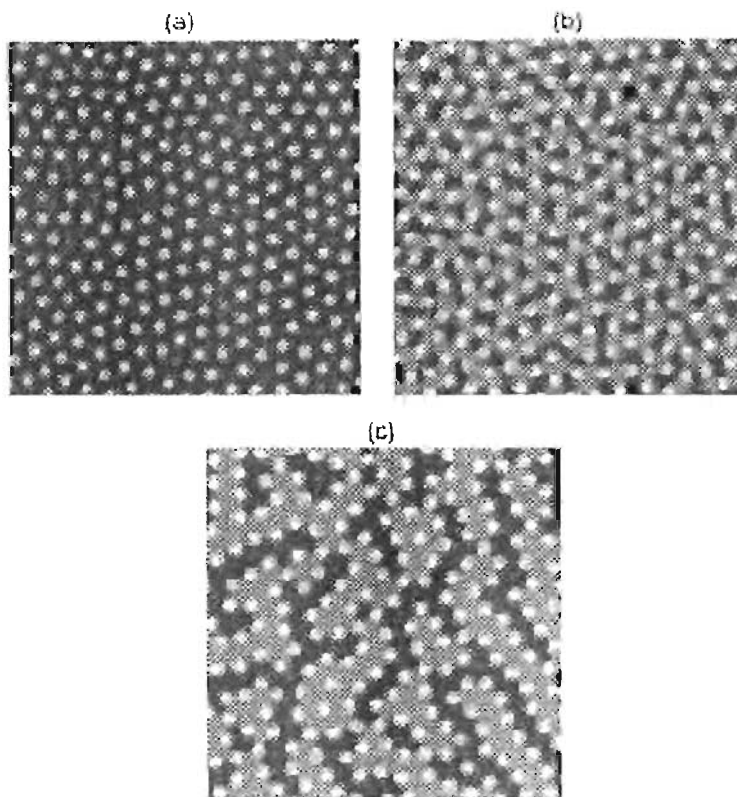


Figura 1.6: Patrones correspondientes a  $v^1 = u^2 = 0.382$ . (a) Después de 30 000 iteraciones, (b) después de 60 000 pasos de tiempo y (c) después de 1 500 000 iteraciones (figura tomada de [6]).

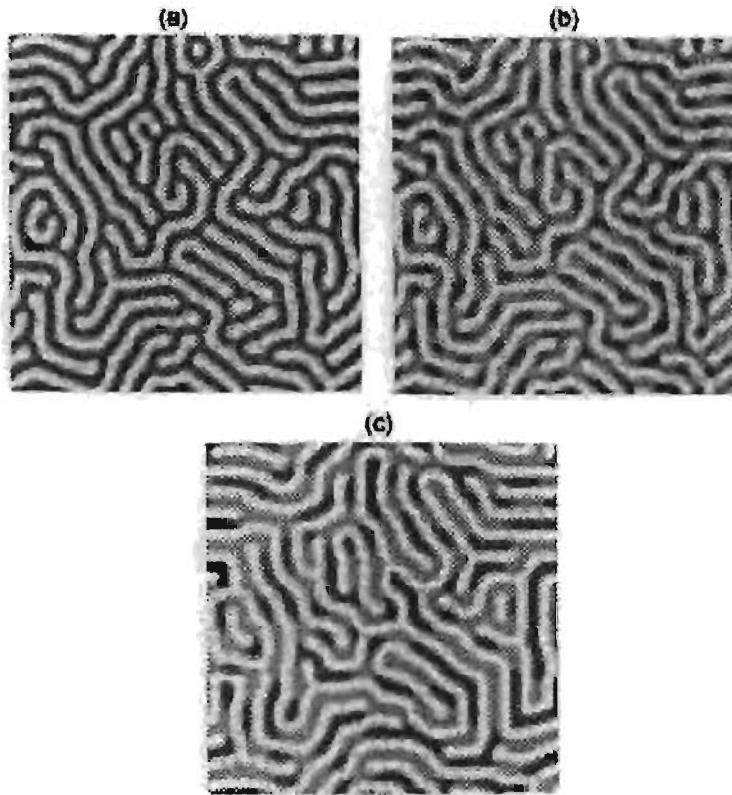


Figura 1.7: Patrones que representan la evolución de un patrón lamelar para  $u^1 = u^2 = 0.27$ ; (a) después de 40 000 iteraciones, (b) después de 80 000 iteraciones (hay segregación) y (c) después de  $1.5 \times 10^6$  iteraciones en tiempo (figura tomada de [6]).

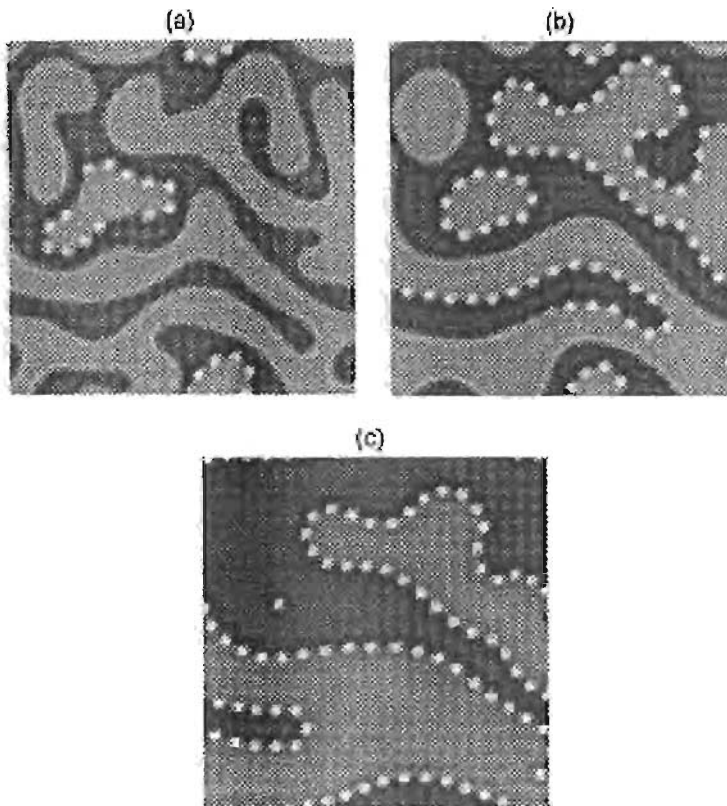


Figura 1.8: Evolución del patrón para  $u^1 = u^2 = 0.45$ . (a) Después de 210 000 iteraciones, (b) después de 830 000 iteraciones y (c) solución estacionaria de las ecuaciones de Euler-Lagrange (figura tomada de [6]).



# Capítulo 2

## Modelación de sistemas ternarios con parámetros de orden no conservados

A continuación se presenta un modelo sencillo que se usa en este trabajo para estudiar la formación de patrones en un sistema ternario.

### 2.1. Modelo con dos parámetros de orden para la morfogénesis en sistemas ternarios

El modelo con aproximación de campo medio para una mezcla de gas de tres componentes, expuesto en el capítulo anterior[23], permite establecer el diagrama de fases de un sistema de tres componentes. El comportamiento del modelo se ilustra mediante un diagrama de fases de cinco dimensiones, mostrando su estructura general, así como información sobre la localización de puntos críticos y triples del sistema.

En un análisis de los diagramas de fase de un modelo de mezclas ternarias en un punto triple[7], se encuentra que las fases uniformes, tienen una descomposición espinodal. Esto ocurre, cuando al variar los parámetros del sistema, se le hace pasar de una fase a otra de inmiscibilidad, haciendo con tales cambios que el sistema adquiera un estado inestable. Inclusive se observa la descomposición espinodal en una región de tres fases, al considerar dos parámetros de orden. Además, el modelo presenta una riqueza en el comportamiento de la separación de fases, incluyendo separación de tres fases con propiedades de mojado en las interfases.

El modelo matemático propuesto por Furman, Dattagupta y Griffiths para mezclas ternarias (dado por las ecs. (1.27) y (1.28)) y extendido por Varea[6] para incluir estados inhomogéneos a través de gradientes que modelan interacciones de

corto alcance, queda definido por la densidad del gran potencial  $\omega$  como:

$$\omega = kT[u \ln u + v \ln v + w \ln w] + avv + bvu + cuw - \frac{1}{2}(a\nabla v \cdot \nabla w + b\nabla w \cdot \nabla u + c\nabla u \cdot \nabla v) - \mu_u u - \mu_v v - \mu_w w \quad (2.1)$$

en donde  $(u, v, w)$  son las concentraciones de las componentes  $(U, V, W)$  tales que:  $u+v+w = 1$ .  $(\mu_u, \mu_v, \mu_w)$  son los potenciales químicos y los parámetros de interacción  $(a, b, c)$  tienen la condición de normalización usual  $a + b + c = 1$  y por simplicidad se toma el caso  $a = b > 0$ .

La evolución temporal para las concentraciones  $u(\vec{r}, t)$  y  $v(\vec{r}, t)$  (dado que  $w$  siempre se puede expresar en términos de  $u, v$  como  $w = 1 - u - v$ ) está determinada por el par de ecuaciones[24]

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \nabla^2 \frac{\delta \Omega[u, v]}{\delta u}, \\ \frac{\partial v(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \nabla^2 \frac{\delta \Omega[u, v]}{\delta v} \end{aligned}$$

donde  $\Omega[u, v] = \int \omega[u, v, (1 - u - v)] d\vec{r}$  es el gran potencial y  $\vec{r}$  es un vector en dos dimensiones. Cuando los campos  $u$  y  $v$  están definidos por estas ecuaciones, se les llama *parámetros de orden conservados*, o bien, a las ecuaciones que definen la dinámica de los campos  $u$  y  $v$  se les nombra *ecuaciones de Cahn-Hilliard*.

Se propone en este trabajo modelar un sistema ternario similar, pero tal vez más general, con un parámetro de orden local  $u(\vec{r}, t)$  que satisface una ecuación de Ginzburg-Landau, acoplado a otro parámetro de orden  $v(\vec{r}, t)$  que tiende a formar fases moduladas y el cual satisface la ecuación de Swift-Hohenberg. Como un primer paso, consideremos el caso donde ambos parámetros no son conservados. El funcional de energía libre  $F[u, v]$  contiene términos  $u^2, v^2, u^4, v^4$  y un término de acoplamiento  $u^2 v$ , el cual favorece una mayor contribución de la variable  $v$ , estableciendo con ello una variable rápida  $v$  y una lenta  $u$ , para cuando los valores de ambos campos escalares son menores que la unidad. Además se consideran términos para modelar la interacción de corto alcance entre especies, por lo que se adiciona  $|\nabla u|^2$ . Como la ecuación de Swift-Hohenberg tiene términos  $|\nabla v|^2$  y  $|\nabla^2 v|^2$  que favorecen modulaciones para  $v$ , entonces estos también se adicionan. Finalmente se puede agregar dos términos más:  $-hu, -Hv$  que representan la interacción con campos externos. Por lo tanto, colocando todas estas propiedades en un funcional de energía libre de tipo Ginzburg-Landau, se tiene:

$$F[u, v] = \int \left[ -hu + \frac{\alpha}{2}u^2 + \frac{1}{4}u^4 + \frac{1}{2}|\nabla u|^2 + \frac{\varepsilon}{2}u^2v - Hv + \frac{\gamma}{2}v^2 + \frac{1}{4}v^4 + \frac{\lambda}{2}v^2 + \lambda|\nabla v|^2 + \frac{\lambda}{2}|\nabla^2 v|^2 \right] d\vec{r} \quad (2.2)$$

## 2.1 Modelo con dos parámetros de orden para la morfogénesis en sistemas ternarios

---

donde los parámetros  $\alpha, \gamma$  son parámetros que establecen escalas para las concentraciones  $u, v$ .  $\lambda$  es el parámetro característico de la longitud de onda para las modulaciones de  $v$  y  $\varepsilon$  es el parámetro que regula la intensidad del acoplamiento entre  $u$  y  $v$ . Para  $\varepsilon = 0$  las fases con simetrías rotas (uniformes y de rayas, respectivamente) se obtienen para  $\alpha < 0, \gamma < 0$  (donde  $-\gamma$  denota a  $\varepsilon$  en la ec. (1.9)).

Para estudiar la dinámica del sistema, elegimos ecuaciones para *parámetros de orden no conservados* (ver [9]), o bien, comúnmente se les nombra *ecuaciones de Allen-Cahn*[25]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} &= -M \frac{\delta F[u, v]}{\delta u}, \\ \frac{\partial v(\vec{r}, t)}{\partial t} &= -M \frac{\delta F[u, v]}{\delta v}\end{aligned}\tag{2.3}$$

donde  $M$  es la movilidad del sistema.

Sustituyendo la ecuación (2.2) en estas últimas expresiones se obtiene

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= h - \alpha u - \varepsilon uv + \nabla^2 u - u^3, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= H - \gamma v - \lambda v - 2\lambda \nabla^2 v - \lambda \nabla^4 v - \frac{\varepsilon}{2} u^2 - v^3\end{aligned}\tag{2.4}$$

con  $M = 1$  por simplicidad. Nótese que la segunda ecuación del sistema de ecuaciones diferenciales parciales no lineal anterior, puede simplificarse utilizando la siguiente identidad:  $-\lambda v - 2\lambda \nabla^2 v - \lambda \nabla^4 v = -\lambda(\nabla^2 + 1)^2 v$ . Entonces al sustituir este resultado en (2.4) y tomando  $h = H = 0$  (sin interacción con campos externos) se obtiene el sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= -\alpha u - \varepsilon uv + \nabla^2 u - u^3, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= -\gamma v - \lambda(\nabla^2 + 1)^2 v - \frac{\varepsilon}{2} u^2 - v^3.\end{aligned}\tag{2.5}$$

Este sistema es el modelo propuesto y el objeto de estudio en esta investigación. No obstante, al elegir  $\varepsilon = 0$  en el término de acoplamiento, se obtienen las ecuaciones de Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg por separado. La forma simplificada de la cual se derivan las ecuaciones (2.3) es:

$$F = \int \left[ \frac{\alpha}{2} u^2 + \frac{1}{4} u^4 + \frac{\varepsilon}{2} u^2 v - \frac{1}{2} |\nabla^2 u|^2 + \frac{\gamma}{2} v^2 + \frac{1}{4} v^4 + \frac{1}{2} |(\nabla^2 + 1)v|^2 \right] d\vec{r}.\tag{2.6}$$

Las expresiones (2.3) no toman la forma de una ecuación de continuidad. Por ende se dice que las ecuaciones (2.3) tienen *parámetros de orden no conservados*. Nótese que las ecuaciones (2.5) están adimensionalizadas.

## 2.2. Análisis del sistema dinámico para fases uniformes

Regresando a los aspectos dinámicos de la formación de patrones, a continuación se mencionan las propiedades principales, en términos generales, de los sistemas dinámicos no lineales:

1. Las ecuaciones diferenciales que caracterizan el comportamiento de muchos sistemas complejos, son de carácter parcial y no lineal, como en (2.4). Las soluciones de dichas ecuaciones pueden ser soluciones estacionarias, periódicas o más complicadas para un conjunto de parámetros de control. Más aun, el cambio en los parámetros de control hace que aparezcan o desaparezcan soluciones, o que éstas se vuelvan inestables.
2. Una forma de representar la solución de una ecuación diferencial que describe un determinado sistema, es con un espacio matemático multidimensional en el cual cada punto define un estado del sistema al tiempo  $t$ . A tal espacio abstracto se nombra como *espacio fase*. La dinámica del sistema se puede estudiar con las trayectorias recorridas por los puntos en el espacio fase.
3. Se clasifica la dinámica del sistema como sigue: a las soluciones estacionarias de las ecuaciones de movimiento del sistema se le conoce como *puntos fijos*; y a las trayectorias que fluyen hacia un punto fijo se les define como *cuenca de atracción*. Si al variar un parámetro, se modifica la cuenca de atracción de un punto fijo (que aparece o desaparece), ocurre una *bifurcación*.

En un primer paso, en esta sección se hace el análisis de estabilidad lineal para las soluciones estacionarias uniformes, así como el cálculo de los parámetros críticos del sistema (2.5), obteniendo con ello los intervalos de los parámetros en los cuales existe la formación de patrones.

Las condiciones matemáticas para tales soluciones estacionarias son:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 & \quad (\text{uniformidad espacial}) \\ \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial t} = 0 & \quad (\text{edos. estacionarios}) \\ \Rightarrow u = u_0, v = v_0 & \end{aligned}$$

Sustituyendo estas condiciones en las ecuaciones (2.5) se obtiene:

$$0 = -\alpha u_0 - \varepsilon u_0 v_0 - u_0^3 \tag{2.7}$$

$$0 = -(\gamma + \lambda) v_0 - \frac{\varepsilon}{2} u_0^2 - v_0^3 \tag{2.8}$$

Si factorizamos  $-u_0$  en la ecuación (2.7), ésta se puede transformar en:

$$0 = -u_0(\alpha + \varepsilon v_0 + u_0^2) \quad \Rightarrow \quad \boxed{u_0 = 0} \quad \vee \quad u_0^2 = -(\alpha + \varepsilon v_0)$$

## 2.2 Análisis del sistema dinámico para fases uniformes

---

Tomando el caso  $u_0 = 0$ , al sustituir esta raíz en la ecuación (2.8), se obtiene:

$$0 = -(\gamma + \lambda)v_0 - v_0^3 \quad \Longrightarrow \quad \boxed{v_0 = 0 \quad \vee \quad v_0 = \pm \sqrt{-(\gamma + \lambda)}} \quad (2.9)$$

bajo la restricción:  $\gamma \leq -\lambda$ , si  $\gamma > -\lambda$  entonces existen soluciones complejas no físicas.

Por otro lado, si se elige  $u_0^2 = -(\alpha + \varepsilon v_0)$  como solución de (2.7), entonces al sustituirla en la ecuación (2.8) se tiene:

$$0 = -(\gamma + \lambda)v_0 + \frac{\varepsilon}{2}(\alpha + \varepsilon v_0) - v_0^3 = - \left( v_0^3 + \left[ \gamma + \lambda - \frac{\varepsilon^2}{2} \right] v_0 - \frac{\alpha\varepsilon}{2} \right) \quad (2.10)$$

Las soluciones de esta ecuación cúbica, están dadas por las fórmulas de Cartan [26]. Tales resultados muestran la existencia de tres tipos de soluciones:

- Cuando hay una raíz real y dos complejas (aunque estas dos no tienen significado físico).
- Cuando hay dos raíces reales en donde una de ellas es de multiplicidad 2.
- Cuando hay tres raíces reales diferentes.

Así, se presentan los resultados de los tres casos anteriores.

**Primer Caso:** una raíz real y dos complejas (cuyo significado corresponde a rotaciones de la raíz real).

$$v_{01} = \left[ \frac{\alpha\varepsilon}{4} + \sqrt{\left(\frac{\alpha\varepsilon}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{3} \left[ \gamma + \lambda - \frac{\varepsilon^2}{2} \right]\right)^3} \right]^{1/3} + \left[ \frac{\alpha\varepsilon}{4} - \sqrt{\left(\frac{\alpha\varepsilon}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{3} \left[ \gamma + \lambda - \frac{\varepsilon^2}{2} \right]\right)^3} \right]^{1/3} \quad (2.11)$$

$$v_{02} = -\frac{1}{2} \left( v_{01} - i\sqrt{3} CR(v_{01}) \right)$$

$$v_{03} = -\frac{1}{2} \left( v_{01} + i\sqrt{3} CR(v_{01}) \right)$$

en donde

$$CR(v_{01}) = \left[ \frac{\alpha\varepsilon}{4} + \sqrt{\left(\frac{\alpha\varepsilon}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{3} \left[ \gamma + \lambda - \frac{\varepsilon^2}{2} \right]\right)^3} \right]^{1/3} - \left[ \frac{\alpha\varepsilon}{4} - \sqrt{\left(\frac{\alpha\varepsilon}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{3} \left[ \gamma + \lambda - \frac{\varepsilon^2}{2} \right]\right)^3} \right]^{1/3}$$

Este caso se da cuando:

$$\left(\frac{\alpha\varepsilon}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{3}\left[\gamma + \lambda - \frac{\varepsilon^2}{2}\right]\right)^3 > 0. \quad (2.12)$$

**Segundo Caso:** dos raíces reales en donde una de ellas es de multiplicidad 2.

$$v_{01} = 2 \left[\frac{\alpha\varepsilon}{4}\right]^{1/3} \quad (2.13)$$

$$v_{02} = - \left[\frac{\alpha\varepsilon}{4}\right]^{1/3} \quad (2.14)$$

en donde  $v_{02}$  presenta multiplicidad 2. Estas soluciones se dan cuando:

$$\left(\frac{\alpha\varepsilon}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{3}\left[\gamma + \lambda - \frac{\varepsilon^2}{2}\right]\right)^3 = 0. \quad (2.15)$$

**Tercer Caso:** tres raíces reales diferentes.

$$v_{01} = \frac{2}{3} \left[\frac{\varepsilon^2}{2} - (\gamma + \lambda)\right] \cos \theta_0, \quad (2.16)$$

$$v_{02} = -\frac{1}{3} \left[\frac{\varepsilon^2}{2} - (\gamma + \lambda)\right] (\cos \theta_1 + \sqrt{3} \operatorname{sen} \theta_1), \quad (2.17)$$

$$v_{03} = -\frac{1}{3} \left[\frac{\varepsilon^2}{2} - (\gamma + \lambda)\right] (\cos \theta_2 - \sqrt{3} \operatorname{sen} \theta_2), \quad (2.18)$$

en donde  $\theta_k = \varphi/3 + 2k\pi/3$  con  $k = 0, 1, 2$  y  $\varphi = \arctan \left\{ \sqrt{\frac{\alpha\varepsilon}{4} \left( \frac{4}{3} \left[ \frac{\varepsilon}{2\alpha} - \frac{\gamma+\lambda}{\alpha\varepsilon} \right] \right)^3 - 1} \right\}$ , bajo la restricción:

$$\left(\frac{\alpha\varepsilon}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{3}\left[\gamma + \lambda - \frac{\varepsilon^2}{2}\right]\right)^3 < 0. \quad (2.19)$$

En conclusión, los resultados anteriores se exponen a modo de resumen en el cuadro 2.1. Puede haber hasta 9 soluciones reales (ver sección 3.2.1): 6 con  $v_0 \neq 0$  y 3 con  $u_0 \neq 0$ .

Más adelante (en el capítulo 3), resolveremos las ecuaciones (2.5) con parámetros correspondientes a varios de los casos del cuadro 2.1. Observamos que en general estas soluciones uniformes son inestables, aunque se presentan casos importantes donde algunas son estables.

En el **apéndice A.2.** se presenta un análisis de estabilidad de estas soluciones.

## 2.2 Análisis del sistema dinámico para fases uniformes

Casos	Raíces del Sistema $(u_0, v_0)$		Restricciones de parámetros
	$v_0 = 0$	$v_0 \neq 0$	
$u_0 = 0$	$(0, 0)$	$\begin{pmatrix} 0, +\sqrt{-(\gamma + \lambda)} \\ 0, -\sqrt{-(\gamma + \lambda)} \end{pmatrix}$	$\gamma \leq -1$
$u_0 \neq 0$		$\begin{pmatrix} +\sqrt{-(\alpha + \varepsilon v_{0_1})}, v_{0_1} \\ -\sqrt{-(\alpha + \varepsilon v_{0_1})}, v_{0_1} \end{pmatrix}$ $v_{0_1}$ satisface (2.11)	$\alpha, \varepsilon, \gamma$ satisfacen (2.12)
$u_0 \neq 0$		$\begin{pmatrix} +\sqrt{-(\alpha + \varepsilon v_{0_1})}, v_{0_1} \\ -\sqrt{-(\alpha + \varepsilon v_{0_1})}, v_{0_1} \end{pmatrix}$ $v_{0_1}$ satisface (2.13)	$\alpha, \varepsilon, \gamma$ satisfacen (2.15)
		$\begin{pmatrix} +\sqrt{-(\alpha + \varepsilon v_{0_2})}, v_{0_2} \\ -\sqrt{-(\alpha + \varepsilon v_{0_2})}, v_{0_2} \end{pmatrix}$ $v_{0_2}$ satisface (2.14)	
$u_0 \neq 0$		$\begin{pmatrix} +\sqrt{-(\alpha + \varepsilon v_{0_1})}, v_{0_1} \\ -\sqrt{-(\alpha + \varepsilon v_{0_1})}, v_{0_1} \end{pmatrix}$ $v_{0_1}$ satisface (2.16)	$\alpha, \varepsilon, \gamma$ satisfacen (2.19)
		$\begin{pmatrix} +\sqrt{-(\alpha + \varepsilon v_{0_2})}, v_{0_2} \\ -\sqrt{-(\alpha + \varepsilon v_{0_2})}, v_{0_2} \end{pmatrix}$ $v_{0_2}$ satisface (2.17)	
		$\begin{pmatrix} +\sqrt{-(\alpha + \varepsilon v_{0_3})}, v_{0_3} \\ -\sqrt{-(\alpha + \varepsilon v_{0_3})}, v_{0_3} \end{pmatrix}$ $v_{0_3}$ satisface (2.18)	

Cuadro 2.1: El presente cuadro contiene todos los casos donde se presentan estados uniformes, así como las respectivas restricciones que se deben cumplir para su existencia.

### 2.3. Análisis numérico

Para considerar variaciones espaciales (ecs. (2.5) en toda su generalidad), necesitamos resolver el modelo de manera numérica.

En este trabajo, se emplea el método de la transformada discreta de Fourier para obtener soluciones numéricas. Seguimos el método expuesto en [27]. Como ejemplo, consideremos una ecuación de Swift-Hohenberg de la forma.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = e\psi - (\nabla^2 + 1)^2\psi + \tilde{N}(\partial_x^2\psi, \partial_y^2\psi, \partial_x\psi, \partial_y\psi, \psi) \quad (2.20)$$

donde  $e$  es un parámetro de control del sistema, y  $\tilde{N}$  representa términos no lineales. La transformada de Fourier directa de  $\psi$  es:

$$\tilde{\psi}(q_x, q_y, t) = \frac{1}{L_x L_y} \int_0^{L_x} dx \int_0^{L_y} dy \psi(x, y, t) \exp(-iq_x x) \exp(-iq_y y).$$

Aplicando la regla del trapecio a la anterior ecuación, para calcular una aproximación discreta para la transformada directa de  $\tilde{\psi}(q_x, q_y, t)$ , se obtiene:

$$\tilde{\psi}(x, y, t) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \tilde{\psi}(x, y, t) \exp(-i(q_x)_i x_i) \exp(-i(q_y)_j y_j)$$

donde  $(q_x)_i = 2\pi i/L_x$ ,  $(q_y)_j = 2\pi j/L_y$ ,  $-(N_x/2 - 1) \leq i \leq N_x/2$  y  $-(N_y/2 - 1) \leq j \leq N_y/2$  para una malla cuadrada de  $N_x \times N_y$  puntos.

Aplicando ahora, la transformada de Fourier en la ecuación (2.20) se obtiene:

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = b\tilde{\psi} + \tilde{N},$$

donde  $b = e - [1 - (q_x^2 + q_y^2)]^2$ . Multiplicando ambos lados en la última ecuación por el término  $\exp(-\alpha t)$ , después de aproximar el término no lineal  $\tilde{N}$  sobre el intervalo  $t \leq t' \leq t + \Delta t$  mediante una función de la forma  $\tilde{N} \approx \tilde{N}_0 + \tilde{N}_1(t - t')$  la ecuación se transforma en[27]

$$\tilde{\psi}(t + \Delta t) = \exp(b\Delta t)\tilde{\psi}(t) + \tilde{N}_0 \left[ \frac{\exp(b\Delta t) - 1}{b} \right] + \tilde{N}_1 \left[ \frac{\exp(b\Delta t) - (1 + b\Delta t)}{b^2\Delta t} \right] \quad (2.21)$$

donde  $\tilde{N}_0 = \tilde{N}(\psi(t))$  y  $\tilde{N}_1 = [\tilde{N}(\psi_{temp}(t + \Delta t)) - \tilde{N}(\psi(t))]$ , donde  $\psi_{temp}(t + \Delta t)$  está dada por (2.21) con  $\tilde{N}_1 = 0$ .  $\Delta t$  es el paso de tiempo, que puede ser elegido mucho más grande que en métodos de Euler clásicos, dado que el algoritmo de la transformada discreta de Fourier tiene una mayor rapidez de convergencia a cada iteración.

En el resto de esta sección se deduce la solución aproximada del sistema definido por las ecuaciones (2.5), mediante el empleo del algoritmo descrito anteriormente.



La ventaja al resolver mediante este método, está en que la parte no lineal de las ecuaciones, se vuelve muy fácil de resolver.  $\psi(t + \Delta t)$  se obtiene formando la transformada inversa de  $\tilde{\psi}(t + \Delta t)$ , para calcular  $N(\psi(t + \Delta t))$  e iterando (2.21).

Entonces, definiendo las correspondientes transformadas de Fourier para los campos  $u$  y  $v$  en dos dimensiones como:

$$\begin{aligned}\tilde{u}(\vec{q}, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{x}) u(\vec{x}, t) d^2 \vec{x}, \\ \tilde{v}(\vec{q}, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{x}) v(\vec{x}, t) d^2 \vec{x}.\end{aligned}\quad (2.22)$$

Sus respectivas transformadas inversas de Fourier son:

$$\begin{aligned}u(\vec{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{x}) \tilde{u}(\vec{q}, t) d^2 q, \\ v(\vec{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{x}) \tilde{v}(\vec{q}, t) d^2 q.\end{aligned}\quad (2.23)$$

Ahora bien, con ayuda de las ecuaciones (2.22) y (2.23), es fácil ver que las ecuaciones (2.5) en el espacio de Fourier se transforman como:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t}(\vec{q}, t) &= c(\alpha, q_x, q_y) \tilde{u}(\vec{q}, t) + \tilde{N}(u(\vec{q}, t), v(\vec{q}, t)) \\ \frac{\partial \tilde{v}}{\partial t}(\vec{q}, t) &= d(\gamma, q_x, q_y) \tilde{v}(\vec{q}, t) + \tilde{N}'(u(\vec{q}, t), v(\vec{q}, t))\end{aligned}\quad (2.24)$$

donde  $c(\alpha, q_x, q_y) = -(\alpha + q^2)$  y  $d(\gamma, \lambda, q_x, q_y) = -(\gamma + [\lambda - q^2]^2)$  con  $q = |\vec{q}|^2 = q_x^2 + q_y^2$ ,  $\tilde{N} \approx \tilde{N}_0 + \tilde{N}_1(t - t_0)$ ,  $\tilde{N}' \approx \tilde{N}'_0 + \tilde{N}'_1(t - t_0)$ ,  $\tilde{N}_0 = -\varepsilon(\tilde{v}\tilde{u})(\vec{q}, t) - \tilde{u}^3(\vec{q}, t)$  y  $\tilde{N}'_0 = -\varepsilon\tilde{u}^2(\vec{q}, t)/2 - \tilde{v}^3(\vec{q}, t)$ . Aplicando un procedimiento análogo al anterior para la ecuación (2.21), se concluye que el conjunto de ecuaciones (2.24) se resuelven aproximadamente en el intervalo  $[t_0, t_0 + \Delta t]$ , como:

$$\tilde{u}(\vec{q}, t_0 + \Delta t) = \exp(c\Delta t) \tilde{u}(\vec{q}, t_0) + \tilde{N}_0 \left[ \frac{1 - \exp(c\Delta t)}{c} \right] + \tilde{N}_1 \left[ \frac{\exp(c\Delta t) - (1 + c\Delta t)}{c^2 \Delta t} \right] \quad (2.25)$$

$$\tilde{v}(\vec{q}, t_0 + \Delta t) = \exp(d\Delta t) \tilde{v}(\vec{q}, t_0) + \tilde{N}'_0 \left[ \frac{1 - \exp(d\Delta t)}{d} \right] + \tilde{N}'_1 \left[ \frac{\exp(d\Delta t) - (1 + d\Delta t)}{d^2 \Delta t} \right]. \quad (2.26)$$

Si  $\tilde{u}_{temp}$ ,  $\tilde{v}_{temp}$  denotan a  $\tilde{u}(\vec{q}, t_0 + \Delta t)$ ,  $\tilde{v}(\vec{q}, t_0 + \Delta t)$  obtenidos con  $\tilde{N}_1 = \tilde{N}'_1 = 0$  en las ecuaciones (2.25) y (2.26), los coeficientes  $\tilde{N}_1$  y  $\tilde{N}'_1$  están dados por:

$$\begin{aligned}\tilde{N}_1 &= - \left\{ \left[ \varepsilon \tilde{v}_{temp} \tilde{u}_{temp} + \tilde{u}_{temp}^3 \right] (\vec{q}, t_0 + \Delta t) - \left[ \varepsilon \tilde{v} \tilde{u} + \tilde{u}^3 \right] (\vec{q}, t_0) \right\}, \\ \tilde{N}'_1 &= - \left\{ \left[ \frac{\varepsilon}{2} \tilde{u}_{temp}^2 + \tilde{v}_{temp}^3 \right] (\vec{q}, t_0 + \Delta t) - \left[ \frac{\varepsilon}{2} \tilde{u}^2 + \tilde{v}^3 \right] (\vec{q}, t_0) \right\}.\end{aligned}$$

Las ecuaciones (2.25) y (2.26) representan la forma numérica de calcular soluciones aproximadas del sistema (2.5). Detalles sobre la deducción de las últimas ecuaciones se presentan en el **Apéndice A.4**.



# Capítulo 3

## Resultados

### 3.1. Solución numérica de las ecuaciones de Ginzburg-Landau y Swift Hohenberg acopladas

En una primera etapa, se elige una malla discreta de  $l_x = 128$  por  $l_y = 128$  nodos, se resuelve el modelo con condiciones aleatorias gaussianas de promedio cero y de varianza 0.1 para  $u$  y  $v$ , hasta un tiempo adimensional  $t = 100$  y con un paso de tiempo  $\Delta t = 0.1$ . En todo el estudio, se fija el parámetro  $\alpha = -0.5$  y  $\lambda = 0.39$ , variando los parámetros  $\gamma, \varepsilon$  dentro del intervalo  $[-1.5, 0.05]$  para ambos. Se obtienen los siguientes **diagramas de patrones** presentados en las figuras 3 a) y 3 b). Son diagramas “dinámicos”, dado que estos resultados dependen del hecho de que la condición inicial es aleatoria. Las líneas en el diagrama no siempre indican un cambio abrupto de fase respecto a la morfología de los patrones, dado que a veces los cambios son progresivos.

Al observar los patrones formados por el campo  $u$  del diagrama de la figura 3 a), identificamos tres tipos de regiones cualitativas, a los cuales se les clasifica por sus rasgos distintivos. Las regiones donde el campo  $u$  es positivo son oscuras, y las regiones donde el mismo campo es negativo son claras.

**Región I (campo  $u$ )** En esta región *el campo  $u$  es localmente uniforme, similar a la solución de la ecuación de Ginzburg Landau sin el término de acoplamiento  $-\varepsilon uv$  (ecuación (2.25)).*

**Región II (campo  $u$ )** La característica distintiva de estos patrones es la *aparición de una fase modulada superpuesta a la fase uniforme constituida de rayas o puntos* que se adelgazan a medida que  $\varepsilon$  se hace pequeño (negativo).

**Región III (campo  $u$ )** La última región se extiende al resto del diagrama, y *consta de patrones con 2 fases uniformes, pero con la propiedad de tener interfases*

*anchas*<sup>1</sup> de una fase de mojado (color gris).

Para una observación más detallada de algunos de los diferentes tipos de patrones se expone la figura 3 c).

Análogamente, observando el diagrama de la figura 3 b), distinguimos cuatro regiones de patrones correspondientes a la solución numérica de la ecuación (2.26), para  $v(x, y)$ .

**Región I (campo  $v$ )** En ésta región, los patrones tienen una *estructura interfacial en forma de lazos con  $v < 0$*  (color claro). *localizada en la interfase de las regiones uniformes originadas por el campo  $u$* . La estructura interfacial se encuentra *inmersa en una fase uniforme mayoritaria con  $v > 0$*  (color oscuro).

**Región II (campo  $v$ )** Se recuperan los resultados similares de los patrones formados para la ecuación de Swift-Hohenberg sin el término de acoplamiento  $-\epsilon u^2/2$  (ecuación (2.26)). *Los patrones de esta región son los típicos patrones de laberintos, o rayas*. También en ésta región, se encuentra que para valores mayores del acoplamiento  $|\epsilon|$ , *los laberintos de un patrón típico de la ecuación de Swift Hohenberg, se hacen menos densos y aparece una fase uniforme mayoritaria con  $v$  positivo* (color negro).

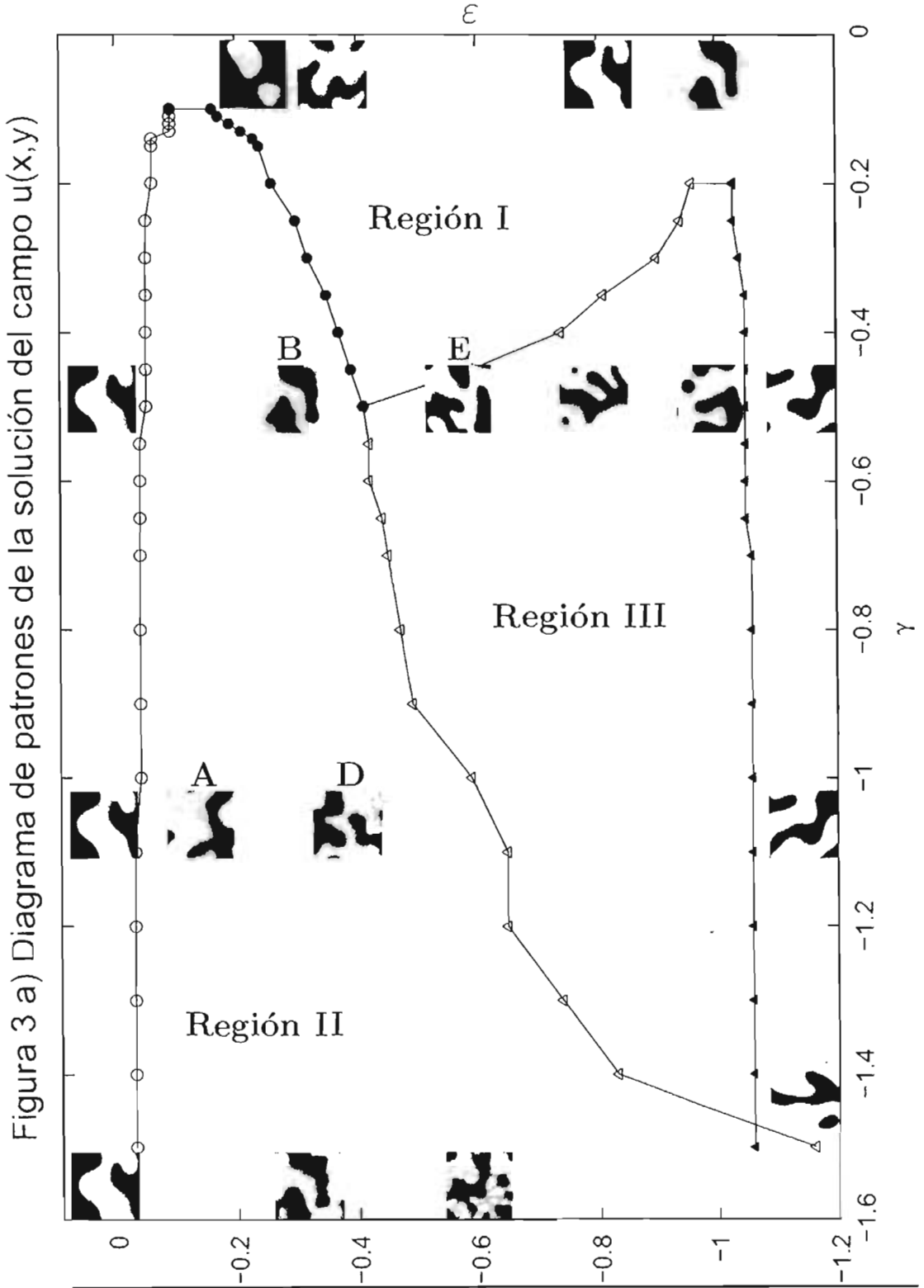
**Región III (campo  $v$ )** En la parte central del diagrama, se localiza una región, la cual tiene una *fase uniforme mayoritaria positiva y otra fase interfacial con  $v < 0$  ubicadas en las interfases de las regiones uniformes formadas por el campo  $u$*  (en color gris). *Las interfases contienen rayas y puntos en la dirección longitudinal*.

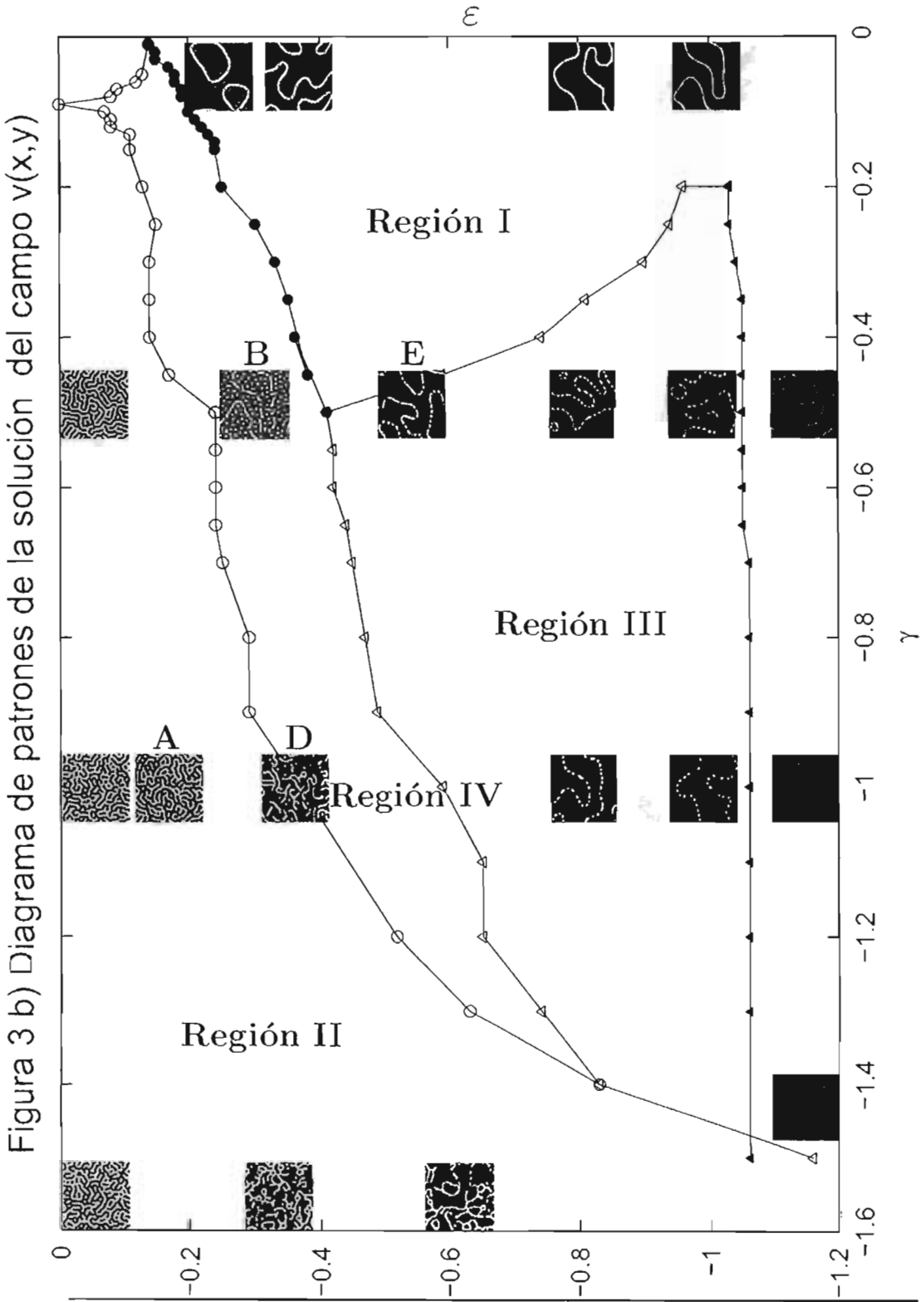
**Región IV (campo  $v$ )** La última de las regiones se extiende al resto del diagrama (localizada entre las regiones II y III). Los patrones pertenecientes a esta región son similares a los de la región anterior. *También tienen una fase interfacial con  $v < 0$ , colocada en las interfases de las regiones uniformes de  $u$ , pero la fase interfacial esta constituida de rayas y puntos en la dirección longitudinal, además de tener una mayor densidad de puntos en el resto del patrón. Dichas interfases y puntos están inmersos en una fase uniforme mayoritaria con  $v$  positiva*.

Para una observación más detallada de algunos de los diferentes tipos de patrones se exponen las figuras 3 d)

---

<sup>1</sup>Más adelante, en la sección 3.3, se definen las interfases mediante el estudio de sus propiedades.





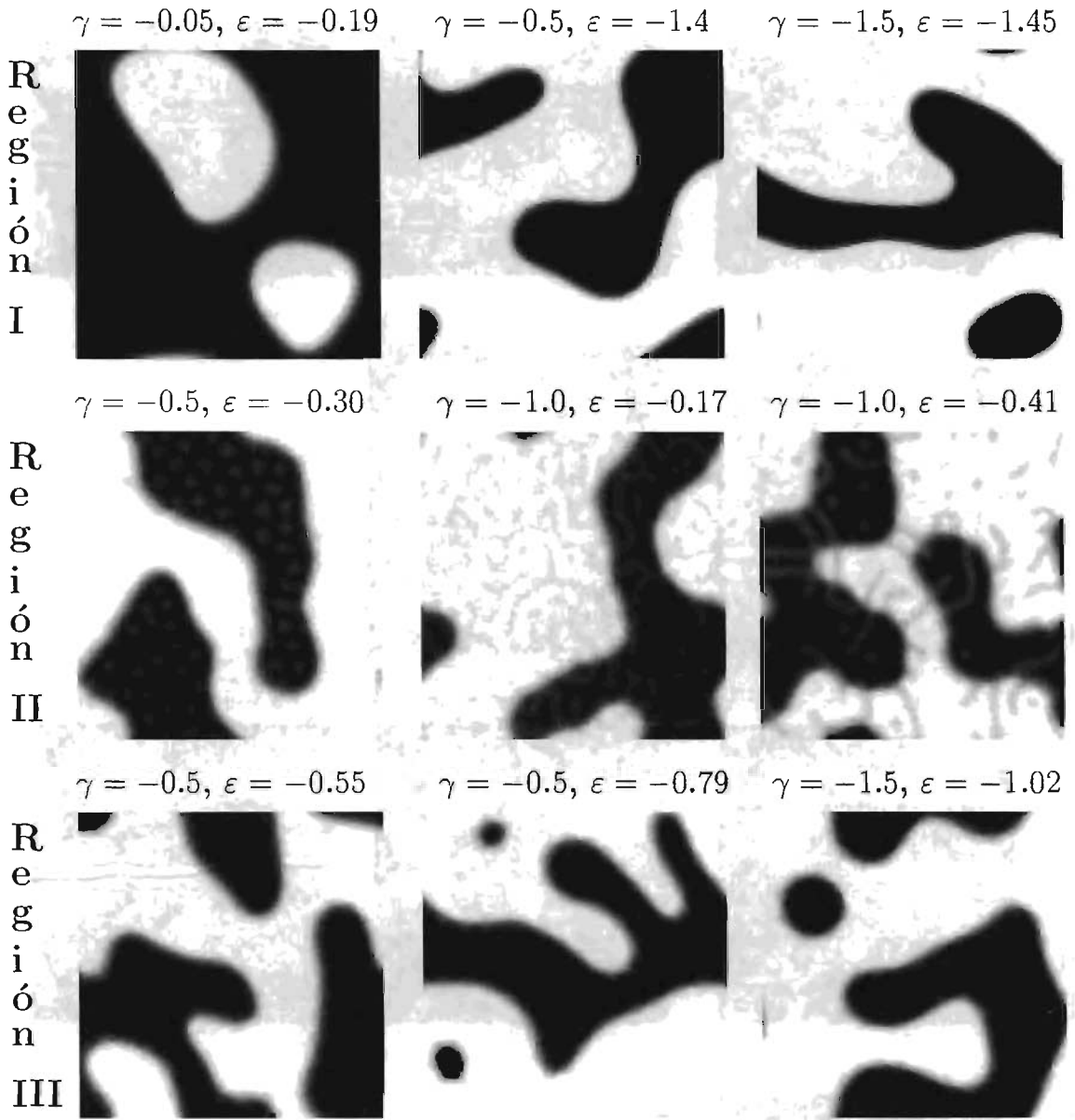


Figura 3 c) Detalles de algunos patrones de la figura 3 a)  
del diagrama de patrones para el campo  $u(x, y)$ .

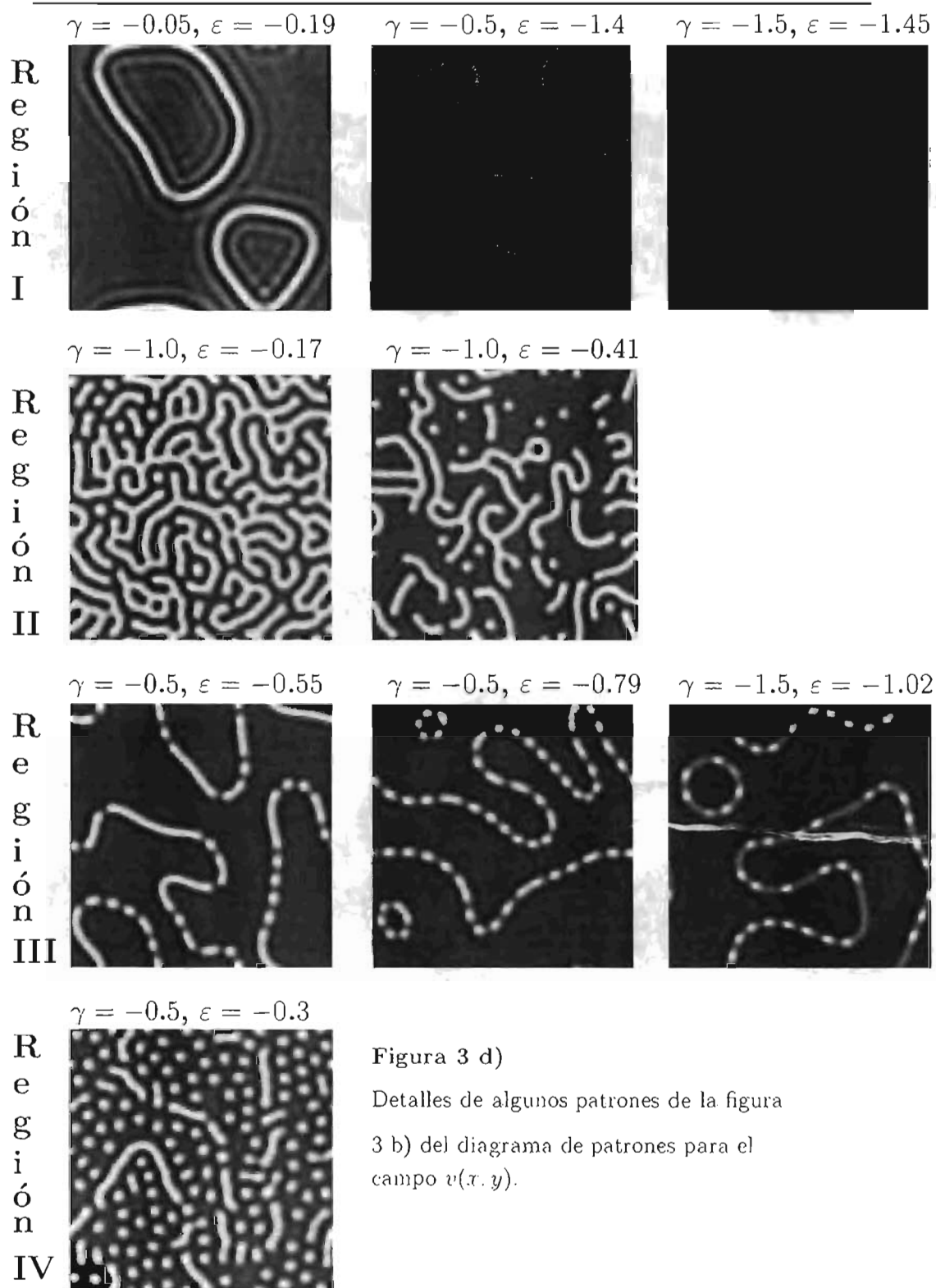


Figura 3 d)

Detalles de algunos patrones de la figura 3 b) del diagrama de patrones para el campo  $v(x, y)$ .



Debido a la riqueza y diversidad de los patrones observados, en este trabajo sólo se estudian 5 casos. Se eligen tres casos pertenecientes a la región II del diagrama de la figura 3 a) y 3 b), debido a que se desea estudiar la fase de mojado que surge en los patrones (ver también figuras 3 c) y 3 d)). Otro caso ubicado en la región III del diagrama de la figura 3 a) y 3 b), es dedicado al estudio también de la fase de mojado, pero con la finalidad de investigar el comportamiento interfacial de esta fase que se observa en los patrones (ver también figuras 3 c) y 3 d)). Y un último caso, se elige para investigar la dinámica de formación de la fase de mojado con forma de rayas y puntos (dicho patrón pertenece a la región III de la figura 3 a) y región IV de la figura 3 b)).

### 3.2. Caracterización morfológica de varios patrones de interés

Para el estudio de los cinco casos particulares elegidos, se toma una malla discreta de  $l_x = 512$  y  $l_y = 512$  nodos. Calculamos la evolución temporal del sistema hasta escalas de tiempo de  $t = 1000$  (corridas cortas) o de tiempo largo  $t = 10000$  (corridas largas) a partir de condiciones iniciales aleatorias para  $u$  y  $v$ . Las unidades de tiempo se siguen considerando adimensionales. La clasificación de los patrones por su morfología se define en las siguientes cuatro secciones.

#### 3.2.1. Patrón espacial del tipo A

Localizado en la región II de los diagramas expuestos en las figuras 3 a) y 3 b), de los campos  $u$  y  $v$  respectivamente. Los parámetros para este caso, se toman fijos con valores:  $\alpha = -0.5$ ,  $\lambda = 0.38$ ,  $\gamma = -1.0$  y  $\varepsilon = -0.17$  y se le da el nombre de **patrón espacial del tipo A**.

Las propiedades de este patrón son:

1. El campo  $u(x, y)$  tiene dos fases diferentes en su patrón. Una fase positiva (manchas de color negro) y otra negativa (manchas de color blanco). Estas fases son ligeramente moduladas debido al acoplamiento con el campo  $v(x, y)$ .
2. La forma del patrón para el campo  $v(x, y)$  son laberintos (rayas). Así mismo, las propiedades del patrón para el campo  $v(x, y)$  son, la existencia de dos microfases: una positiva (color negro) y una negativa (color blanco), ambas fases constituyen una forma típica de laberintos para este campo (ver figuras 3.1 y 3.2). Además, nótese que en el patrón del campo  $v(x, y)$ , no se observa de manera directa, en su forma la contribución del campo  $u(x, y)$ .

Por otro lado, una descripción cualitativa de la estructura interfacial en el patrón correspondiente a la ecuación de Ginzburg-Landau, se obtiene graficando los datos numéricos para los campos  $u(x, y)$  y  $v(x, y)$ . Se toma como eje de las abscisas el

campo  $u(x, y)$  y el de las ordenadas al campo  $v(x, y)$ . En las gráficas a) y b) de la figura 3.3, se muestra  $v(x, y)$  como función de  $u(x, y)$  para  $t = 1000$  y  $t = 10000$  respectivamente. Cada punto de estas gráficas a) y b), corresponde a una posición  $(x, y)$  en la malla de los patrones para los campo  $u$  y  $v$  de las figuras 3.1. Ambas gráficas son muy similares, por lo cual es suficiente con explicar la gráfica a) para que se obtenga la misma información para la gráfica b).

En el diagrama de la gráfica a) de la figura 3.3 para  $t = 1000$ , se observa que  $v$  oscila uniformemente entre  $-1$  y  $1$  (aproximadamente), mientras  $u$  se divide en dos fases casi uniformes ( $-0.7$  y  $0.7$  aproximadamente). Debido al acoplamiento con  $v$ ,  $|u|$  no es exactamente constante en sus fases positivas y negativas, sino que oscila ligeramente entre  $0.65$  y  $0.86$  (aproximadamente). lo cual produce las dos líneas inclinadas, densas en puntos.

También en este gráfica se observa que contiene menos puntos en su parte central, debido a una menor cantidad de interfases. La mayor cantidad de puntos se tiene con  $v < 0$  y  $u \approx 0$  que con  $v > 0$  y  $u \approx 0$ . Entonces las interfases que separan los dominios de  $u$  (y donde  $u \approx 0$ ) se encuentran colocadas entre la fase positiva y la negativa, mediante estructuras interfaciales en forma laberintos de rayas blancas ( $v < 0$ ). lo cual se puede observar en el patrón correspondiente a la ecuación de Ginzburg-Landau de la figura 3.1. así como en la imagen de la derecha de la figura 3.2.

Adicionalmente, en los diagramas de las gráficas a) y b) de la figura 3.3, se indican las soluciones uniformes obtenidas al resolver el sistema formado por las ecuaciones (2.7) y (2.8) evaluadas en los valores de parámetros correspondientes al patrón A, las cuales se encuentran de a modo de resumen en el cuadro 2.1 del capítulo 2. Se encuentran 9 soluciones uniformes  $(u_0, v_0) = (0.0, 0.0)$ ,  $(u_0, v_0) = (0.0, \pm 0.79)$ ,  $(u_0, v_0) = (\pm 0.61, -0.76)$ ,  $(u_0, v_0) = (\pm 0.7, -0.07)$ ,  $(u_0, v_0) = (0, \pm 0.83)$ . Estas soluciones probablemente son inestables, dado que no se observan en la solución numérica. Sin embargo, muchos puntos están cerca de 6 soluciones uniformes con  $u_0 \neq 0$ .

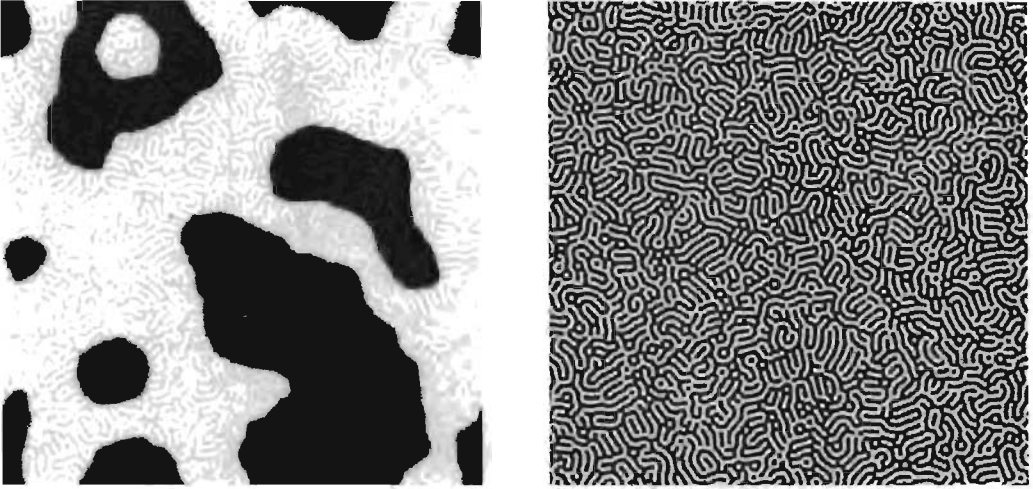


Figura 3.1: Patrones para el caso A generados por la solución numérica de las ecuaciones (2.5). La imagen de la izquierda corresponde al patrón del campo  $u(x, y)$  y la imagen de la derecha al campo  $v(x, y)$ .

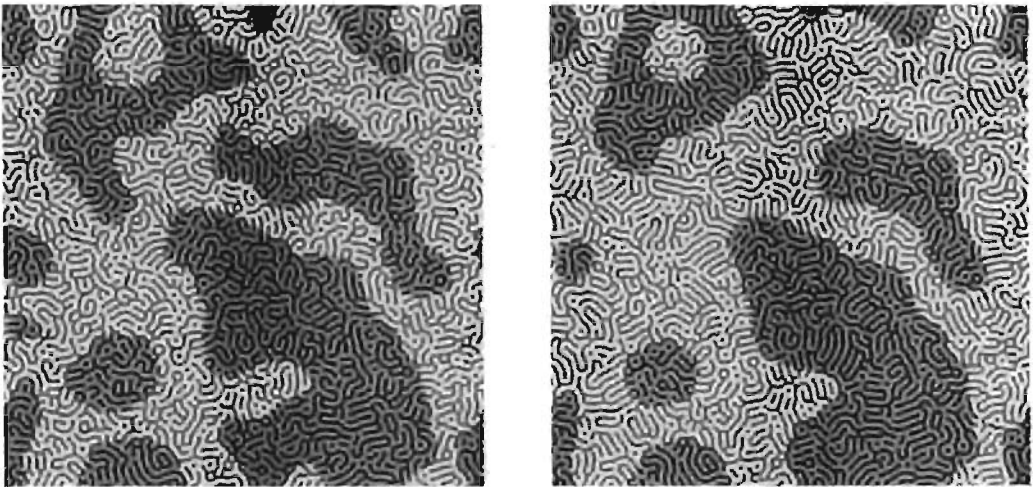
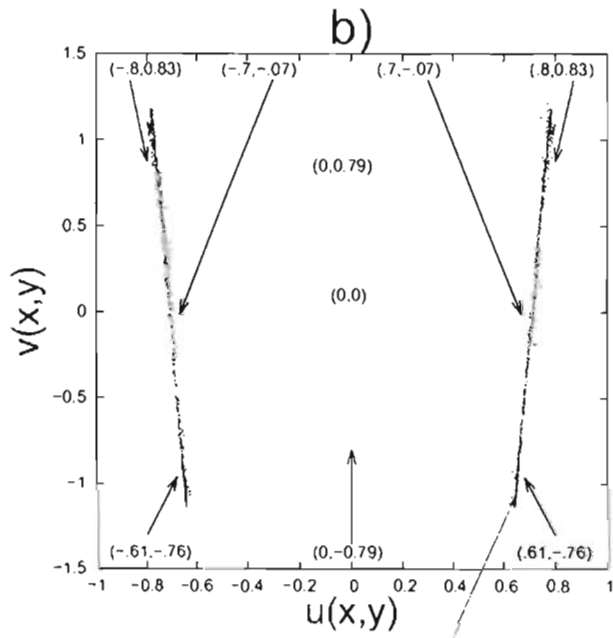
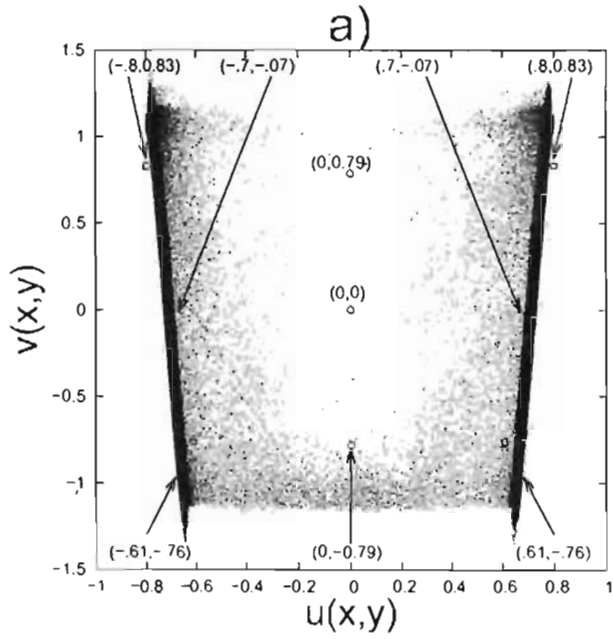


Figura 3.2: Patrones para el caso A generados por la solución numérica de las ecuaciones (2.5). La imagen de la izquierda corresponde al patrón generado por la diferencia  $(u - v)(x, y)$  al tiempo  $t = 1000$ , y la imagen de la derecha al tiempo  $t = 10000$  del mismo sistema.



### 3.2.2. Patrón espacial del tipo B

Localizado en la región II y IV para los diagramas correspondientes a los campos  $u(x, y)$  y  $v(x, y)$ , el **patrón espacial del tipo B** se define con los valores  $\alpha = -0.5$ ,  $\lambda = 0.38$ ,  $\gamma = -0.5$  y  $\varepsilon = -0.3$  (ver figuras 3.4 y 3.5).

El patrón del campo  $u(x, y)$ , forma manchas (fases positiva y negativa en color negro y blanco), rayas y puntos (fase en color gris). Y el patrón correspondiente al campo  $v(x, y)$ , posee una fase positiva mayoritaria (color negro) y una fase en forma de rayas y puntos (color gris). Los resultados son similares al patrón del tipo A. La diferencia entre el comportamiento de este patrón y el patrón del tipo A, es que existen mayor densidad de puntos en el patrón del tipo B.

Ahora, para observar el cambio de fases en el patrón, se grafican los datos numéricos para el campo  $u(x, y)$  y  $v(x, y)$ , y se obtienen las gráficas a) y b) de la figura 3.6. Estas gráficas muestran  $v(x, y)$  como función de  $u(x, y)$  para escalas de tiempo corto  $t = 1000$  y largo  $t = 10000$ . En la gráfica a) para  $t = 1000$ , se observa que  $v$  oscila uniformemente aproximadamente entre 1 y  $-1$ , mientras que  $u$  nuevamente se divide en dos fases casi uniformes:  $-0.7$  y  $0.7$  aproximadamente. Debido al término de acoplamiento  $-\varepsilon uv$ , el valor del campo  $|u|$  también oscila ligeramente entre 0.65 y 0.8, lo cual produce en la gráfica a) las líneas inclinadas con una mayor densidad de puntos.

Nuevamente, la gráfica a) de la figura 3.6, permite observar una menor densidad de puntos en su parte central, dado que contiene menor cantidad de interfases para estos valores de  $u$  y  $v$  (cada par  $(x, y)$  de la gráfica representa un punto de la malla de los patrones para los campos  $u$  y  $v$  de la figura 3.4). Se observa mayor cantidad de puntos para  $v < 0$  y  $u \approx 0$  que cuando  $v > 0$  y  $u \approx 0$ . Entonces, la interpretación de esto es que, por un lado, las interfases separan dominios de  $u$  y tratan de seguir contornos definidos principalmente mediante rayas blancas (por minimización de la energía); y por otro lado, las interfases cambian de una estructura de rayas a puntos para  $u$ . De hecho, se nota que las interfases son más rugosas que las de la ecuación de Ginzburg-Landau sin acoplamiento (ver por ejemplo el patrón de la ecuación de Ginzburg-Landau de la figura 3.4, las imágenes de la figura 3.5 y comparar con las imágenes de la figura 3 c)).

La interpretación de la gráfica 3.6 b) es la misma, la única diferencia con 3.6 a) está en que según evoluciona el sistema en el tiempo, la densidad de puntos en la gráfica es menor. Adicionalmente, se encuentran ahora 5 soluciones uniformes:  $(u_0, v_0) = (0.0, 0.0)$ ,  $(u_0, v_0) = (0.0, \pm 0.35)$  y  $(u_0, v_0) = (\pm 0.81, 0.55)$  al resolver el sistema dado por las ecuaciones 2.7 y 2.8, presentadas en las gráficas a) y b) de la figura 3.6. Dichas soluciones no se observan en la solución numérica a tiempo largos. Sin embargo, este patrón tiene una fase uniforme estable (ver sección 3.3.2, para  $v_0 > 0$  y  $\pm u_0$ ), que se puede observar a tiempos cortos solamente (a partir de la condición inicial aleatoria) como lo ilustra la imagen perteneciente a la región IV de la figura 3 d). La fase uniforme con  $v_0 > 0$  desaparece en el tiempo debido al aumento del número de puntos y rayas.

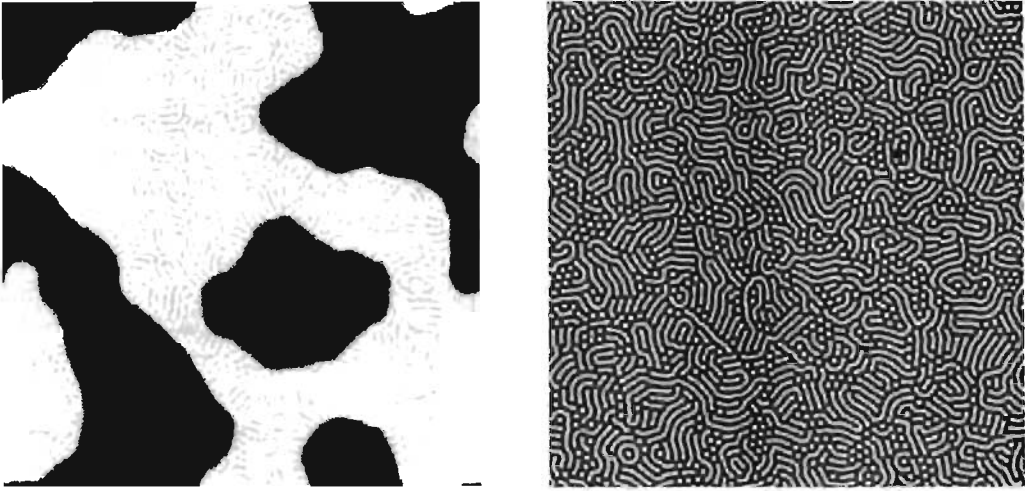


Figura 3.4: Patrones para el caso B generados por la solución numérica de las ecuaciones (2.5). La imagen de la izquierda corresponde al patrón del campo  $u(x, y)$  y la imagen de la derecha al campo  $v(x, y)$ .

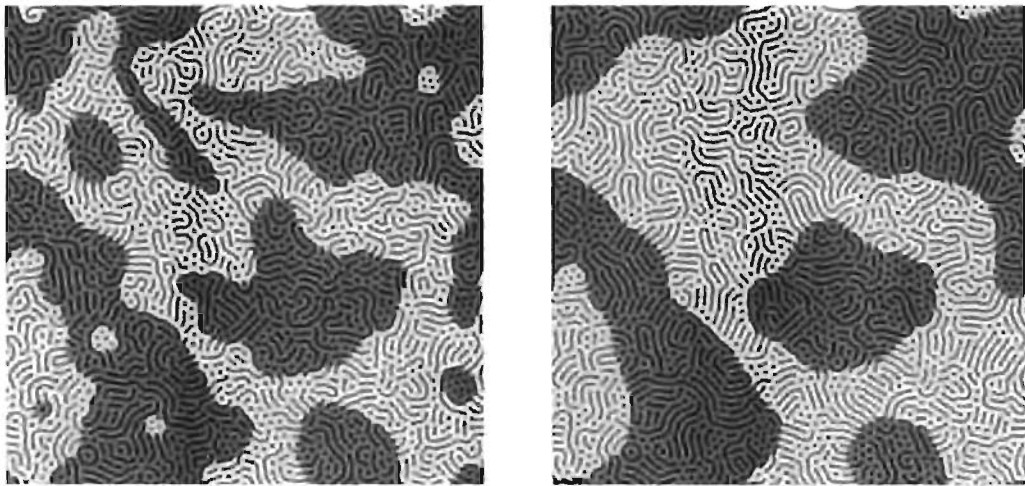


Figura 3.5: Patrones para el caso B generados por la solución numérica de las ecuaciones (2.5). La imagen de la izquierda corresponde al patrón generado por la diferencia  $(u - v)(x, y)$  al tiempo  $t = 1000$ , y la imagen de la derecha para el tiempo  $t = 10000$  del mismo sistema.

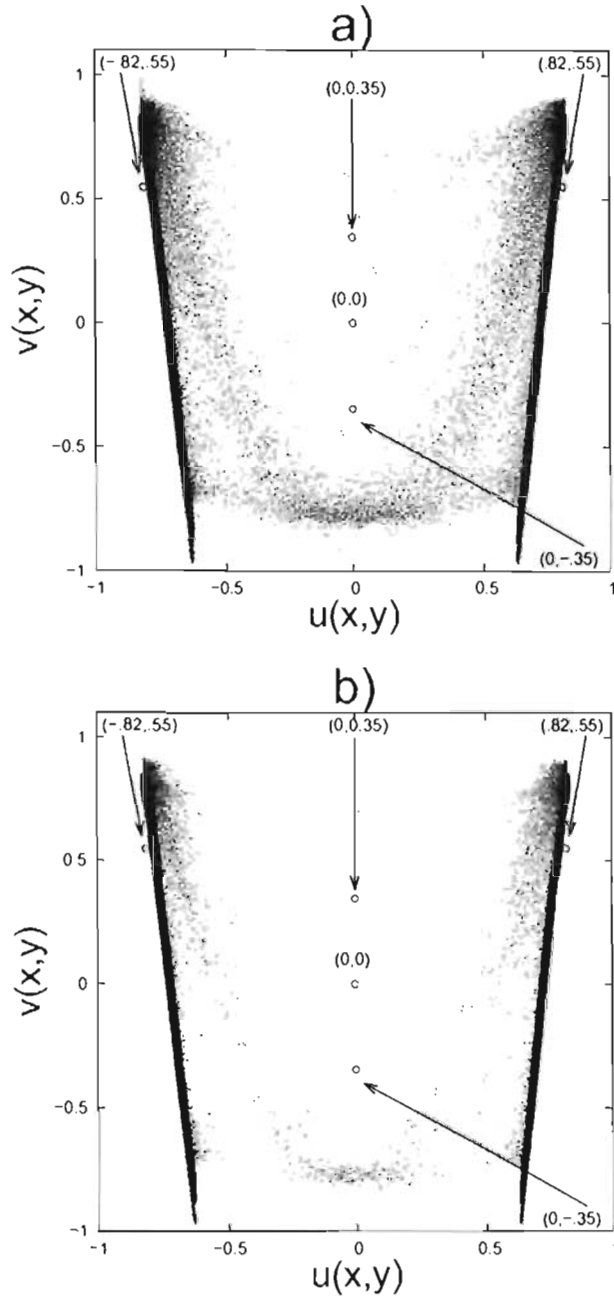


Figura 3.6: En las gráficas a) se muestra el correspondiente diagrama de los campos  $u(x, y)$  contra  $v(x, y)$  al tiempo  $t = 1000$ , y en la gráfica b) para el tiempo  $t = 10000$ .

### 3.2.3. Patrón espacial del tipo C

El patrón del tipo C se define para los valores fijos de los parámetros  $\alpha = -0.5$ ,  $\gamma = -0.5$ ,  $\varepsilon = -0.9$  y  $\lambda = 1.0$ .

Para el campo  $v(x, y)$  se observa la existencia de dos microfases: una positiva (color negro) y otra negativa formada por puntos con arreglos hexagonales. De manera interesante se observan lazos, los cuales al comparar con el patrón del campo  $u(x, y)$ , resultan seguir las interfases donde  $u \approx 0$ . Notemos que el patrón del tipo C es de evolución extremadamente lenta: las fases parecen “congeladas”, dado que no hay prácticamente ninguna diferencia entre los patrones a  $t = 1000$  y  $t = 10000$  (ver figura 3.8).

La forma de tal patrón para el campo  $u(x, y)$  es parecida a los patrones del tipo A y B, pues también tiene dos fases tales que una de ellas es positiva y la otra negativa, ambas ligeramente moduladas por la fase hexagonal. Las interfases separan dominios con  $u > 0$  y  $u < 0$ , están compuestas por una fase de inojado  $u \approx 0$  relativamente ancha (ver figuras 3.7 y 3.8).

En la figura 3.9 las gráficas a) y b) son los diagramas obtenidos al graficar  $v(x, y)$  como función de  $u(x, y)$  para tiempos  $t = 1000$  y  $t = 10000$  (nuevamente cada par  $(x, y)$  de la gráfica representa un punto de la malla de los patrones para los campos  $u$  y  $v$  de la figura 3.7). Estos diagramas son prácticamente iguales, debido a la evolución muy lenta del sistema. Se infiere que  $v$  oscila aproximadamente entre los valores  $-1.1$  y  $1.1$  (fase modulada hexagonal), y que  $|u|$  oscila entre  $0.5$  y  $1.1$  en cada una de las dos fases (debido al acoplamiento con  $v$ ) produciendo las líneas inclinadas. Las líneas oblicuas gruesas que conectan las fases  $u > 0$  y  $u < 0$ , se deben a los “lazos” ( $v_0 < 0$ ) mencionados anteriormente. Así mismo, la figura 3.9 muestra las 5 raíces uniformes del sistema:  $(u, v) = (\pm 1.10, 1.00)$ ,  $(u_0, v_0) = (\pm 1.00, 0.56)$ ,  $(u_0, v_0) = (0.0, 0.0)$ , obtenidas al resolver el sistema de ecuaciones (2.7) y (2.8). Muchos puntos del patrón están cerca de la solución no lineal.



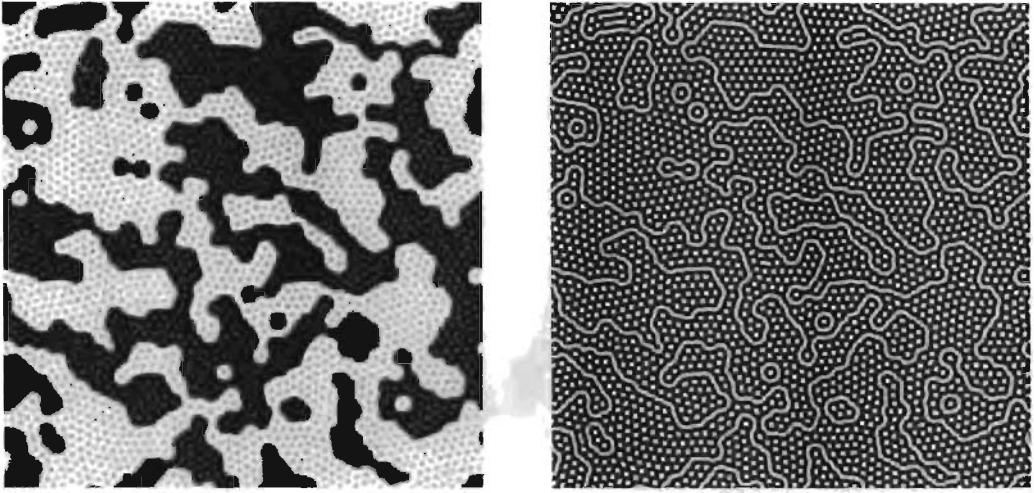


Figura 3.7: Patrones para el caso C generados por la solución numérica de las ecuaciones (2.5). La imagen de la izquierda corresponde al patrón del campo  $u(x, y)$ , y la imagen de la derecha corresponde al patrón del campo  $v(x, y)$ .

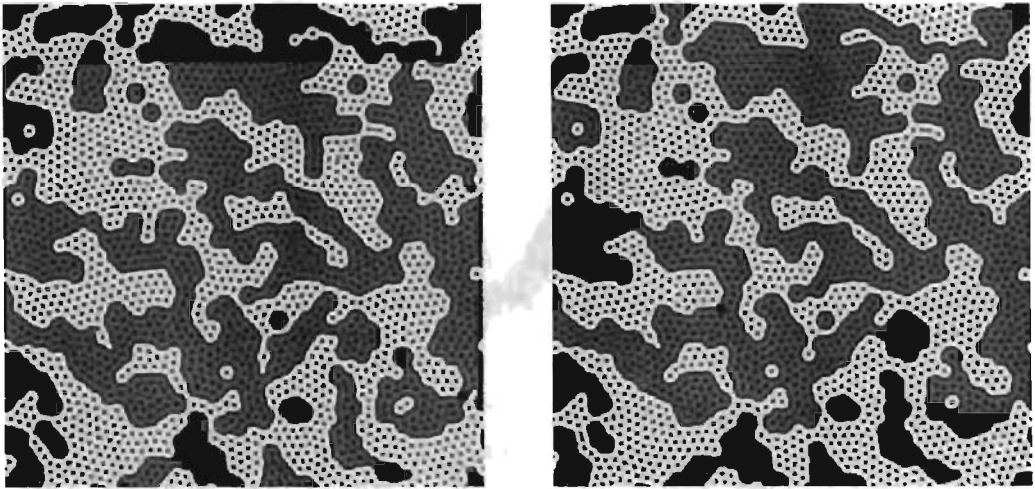


Figura 3.8: Patrones para el caso C generados por la solución numérica de las ecuaciones (2.5). La imagen de la izquierda corresponde al patrón generado por la diferencia  $(u - v)(x, y)$  al tiempo  $t = 1000$ , y la imagen de la derecha para el tiempo  $t = 10000$  del mismo sistema.

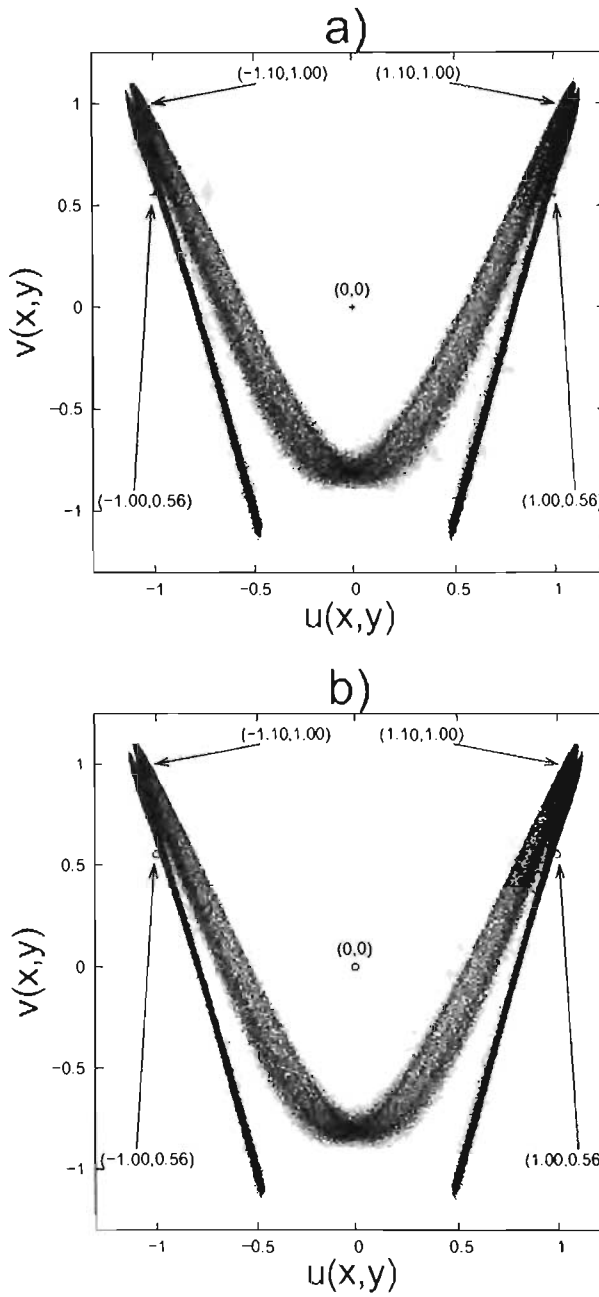


Figura 3.9: En las gráficas a) se muestra el correspondiente diagrama de los campos  $u(x, y)$  contra  $v(x, y)$  al tiempo  $t = 1000$ , y en la gráfica b) para el tiempo  $t = 10000$ .

### 3.2.4. Patrón espacial del tipo D

Este tipo de patrón se localiza en la región II de los diagramas correspondientes a los campos  $u(u, y)$  y  $v(u, y)$ . El patrón espacial del tipo D se define con valores  $\alpha = -0.5$ ,  $\lambda = 0.38$ ,  $\gamma = -1.0$  y  $\varepsilon = -0.41$ .

Este caso se caracteriza por tener dos fases uniformes para el campo  $u(x, y)$ . Las modulaciones en forma de laberintos se transforman en rayas con mucho menor densidad (semejantes en su forma a espaguetis) que forman una red que atraviesan los dominios, además de seguir el contorno de las interfases. También se observan puntos aislados (o estructuras localizadas). Para el patrón correspondiente al campo  $v(x, y)$ , hay una fase uniforme mayoritaria positiva (color negro) con las rayas y puntos en baja densidad mencionadas arriba. Ver las figuras 3.10 y 3.11.

En las gráficas a) y b) de la figura 3.12, se muestra  $v(x, y)$  como función de  $u(x, y)$  para un patrón típico a  $t = 1000$  segundos y a  $t = 10000$ . Contrariamente al patrón A, B, C, muchos puntos están cercanos a  $v \sim 1$  (la fase oscura mostrada en la figura 3.10 de la derecha). Las líneas oblicuas que terminan cerca de  $v \approx -1$  corresponden a los puntos y rayas dentro de los dominios  $u > 0$  y  $u < 0$ . La mayoría de las interfases entre estos dominios ( $u \approx 0$ ) producen una disminución de  $v$  (hasta el valor  $v \simeq -1$ ), que corresponden a la presencia de rayas o puntos en las interfases. Además observamos un fenómeno no presente en los casos anteriores: es posible pasar de  $u < 0$  a  $u > 0$  sin cambiar de signo de  $v$  (zonas superiores de la figura 3.10). Se debe a las estructuras localizadas presentes en las interfases. Adicionalmente, se encuentra 9 soluciones uniformes:  $(u_0, v_0) = (0.0, 0.0)$ ;  $(u_0, v_0) = (0.0, \pm 0.79)$ ;  $(u_0, v_0) = (\pm 0.44, -0.75)$ ;  $(u_0, v_0) = (\pm 0.66, -0.15)$  y  $(u_0, v_0) = (\pm 0.93, 0.90)$ , al resolver el sistema de ecuaciones (2.7) y (2.8). Más aún, en la gráfica c) de la figura 3.13 se representan estas soluciones, obtenidas a partir de las gráficas de las ecuaciones (A.42) y (A.43) (la forma explícita de las funciones graficadas se encuentra en el apéndice A.4). Al comparar las gráficas a) y b) de la figura 3.13) con la c) de la misma figura, es fácil ver que las soluciones  $(u_0, v_0) = (\pm 0.93, 0.90)$  son estables, pues aparecen en la solución numérica. El resto de las soluciones es de carácter inestable.

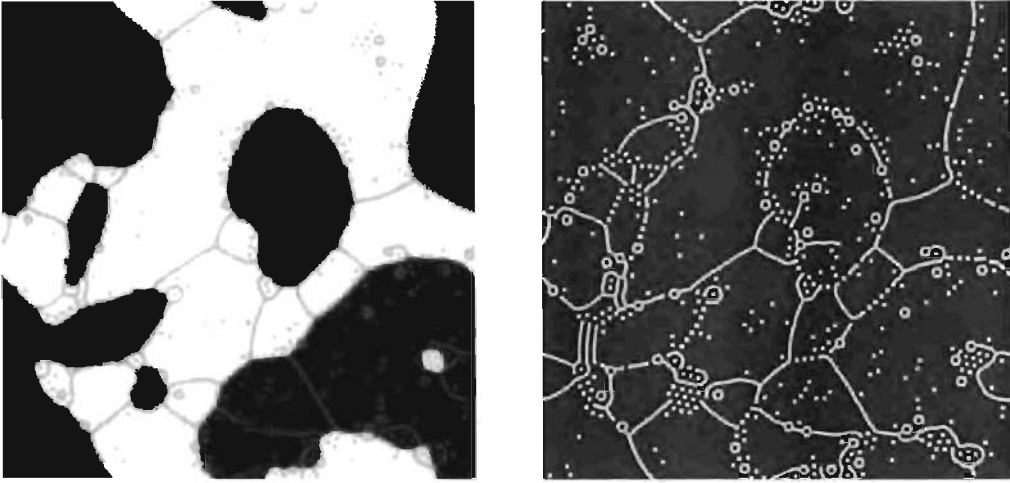


Figura 3.10: Patrones para el caso D generados por la solución numérica de las ecuaciones (2.5). La imagen de la izquierda corresponde al patrón del campo  $u(x, y)$  y la imagen de la derecha al campo  $v(x, y)$ .

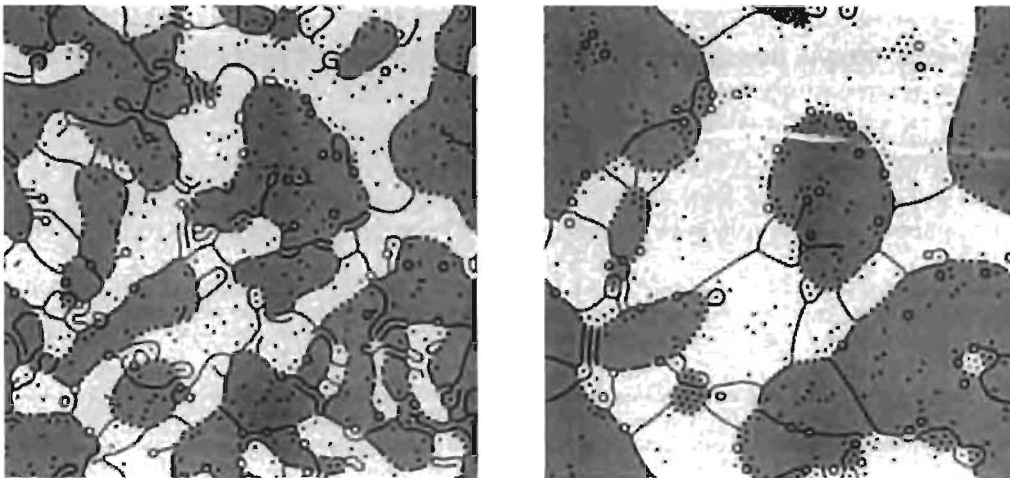


Figura 3.11: Patrones para el caso D generados por la solución numérica de las ecuaciones (2.5). La imagen de la izquierda corresponde al patrón generado por la diferencia  $(u - v)(x, y)$  al tiempo  $t = 1000$ , y la imagen de la derecha para el tiempo  $t = 10000$  del mismo sistema.

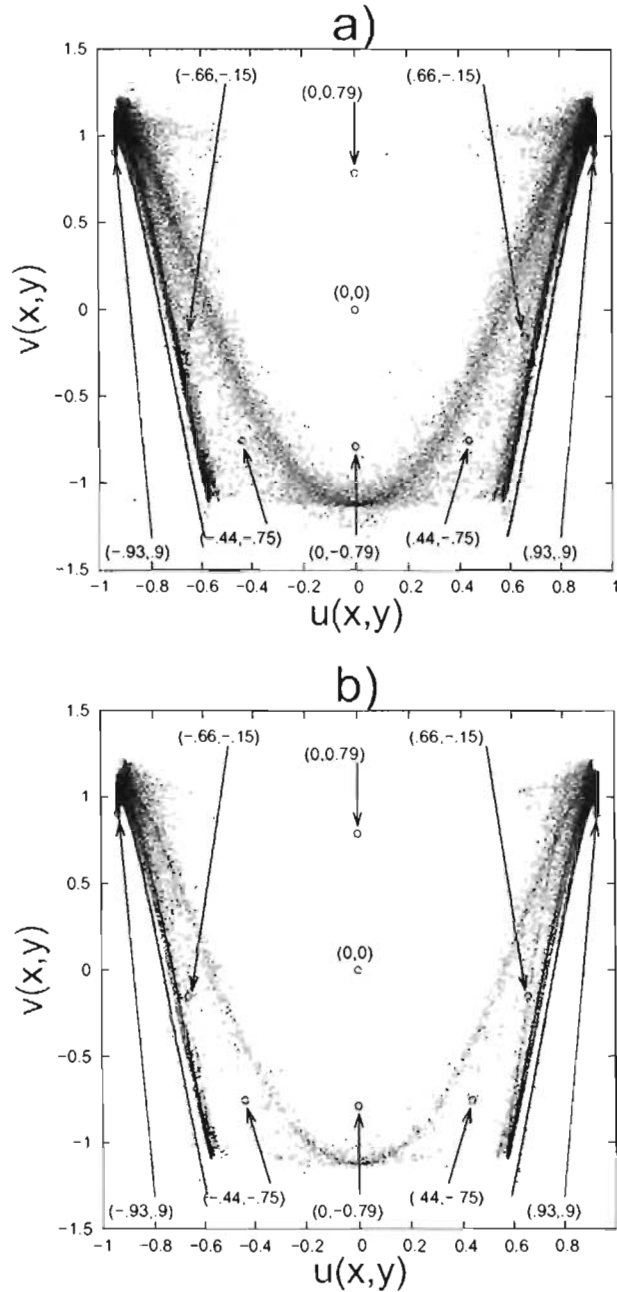


Figura 3.12: En la gráfica a) se muestra el correspondiente diagrama de los campos  $u(x, y)$  contra  $v(x, y)$  al tiempo  $t = 1000$ , y en la gráfica b) para el tiempo  $t = 10000$ .

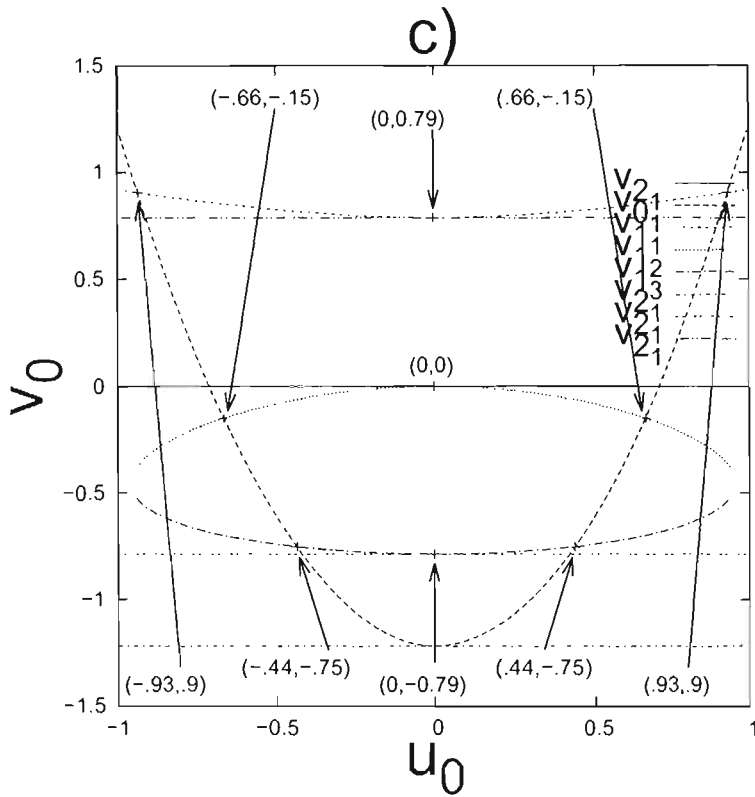


Figura 3.13: Representación gráfica de los valores de las raíces uniformes. Las raíces son los puntos de intersección que se dan entre las curvas  $v_{21}$ ,  $v_{01}$ ,  $v_{11}$ ,  $v_{12}$ ,  $v_{13}$ ,  $v_{21}$ ,  $v_{22}$ , y  $v_{23}$ . Tales curvas se muestran de manera explícita en el Apéndice A.5

### 3.2.5. Patrón espacial del tipo E

El último tipo de patrón (del tipo E) está localizado en la región III de los diagramas correspondientes a los campos  $u(x, y)$  y  $v(x, y)$  con parámetros fijos  $\alpha = -0.5$ ,  $\gamma = -0.5$ ,  $\lambda = -0.38$  y  $\epsilon = -0.55$ .

La principal propiedad de este patrón para el campo  $u(x, y)$  es la de tener dominios de fases uniformes positiva y negativa (color negro y blanco respectivamente mostrado en la figura 3.14), entre las cuales existe una estructura interfacial (en color gris ver figura 3.14). Además, el campo  $v(x, y)$  tiene una fase mayoritaria positiva (en color negro) y una estructura interfacial con  $v < 0$  (color claro en la fig. 3.14) ubicada en las fronteras que separan los dominios con  $u = \text{constante}$  (ver figuras 3.14 y 3.15).

Como en el patrón D anterior, la estructura interfacial se caracteriza por un cambio de signo en  $v$  ( $v < 0$ ). A diferencia del caso D, casi todas las regiones con  $v < 0$  están en las interfases ( $u \approx 0$ ), y no en el interior de los dominios ( $u \approx \pm u_0$ ).

Las gráficas a) y b) de la figura 3.17, muestran  $v(x, y)$  como función de  $u(x, y)$  para un patrón típico obtenido a partir de condiciones aleatorias para  $u$  y  $v$ , a  $t = 1000$  y  $t = 10000$ , respectivamente. Muchos puntos corresponden a las fases uniformes en buen acuerdo con la solución analítica estable  $(u_0, v_0) = (\pm 0.94, 0.69)$  obtenida al resolver las ecuaciones (2.7) y (2.8). Adicionalmente se encuentran otras 3 soluciones uniformes inestables:  $(u_0, v_0) = (0.0, 0.0)$ ,  $(u_0, v_0) = (0.0, \pm 0.35)$ . Todas estas soluciones se presentan en la gráfica c) de la figura 3.17 como resultado de graficar las ecuaciones (A.42) y (A.43) (si el lector desca observar la forma explícita de las funciones graficadas, ver el apéndice A.5). Al comparar las gráficas a) y b) con la gráfica c). Se puede concluir que las últimas tres raíces uniformes resultan ser de carácter inestable al no aparecer en la solución numérica.



Figura 3.14: Patrones para el caso E generados por la solución numérica de las ecuaciones (2.5). La imagen de la izquierda corresponde al patrón del campo  $u(x, y)$  y la imagen de la derecha al campo  $v(x, y)$ .

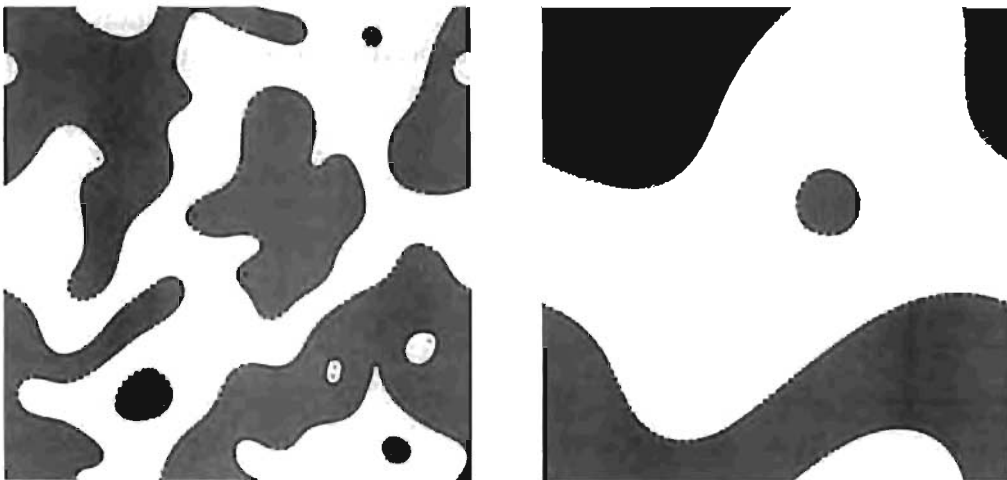


Figura 3.15: Patrones para el caso E generados por la solución numérica de las ecuaciones (2.5). La imagen de la izquierda corresponde al patrón generado por la diferencia  $(u - v)(x, y)$  al tiempo  $t = 1000$ , y la imagen de la derecha para el tiempo  $t = 10000$  del mismo sistema.



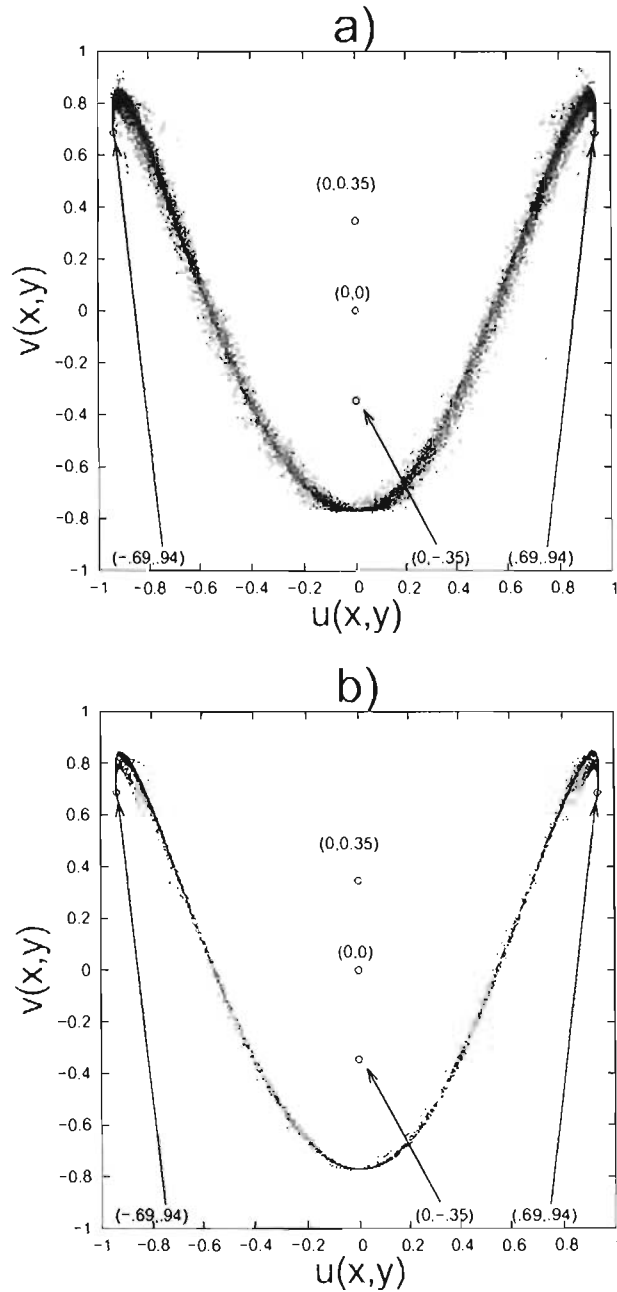


Figura 3.16: En la gráfica a) se muestra el correspondiente diagrama de los campos  $u(x, y)$  contra  $v(x, y)$  al tiempo  $t = 1000$ , y en la gráfica b) para el tiempo  $t = 10000$ . En la gráfica c), se representan los valores de las raíces uniformes.

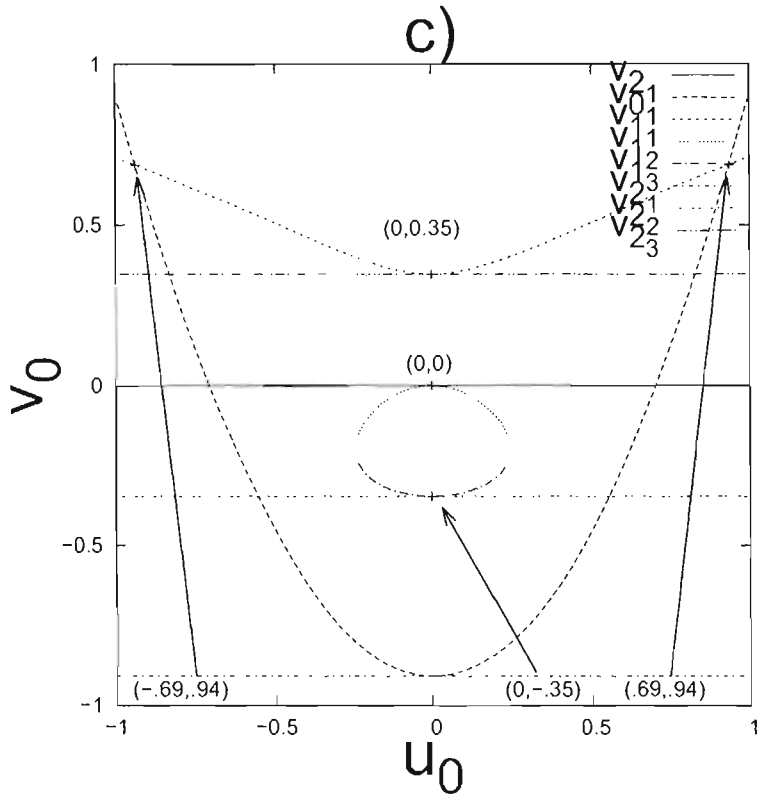


Figura 3.17: Representación gráfica de los valores de las raíces uniformes. Las raíces son los puntos de intersección que se dan entre las curvas  $v_{21}$ ,  $v_{01}$ ,  $v_{11}$ ,  $v_{12}$ ,  $v_{13}$ ,  $v_{21}$ ,  $v_{22}$ , y  $v_{23}$ . Tales curvas se muestran de manera explícita en el Apéndice A.5

### 3.3. Estructuras interfaciales

En la siguiente sección se muestran los resultados del análisis de las interfases existentes en los patrones del tipo D y E, que son los patrones que tienen fases uniformes. Dividimos el estudio en dos rubros: se investiga la estructura espacial de las interfases y se calcula luego su tensión superficial.

#### 3.3.1. Ubicación de las interfases y defectos

En los patrones de tipo D y E (ver figuras 3.10, 3.14), se observa la existencia de una estructura interfacial. Con el objetivo de hacer un análisis de la estructura interna de esta fase, se hace una subrutina que crea histogramas de los valores de  $u$  y  $v$ . Los histogramas resultantes del análisis de estos datos para el patrón del tipo D, se muestran en la figura 3.18. Se notan claramente los picos correspondientes a las fases uniformes. A partir de la gráfica 3.19 a) definimos los puntos tales que el campo  $u$  tiene valor entre  $-0.7$  y  $0.7$ , como puntos pertenecientes a la estructura interfacial o en la vecindad de algún defecto. Y en la gráfica b) de esta misma figura definimos los valores de la estructura interfacial para  $v$  en el intervalo  $[-0.35, 0.35]$ .

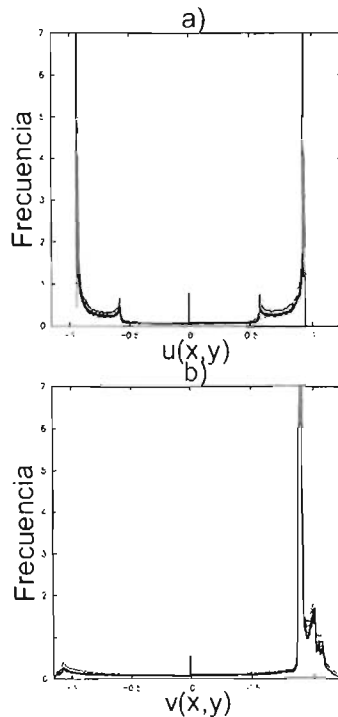


Figura 3.18: Las gráficas a) y b) corresponden a los histogramas de los campos  $u(x, y)$  y  $v(x, y)$  (patrón del tipo D), obtenidos a partir de los datos de las figuras 3.10, para  $t = 10000$ .

Una forma pictográfica de mostrar los resultados de los histogramas, se presenta en las gráficas resultantes que muestra la figura 3.19, donde los puntos oscuros de la malla tienen valores de  $u_0$  y  $v$  que cumplen con los intervalos anteriores. La gráfica a) muestra las estructuras interfaciales correspondientes al campo  $u$  y la gráfica b) las estructura interfaciales correspondientes al campo  $v$ .

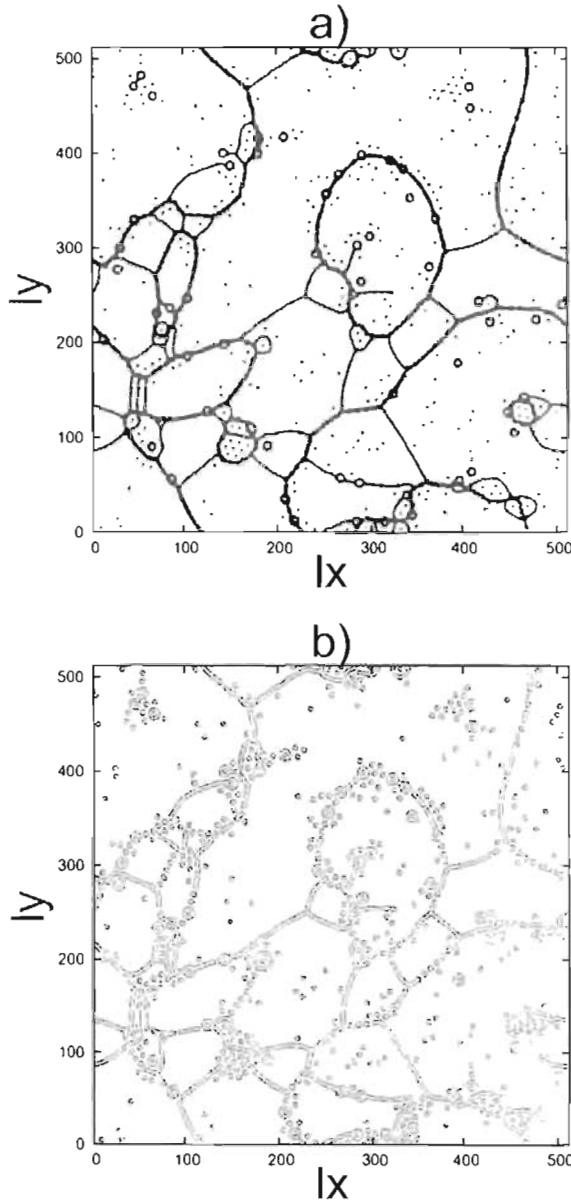


Figura 3.19: En las gráficas a) y b) se muestran las interfases formadas en los patrones del tipo D para los campos  $u(x, y)$  y  $v(x, y)$  respectivamente al tiempo  $t = 10000$ .

### 3.3.1 Ubicación de las interfases y defectos

La estructura de la formación de interfases, se puede observar en las gráficas de las figuras 3.20 y 3.21. La gráfica a) de la figura 3.20, muestra un corte del patrón del tipo D de la variación de la concentración del campo  $u(x, y)$  con coordenada fija  $y = 128$  al tiempo  $t = 10000$ . Así mismo, en la gráfica a) de la figura 3.21, se muestra un corte de la variación de la concentración del campo  $v(x, y)$  manteniendo fija la coordenada  $y = 256$  del patrón del tipo D. Estas gráficas permiten observar que la estructura de la zona interfacial para  $v$ , está formada por una bicapa como se puede apreciar en la figura 3.19 b). Esta propiedad es una característica de las membranas biológicas formadas por bicapas de lípidos[5, 28].

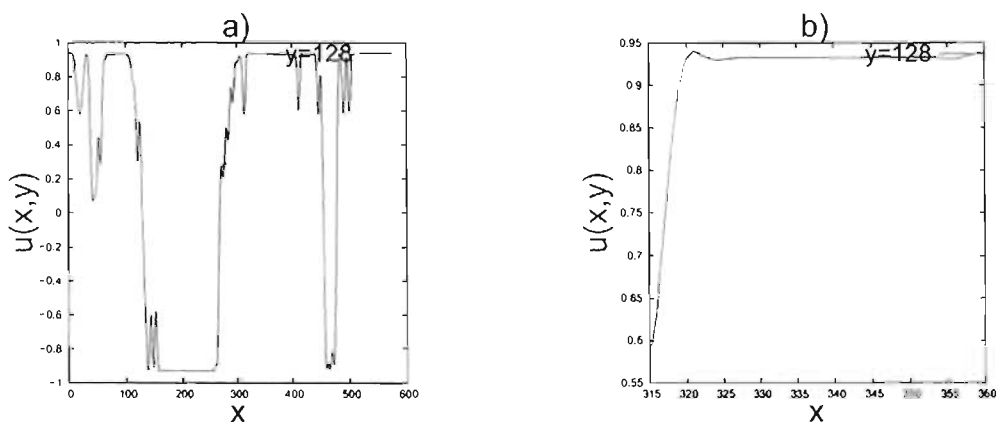


Figura 3.20: La gráfica a) es un corte del patrón del tipo D para  $y = 128$  al tiempo  $t = 10000$ , y la gráfica b) es una ampliación del intervalo  $[315, 360]$  para la coordenada  $x$  de la gráfica a).

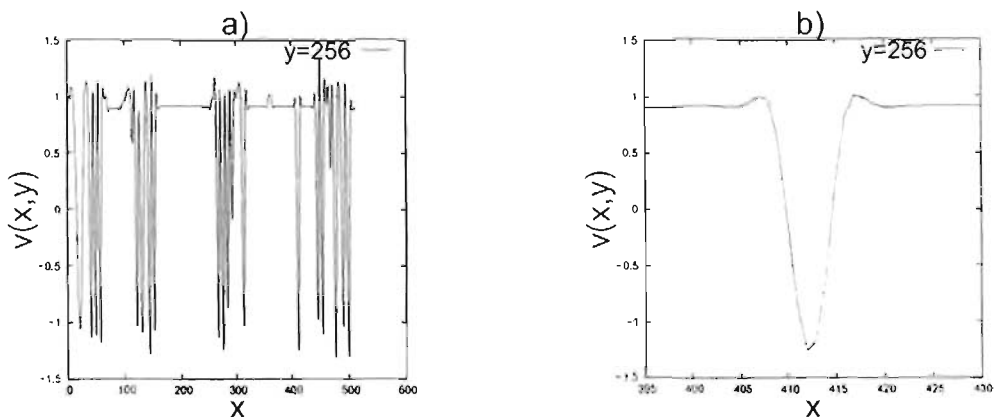


Figura 3.21: La gráfica a) es un corte del patrón del tipo D para  $y = 256$  al tiempo  $t = 10000$ , y la gráficas b) es una ampliación del intervalo  $[315, 360]$  para la coordenada  $x$  de la gráfica a).

Por otra parte, para el caso del patrón del tipo E, el análisis de los datos de los patrones de la figura 3.14 se expone en los histogramas de la figura 3.22. Con la gráfica a) de esta figura definimos la estructura interfacial para el campo  $u$  por los puntos  $(x, y)$  tales que  $-0.7 \leq u(x, y) \leq 0.7$ . A si mismo, en la gráfica b) los valores correspondientes a la zona interfacial para el campo  $v$ , están entre  $[-0.35, 0.35]$ . Nuevamente de manera pictográfica, dados los rangos establecidos anteriormente para  $u$  y  $v$ , se grafican las posiciones de los puntos de la malla y el resultado se muestra en la figura 3.23. La gráfica a) muestra la zona interfacial del patrón del tipo E para el campo  $u$ , y la gráfica b) muestra la interfase del patrón del tipo E para el campo  $v$ .

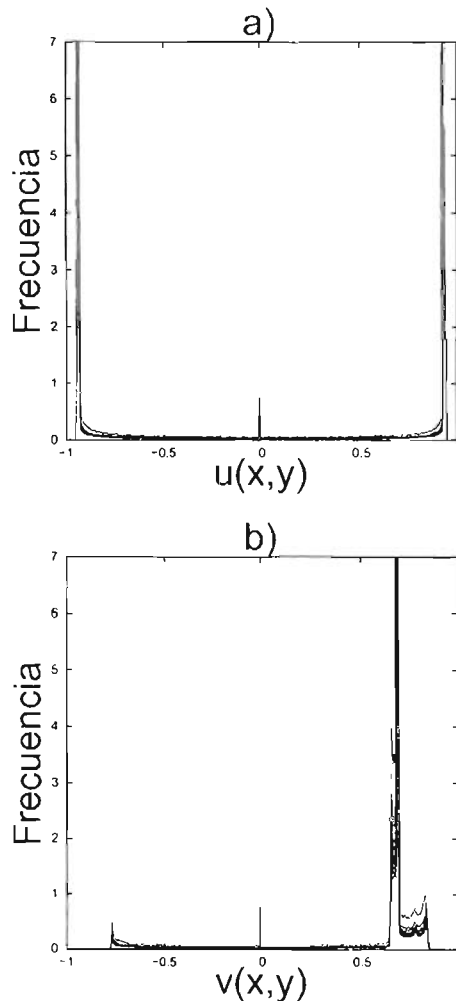


Figura 3.22: Las gráficas a) y b) corresponden a los histogramas de los campo  $u(x, y)$  y  $v(x, y)$  (patrón del tipo E), obtenidos a partir de los datos de las figuras 3.14, para  $l = 10000$ .

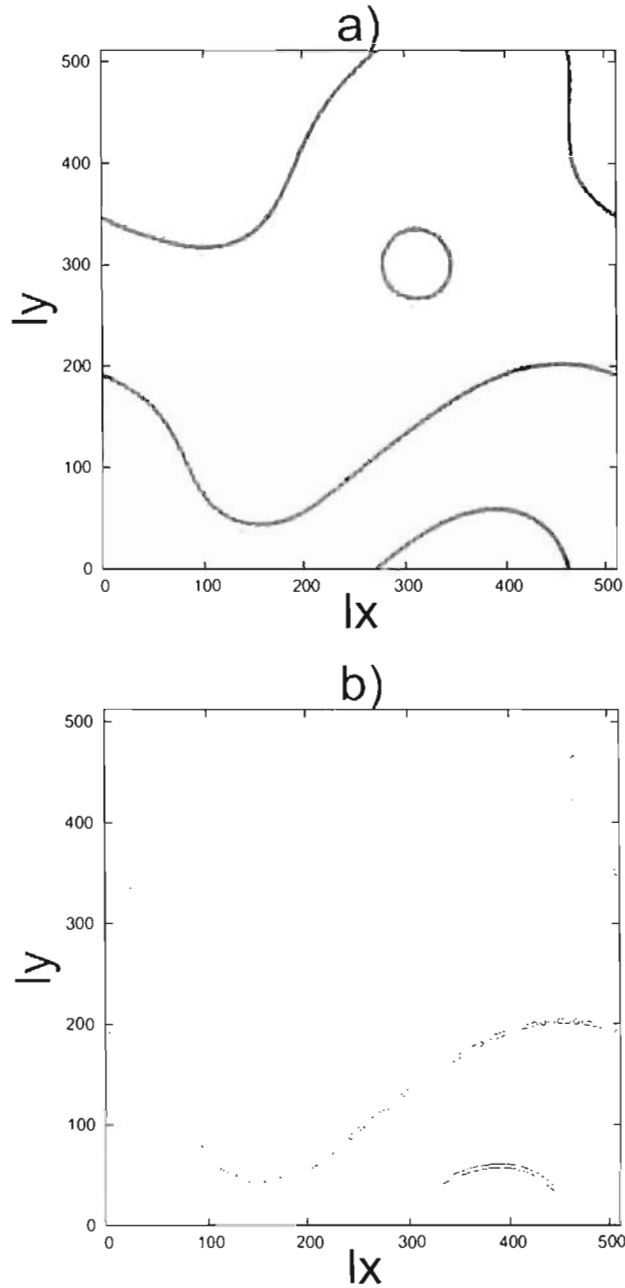


Figura 3.23: En las gráficas a) y b) se muestra las interfases formadas en los patrones del tipo E para los campos  $u(x, y)$  y  $v(x, y)$  respectivamente al tiempo  $t = 10000$ .

Nuevamente, para observar la estructura interna de las interfases, en la figura 3.24 se grafican cortes de cada patrón de campos  $u$  y  $v$ . La gráfica a) de la misma figura muestra un corte de la variación de  $u$ , manteniendo  $y = 128$  fija. Y en la gráfica b), se muestra otro corte para la variación de la concentración del campo  $v$  (para  $y = 128$  fija). También se encuentra que la estructura de las interfases está compuesta por una bicapa, cuyos perfiles son muy parecidos a los producidos en modelos de microemulsiones sobre mallas[8]. Adicionalmente encontramos resultados similares con modelos continuos que emplean dos parámetros de orden[29, 30]. Estos modelos son similares a los nuestros, pero son más simples, por ejemplo no forman fases moduladas.

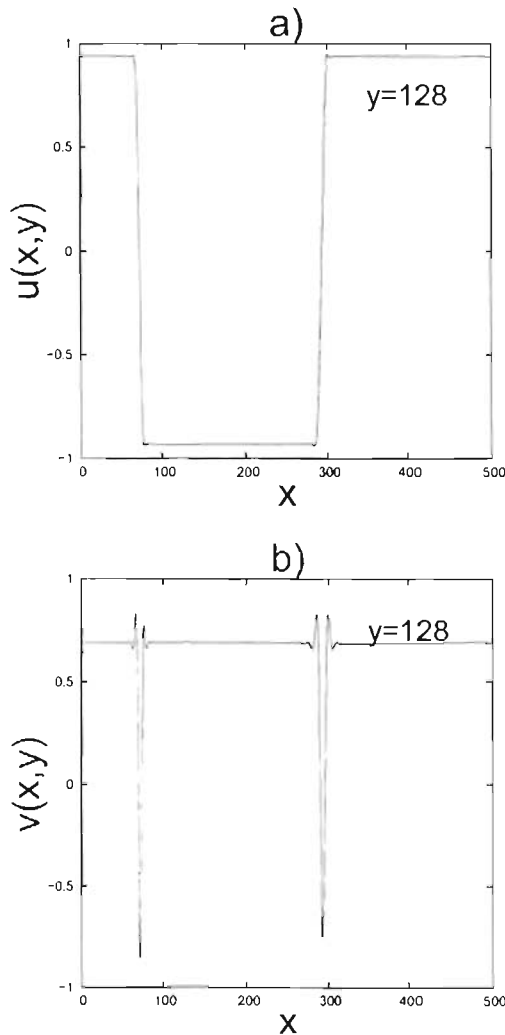


Figura 3.24: Las gráficas c) y d) muestran cortes del patrón del tipo E para  $ly = 128$  para los campos  $u(x,y)$  y  $v(x,y)$  respectivamente al tiempo  $t = 10000$ .



### 3.3.2. Reducción drástica de la tensión superficial

Es bien conocido que la tensión superficial entre fases fluidas puede ser reducida por tensoactivos[5]. Una aplicación importante es la descripción de las membranas biológicas formadas por lípidos. Así, la modelación de membranas en mezclas, toma en cuenta fuerzas anfifílicas e hidrofílicas existentes entre el tensoactivo y las fases fluidas. El resultado es la formación de una interfase (membrana), que puede llegar a tener una tensión superficial casi cero como se reporta en la literatura. Queremos mostrar que el modelo propuesto aquí tiene propiedades similares.

En otros estudios de formación de interfases en mezclas ternarias, también se calcula la tensión superficial. Tales estudios se hacen por ejemplo mediante modelos de gas de malla (inspirados del modelo de Ising con espín-1), también para el caso de una mezcla de tres componentes[28; 8]. En estos trabajos, se reportan diagramas para algún parámetro de orden como función de alguna variable (como por ejemplo la temperatura o la interacción entre vecinos), además del comportamiento de la tensión superficial en las interfases. Estos diagramas presentan regiones en las que hay fase de mojado y de inmiscibilidad entre los componentes de la mezcla[28]. Gráficas similares a la nuestra se obtienen para valores de  $\sigma$ , que pueden ser muy bajos[8].

En el patrón del tipo E o D, el campo  $v$  juega el papel de un tensoactivo: las regiones con gradientes en  $v$  y  $v \neq v_0$  (en particular  $v < 0$ ) se concentran cerca de las interfases separando dominios con  $u \approx \pm u_0$  (ver fig. 3.25). Calculamos la tensión superficial (o lineal) denotada por  $\sigma$  de una interfase plana separando dos dominios con  $u = \pm u_0$  lejos de la interfase. Se emplea la energía libre del sistema dada por la ecuación (2.6) con  $h = 0$ ,  $H = 0$ , cuyos términos cuadráticos se calculan numéricamente en el espacio de Fourier. La fórmula explícita para este cálculo es:

$$\sigma = \frac{F[u, v] - F[u_0, v_0]}{L} \quad (3.1)$$

donde  $F[u, v]$  es la energía libre para alguna configuración bidimensional que contiene interfases planas,  $L$  es la longitud total de las interfases ( $2l_y$  en la figura 3.25), la energía libre  $F[u_0, v_0]$  corresponde a la energía del patrón uniforme y es tal que:

$$F[u_0, v_0] = \int \left[ \frac{\alpha}{2} u_0^2 + \frac{1}{4} u_0^4 + \frac{\varepsilon}{2} u_0^2 v_0 + \frac{\gamma}{2} v_0^2 + \frac{1}{4} v_0^4 + \frac{\lambda}{2} v_0^2 \right] d\vec{r}.$$

Aquí, fijamos los valores para los parámetros  $\alpha = -0.5$ ,  $\gamma = -0.5$ ,  $\lambda = 0.38$  y variamos  $\varepsilon$  en el intervalo  $[-1.15, -0.18]$ . En este intervalo de valores se han observado fases uniformes estables. Se elige en particular para el cálculo de  $F[u, v]$  la configuración de la figura 3.25, con condición inicial  $u_0 = \pm 0.9$ ,  $v_0 = -1.0$  y  $L = 2l_y$  y  $l_y = 128$  nodos. Ambas energías en la ecuación (3.1) se calculan numéricamente dejando evolucionar el sistema hacia su estado estacionario. Los resultados de  $\sigma$  al variar  $\varepsilon$  se presentan en la gráfica 3.26. Esta muestra una reducción en la energía de la tensión superficial  $\sigma$  cuando  $|\varepsilon|$  disminuye.

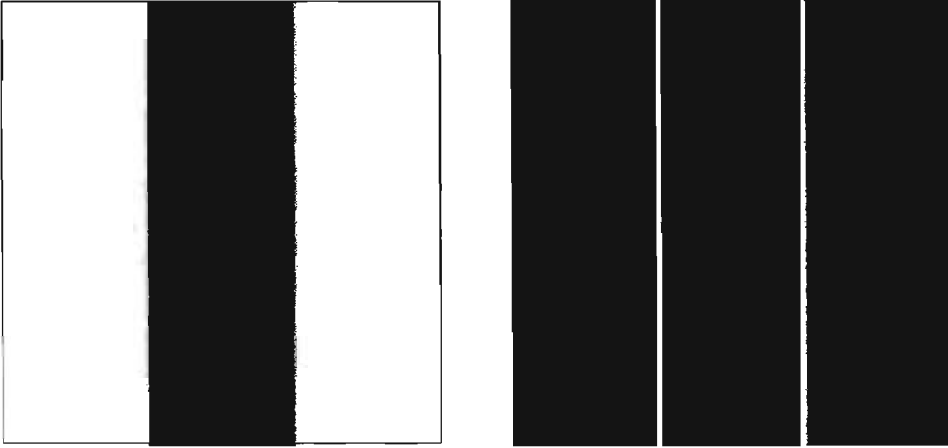


Figura 3.25: Patrones con valores de parámetros  $\alpha = -0.5, \gamma = -0.5, \varepsilon = -0.55$  al tiempo  $t = 1000$ . La imagen de la izquierda es el patrón para el campo  $u(x, y)$  y la imagen de la derecha es el patrón para el campo  $v(x, y)$ .

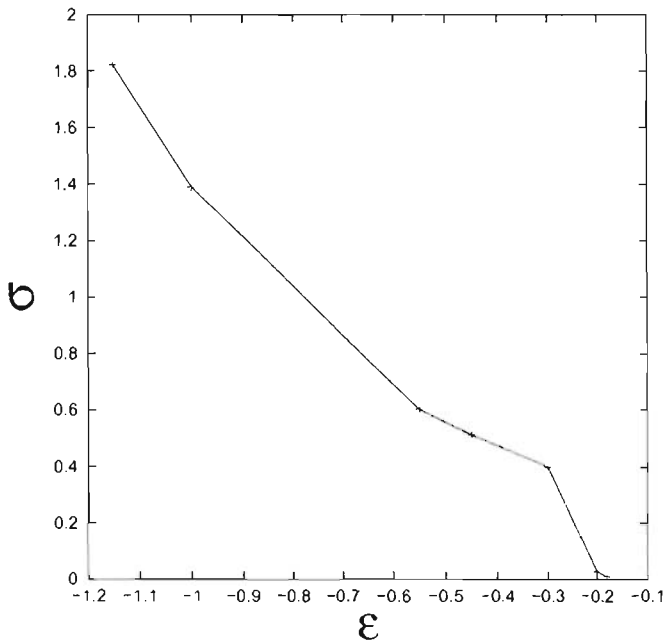


Figura 3.26: Variación de la tensión superficial  $\sigma$  respecto al parámetro  $\varepsilon$  con  $\alpha = -0.5, \gamma = -0.5, \text{ y } \lambda = 0.38$ .

Se sabe que el comportamiento de dicha gráfica no necesariamente es una transición de fase, pues en [8]. se tiene el mismo comportamiento para la tensión superficial. Se encuentra que para  $\varepsilon = -0.2$  el valor de  $\sigma$  es 0.02.

### 3.4 Dinámica de ordenamiento (coarsening)

Para tener una idea del orden de magnitud de  $\sigma$ , recordemos que la tensión interfacial  $\sigma_{\text{GL}}$  para una interfase estacionaria perteneciente a la ecuación de Ginzburg-Landau, sin término de acoplamiento ( $\varepsilon = 0$ ),  $0 = \alpha u - u^3 + \partial_x^2 u$ , está dada por:  $\sigma_{\text{GL}} = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 dx = (4/3)\alpha \approx 0.66$  donde la solución para una pared ("kink") toma la forma  $u = \sqrt{\alpha} \tanh(x)$ [9]. Entonces, el valor mínimo calculado aquí es:  $\sigma = 0.02$ , resulta ser aproximadamente el 3% de la tensión interfacial de un patrón tipo Ginzburg-Landau.

Es importante hacer tres observaciones: primero, para valores de  $\varepsilon \geq -1.18$ , se obtienen inestabilidades numéricas en el cálculo de  $\sigma$  (valores negativos para  $\sigma$ ). Segundo también cuando  $\sigma$  es muy pequeño, los patrones con condiciones aleatorias para el campo  $u$ , están formados por dominios y los patrones del campo  $v$  tienen forma de laberintos. Es decir, valores muy pequeños de  $\sigma$  se asocian con la formación de muchas interfases (laberintos). Finalmente si  $\sigma \rightarrow 0$ , no necesariamente se implica que la energía de las interfases  $E_{\text{int}}$  sea nula, puesto que otras contribuciones (si  $\sigma$  es finito) pueden aparecer[5]. Podemos suponer que  $E_{\text{int}} = \sigma L + E_{\text{doblamiento}}$  donde  $E_{\text{doblamiento}}$  es la energía de una interfase doblada manteniendo constante su longitud  $L$ , y cuya forma es[5]:  $E_{\text{doblez}} = \frac{\kappa}{2} \int_0^L ds \frac{1}{R_1^2(s)}$ , en 2 dimensiones, siendo  $\kappa$  una constante,  $R_1$  el radio de curvatura de la interfase. En el caso de un patrón cuya configuración es el de la figura 3.25,  $E_{\text{doblamiento}} = 0$  dado que la interfase es planar ( $R_1 = \infty$ ). Aquí no se hace el cálculo de la energía  $E_{\text{doblamiento}}$  para patrones del tipo D o E. Dicho cálculo debería motivar estudios futuros.

### 3.4. Dinámica de ordenamiento (coarsening)

Para obtener mayor información sobre los estados parcialmente ordenados y determinados con nuestro modelo, nos proponemos ahora caracterizar la evolución temporal de los patrones formados a partir de condiciones iniciales aleatorias. Este problema modela la dinámica fuera de equilibrio del sistema después de un cambio abrupto de parámetro desde la fase desordenada ( $u = v = 0$ ) a una fase con rompimiento de simetría. Este problema es relativamente bien conocido para las ecuaciones de Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg por separado. Proponemos estudiarlo como el acoplamiento de ambos ( $\varepsilon \neq 0$ ), afectando la cinética de ordenamiento de estos modelos.

Si  $\phi(\vec{x}, t)$  es un parámetro de orden local, definimos la función de correlación  $C(\vec{r}, t) = \langle \phi(\vec{x} + \vec{r}, t) \phi(\vec{x}, t) \rangle$  o su transformada de Fourier, el factor de estructura  $S(\vec{k}, t) = \langle \phi(\vec{k}, t) \phi(-\vec{k}, t) \rangle$ . Es bien conocido que la estructura de muchos sistemas binarios (por ejemplo dominios magnéticos de un ferromagneto o mezclas binarias mediante un proceso de descomposición espinodal) cumple una ley de escalamiento dinámico. Esta propiedad se puede definir de la siguiente manera:

"... después de un lapso de tiempo, existe una escala de longitud característica  $L(t)$  tal que la estructura espacial del sistema formada por muchos dominios es independiente del tiempo cuando las longitudes son escaladas por el factor  $L(t)$ " [9].

Se entiende por *longitud característica*  $L(t)$  la longitud de correlación, definida como en la ecuación 3.3. La hipótesis de escalamiento dinámico indica que  $L(t)$  es la única longitud característica importante en el sistema, que debe ser proporcional, por ejemplo, al radio de curvatura de una interfase, o bien, la distancia de separación entre una región de una fase y otra región de la misma fase. Después de una condición inicial desordenada, esta longitud crece con el tiempo, como una ley de potencia en muchos casos:  $L(t) \sim t^\alpha$  [9]. Esto indica que el orden crece lentamente en el sistema, contrariamente a lo que la intuición podría dejarnos suponer.

Con la hipótesis de escalamiento, la función de correlación y el factor de estructura tienen las formas

$$C(\vec{r}, t) = f\left(\frac{r}{L(t)}\right) \quad (3.2)$$

$$S(\vec{k}, t) = L^d g(kL(t)) \quad (3.3)$$

en donde  $d$  es la dimensión espacial del sistema,  $g(k)$  es la transformada de Fourier de  $f(r)$ . Ambas son funciones de escalamiento y no dependen del tiempo.

### 3.4.1. Coarsening en sistemas binarios y ternarios

Los modelos empleados para estudiar la dinámica de ordenamiento, son muy variados y como ya se mencionó anteriormente se clasifican esencialmente en dos tipos: modelos con parámetro de orden conservado (que cumplen con las ecuaciones dinámicas de tipo Cahn-Hilliard) y no conservado (que cumplen con ecuaciones de tipo Allen-Cahn o Ginzburg-Landau [20, 19, 25]).

Dentro de los modelos no conservados, como la ecuación de Ginzburg-Landau que puede modelar un sistema ferromagnético con fases uniformes [9], el parámetro de orden es escalar. La ecuación de Ginzburg-Landau muestra un crecimiento de la forma  $L(t) \sim t^{1/2}$ , en todas las dimensiones espaciales.

En otro estudio sobre mezclas ternarias [31], se modelan las microemulsiones mediante la ecuación de Ginzburg-Landau dependiente del tiempo acoplada a las ecuaciones de Navier-Stokes para introducir los efectos hidrodinámicos del sistema. En este modelo los componentes de la mezcla: aceite, agua y algún tensoactivo, se describen mediante parámetros de orden conservado y un campo vectorial. El parámetro de orden  $\phi$  representa la diferencia de concentraciones del agua y aceite, el otro parámetro de orden  $\rho$  representa la densidad local del tensoactivo y el campo vectorial  $\vec{v}$  es la velocidad de la mezcla. Uno de los resultados de este trabajo es que se obtiene una ley de crecimiento para la longitud característica del campo escalar  $\rho$  de la forma es:  $L(t) \sim t^{1/2}$ .

### 3.4.2 Resultados para el modelo de las ecuaciones Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg acopladas

---

Otros modelos conocidos con parámetro de orden conservado, utilizados para la modelación de la dinámica del fenómeno de la descomposición espinodal en sistemas binarios (y ternarios) muestran una ley de crecimiento diferente. En mezclas binarias, se observa una ley de la forma  $L(t) \sim t^{1/3}$  [9, 32]. Otros trabajos, sobre descomposición espinodal en sistemas ternarios bidimensionales y con dos parámetros de orden conservado, reportan una ley de crecimiento  $L(t)$  para las diferentes casos (fases hexagonales de puntos y laminares de rayas) con forma:  $L(t) \sim t^{1/3}$  [6, 7].

El modelo de Swift-Hohenberg es con parámetro de orden no conservado, pero debido a la naturaleza no uniforme de las fases, se observan leyes de crecimiento diferentes a  $t^{1/2}$  [10]. Los patrones de rayas se ordenan más lentamente, con una dinámica que depende del parámetro de control  $\varepsilon$  (ver ec. (1.9)), (cambiamos la notación de  $\varepsilon$  por  $-\gamma$ , en el modelo de la presente tesis). Cuando  $\varepsilon \ll 1$ , se obtiene una ley de crecimiento para la longitud de correlación:  $L(t) \sim t^{1/3}$ .  $L(t)$  es la escala donde las rayas se ven paralelas, orientadas en la misma dirección. A escalas mucho mayores que  $L(t)$ , la orientación de las rayas es aleatoria. Cuando  $\varepsilon$  es mayor ( $\approx 0.5$ ) el patrón ya no cambia mucho al transcurrir el tiempo ( $L(t) \simeq t^0$  para escalas de tiempo grandes). Esto significa que si  $\varepsilon$  es alto, entonces el patrón del sistema adquiere un estado vítreo (un estado desordenado a grandes escalas y que no evoluciona).

El estudio de la dinámica de mezclas binarias bidimensionales en las cuales se agrega un tensoactivo, como por ejemplo aerosoles sólidos, espuma de líquidos, suspensiones, emulsiones o microemulsiones, pueden ser tratados mediante modelos de Ginzburg-Landau dependientes del tiempo con dos parámetros de orden conservados [29]. Más aún, para el caso de microemulsiones (una mezcla ternaria formada, digamos, por aceite, agua y jabón) donde la diferencia de concentraciones de aceite y agua se denota por  $v$  y la concentración del tensoactivo por  $\rho$ , los dominios crecen con una ley característica muy lenta:  $L(t) \sim \ln t$  [29]. Adicionalmente, en el mismo trabajo se descubre la existencia de la *fase de mojado* a lo largo de las interfases.

En [30], se estudia el modelo de dos parámetros de orden de [29] con ecuaciones dinámicas del caso no conservado. Nuevamente, los resultados reportan una ley de crecimiento para la longitud característica de la forma  $L(t) \sim \ln t$ . Dado que se acumula el tensoactivo entre las dos distintas concentraciones de la mezcla binaria, estos resultados muestran que los tensoactivos modifican la dinámica de la interfases. Las leyes de crecimiento se vuelven más lentas.

### 3.4.2. Resultados para el modelo de las ecuaciones Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg acopladas

Resolviendo numéricamente las ecuaciones (2.25) y (2.26), con el método de la transformada de Fourier discreta, se calcula el promedio circular del factor de estructura  $S(\vec{k}, t)$  a  $|k|$  fijo tanto para  $\phi = u$  como para  $\phi = v$ . Se define  $\langle k(t) \rangle_u$  como [32]:  $\langle k \rangle_u = \int d\vec{k} S(\vec{k}, t) k / \int d\vec{k} S(\vec{k}, t)$ . Se espera que  $\langle k(t) \rangle_u$  escale como

$1/L(t)$  donde  $\langle k(t) \rangle_u$  está dado para el factor de estructura del campo  $u$ , i.e.[9]:

$$L(t) \propto \frac{1}{\langle k(t) \rangle_u}, \quad (3.4)$$

y que  $\langle |k - k_0| \rangle_v$  dado para  $v$  (cuando se trata de una fase modulada de número de onda  $k_0$ ), escale también como  $1/L(t)$ [27, 10]. Es decir:

$$L(t) \propto \frac{1}{\langle |k - k_0| \rangle_v}. \quad (3.5)$$

donde  $\langle |k - k_0| \rangle_v = \int d\vec{k} \langle |\vec{k}| - k_0 \rangle S(\vec{k}, t) / \int d\vec{k} S(\vec{k}, t)$ .

Empleando los datos obtenidos a partir del factor de estructura  $S(\vec{k}, t)$  y los datos del promedio circular para los campos  $u$  y  $v$  ( $\langle k(t) \rangle_u$  y  $\langle |k - k_0| \rangle_v$ ), se obtienen los datos para calcular la longitud característica de crecimiento  $L(t)$  dadas por (3.4) y (3.5), respectivamente para los campos  $u$  y  $v$ . Estos datos correspondientes a  $L(t)$ , se ajustan mediante mínimos cuadrados como:  $L(t) \simeq bt^a$  donde  $a$  y  $b$  son parámetros calculados durante el ajuste. La curva  $bt^a$  es una mejor aproximación en el mejor de los casos, pero nos permite calcular un parámetro  $a$  para poder compararlo con los exponentes  $1/2$  y  $1/3$  de las leyes típicas mencionadas anteriormente.

### Resultados para el patrón del tipo A

Los factores de estructura para el patrón del tipo A, se muestran en las gráficas a) y b) de la figura 3.27, para los campos  $u$  y  $v$  respectivamente, sobre un promedio de diez corridas independientes a distintos tiempos variando  $t$  entre 1000 a 10000, tomando incrementos de 1000 (también se calcularon los factores de estructura en múltiplos de tiempo de 100). La curva de crecimiento para la longitud característica obtenida para el campo  $u$  se muestra en la gráfica a) de la figura 3.28. Se obtiene aproximadamente:  $L(t) \sim t^a$  con  $a = 0.2 \pm 0.05$  (y un error de ajuste del 3 por ciento) para  $t < 1000$  y una ley más lenta para  $t > 1000$ . La curva de crecimiento obtenida a partir del ancho del factor de estructura del campo  $v$  se expone en la gráfica b) de la figura 3.28 y toma la forma:  $L(t) \sim t^a$  donde  $a = 0.1 \pm 0.05$  (con un error de ajuste del 5 por ciento). Entonces, las relaciones (3.4) y (3.5) llevan a dos resultados diferentes. Existen varias escalas características en el sistema, que no obedecen la hipótesis de escalamiento dinámico, y los exponentes encontrados son menores que  $1/2$  y  $1/3$ . Especulamos que el término de acoplamiento al tomar valores de  $\varepsilon \neq 0$ , hace que el campo  $v$  adquiera modulaciones espaciales, las cuales tienen el efecto de un potencial de bloqueo desordenado. Entonces, este potencial actúa bloqueando las interfases localizadas entre las dos fases del campo  $u$ .

### 3.4.2 Resultados para el modelo de las ecuaciones Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg acopladas

---

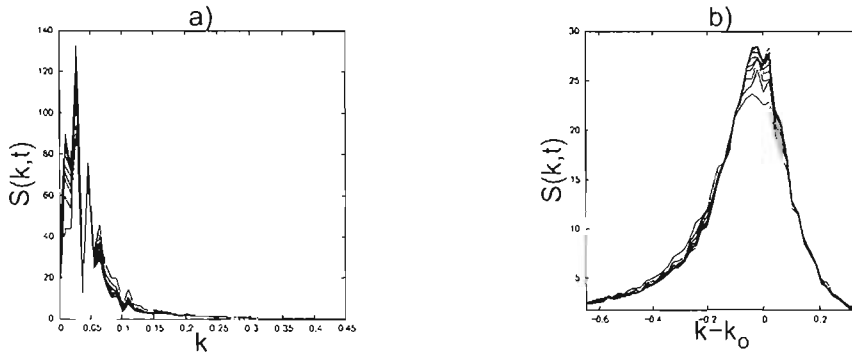


Figura 3.27: Las gráficas a) y b) corresponden a las curvas del factor de estructura del patrón del tipo A para el campo  $u(x, y)$  y  $v(x, y)$  respectivamente

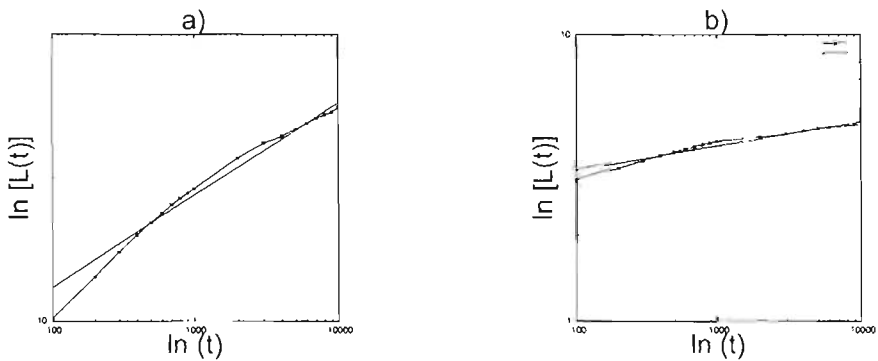


Figura 3.28: Curvas de crecimiento para el patrón del tipo A. La gráfica a) representa un ajuste por mínimos cuadrados de los datos correspondientes al factor de estructura para el campo  $u$ . El exponente  $a \approx 0.2 \pm 0.05$  y corresponde a la curva  $t^a$ . El error de ajuste es 3 por ciento para  $a$ . La gráfica b) representa un ajuste de datos del factor de estructura del campo  $v$ . La curva de ajuste es  $t^a$  con exponente  $a \approx 0.1 \pm 0.05$ . El error de ajuste es 5 por ciento para  $a$ .

### Resultados para patrón del tipo B

Un comportamiento similar se muestra para el caso del patrón del tipo B, (figura 3.29). El factor de estructura presentado en las gráficas a) y b) de esta figura para  $u(x, y)$  y  $v(x, y)$ , se caracteriza por una ley de crecimiento aproximadamente dada por:  $L(t) \sim t^a$  con  $a = 0.2$  para el campo  $u$  donde el error de ajuste cometido para  $a$  es el 2 por ciento, y  $L(t) \sim t^a$  donde  $a = 0.1$  para el campo  $v$  con un error de ajuste cometido del 2.5 por ciento, las cuales se grafican en las figuras 3.30 a) y b) respectivamente. Estos resultados, como los del caso A, muestran entonces que el sistema tiene una dinámica mucho más lenta que la reportada hasta el momento en la literatura en sistemas binarios con parámetro de orden conservado ( $L(t) \sim t^{1/2}$ ). Una posible interpretación es que el acoplamiento para  $\varepsilon \neq 0$  hace que las estructuras interfaciales en el patrón  $u$  estén fácilmente bloqueadas por las modulaciones del campo  $v$ , que actúan como un potencial desordenado de bloqueo.

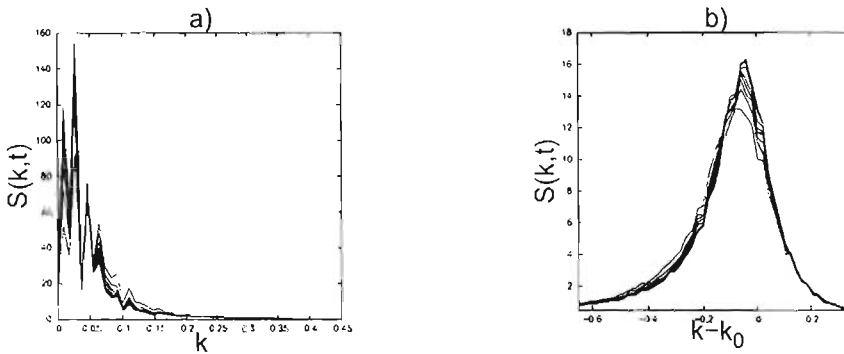


Figura 3.29: Las gráficas a) y b) corresponden a las curvas del factor de estructura del patrón del tipo B, de los campos  $u(x, y)$  y  $v(x, y)$  respectivamente.

### Resultados para el patrón del tipo C

En otro trabajo[6], para el caso de campos escalares conservados en sistemas de mezclas ternarias, se mostró la existencia de patrones con puntos, formando una fase hexagonal policristalina con dominios de longitud característica creciendo de la forma  $L(t) \sim t^{1/3}$ . Como ya se había mencionado anteriormente, en este trabajo el patrón del tipo C se caracteriza por la formación de fases hexagonales (ver figura 3.7). La figura 3.31 a) muestra las curvas del factor de estructura del patrón correspondiente al campo  $u(x, y)$ , las cuales son prácticamente independientes del tiempo:  $L(t) \simeq t^a$  con  $a = 0.03 \pm 0.005$  en donde el error de ajuste es del 8 por ciento, para  $t > 100$  (ver fig. 3.31 c). Las curvas corresponden a promedios sobre diez corridas independientes hasta escalas de tiempo de  $t = 10000$  unidades. Así mismo, en la gráfica b) nuevamente se deja ver las curvas del factor de estructura correspondiente al campo  $v(x, y)$  y la gráfica d) muestra la ley de crecimiento asociada para la longitud característica,  $L(t) \simeq t^a$  donde  $a = 0.03 \pm 0.005$  con un error de ajuste



### 3.4.2 Resultados para el modelo de las ecuaciones Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg acopladas

---

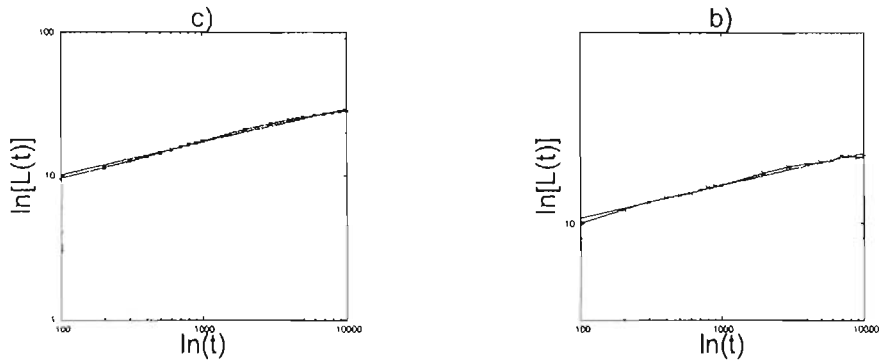


Figura 3.30: Curva de crecimiento para el patrón del tipo B. La gráfica a) representa un ajuste por mínimos cuadrados de los datos correspondientes al factor de estructura para el campo  $u$ . La curva de ajuste es  $t^a$  con  $a$  un exponente  $a = 0.2$ . El error de ajuste es 2.2 por ciento para  $a$ . La gráfica b) representa un ajuste de datos del factor de estructura del campo  $v$ . La curva de ajuste es  $t^a$  con exponente  $a = 0.1$ . El error de ajuste es 2.6 por ciento para  $a$ .

para el parámetro  $a$  del 9.5 por ciento. Estos resultados muestran que el sistema se encuentra en un estado de dinámica extremadamente lenta. Los estados desordenados son metaestables o vítreos (congelados). Especulamos que tal comportamiento se debe a que las interfases que separan los dominios con  $u > 0$  de los dominios de  $u < 0$  quedan bloqueados por los puntos del patrón hexagonal de  $v$ . Los puntos actúan como barreras de potencial que impiden el avance de las interfases.

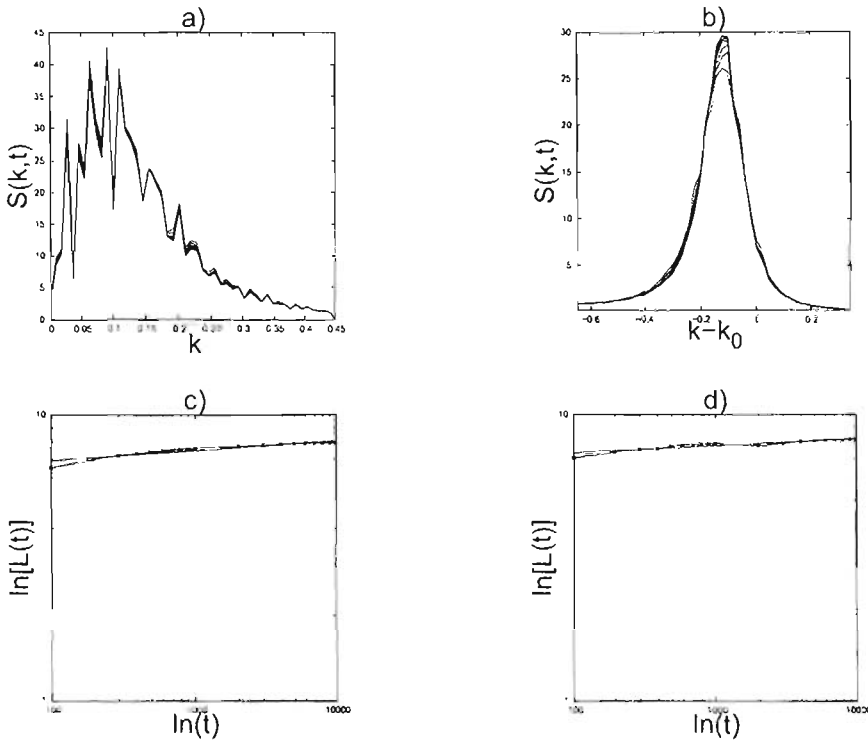


Figura 3.31: Las gráficas a) y b) corresponden a los factores de estructura de los campos  $u(x, y)$  y  $v(x, y)$  respectivamente para el patrón del tipo C. Los correspondientes ajustes mediante mínimos cuadrados de los datos de la longitud característica  $L(t)$  para los campos  $u$  y  $v$ , se muestran en las gráficas c) y d) en  $\ln - \ln$ . Se hace el ajuste de datos mediante la curva  $t^a$  con un exponente  $a = 0.03 \pm 0.005$ . El error en el ajuste para  $a$  es del 8.5 por ciento. Para el campo  $v$ , la curva de ajuste  $t^a$  tiene exponente  $a = 0.03 \pm 0.005$ . El error cometido es del 9.5 por ciento para  $a$ .

#### Resultados para los patrones tipo D y E

En los dos patrones restantes (patrones del tipo D y E), el análisis del factor de estructura para el campo  $v(x, y)$  no da mucha información dado que aparece una solución uniforme. Sin embargo, para el campo  $u(x, y)$  se puede seguir calculando el factor de estructura para ambos tipos de patrones. Los resultados del factor de estructura del campo  $u(x, y)$  para el patrón del tipo D se muestran en la gráfica a) de la figura 3.32. En la gráfica b) de la misma figura se muestra su correspondiente curva de crecimiento obteniéndose aproximadamente:  $L(t) \sim t^a$  donde  $a = 0.3$  con un error de ajuste para este exponente del 2 por ciento. Además, los resultados del factor de estructura del campo  $u(x, y)$  para el patrón del tipo E, se muestran en la gráfica a) de la figura 3.33. La gráfica b) muestra su correspondiente curva de crecimiento:  $L(t) \sim t^a$  con  $a = 0.5 \pm 0.05$  y se obtiene un error de ajuste para  $a$  del 8 por ciento. Tal curva de crecimiento para  $L(t)$  resulta ser más rápida que las anteriormente encontradas.

Como lo muestra la figura 3.26, las interfases del patrón E ( $\varepsilon = -0.55$ ), tienen una tensión superficial bastante alta, lo cual explica el valor del exponente cerca de  $1/2$  encontrado, típico de Ginzburg-Landau. El patrón D, sin embargo, está en la frontera de la región IV (fig. 3.1-b)), correspondiente a valores de  $|\varepsilon|$  más pequeños: de la figura 3.26, podemos ver que la tensión superficial es muy baja en esa región, lo cual puede explicar el exponente  $0.3 < 1/2$  encontrado.

Para corroborar estas leyes de crecimiento, determinamos para los patrones D y E la longitud total  $\mathcal{L}$  de las interfases, cantidad que decae en el tiempo. Las interfases se pueden visualizar en las gráficas a) y b) de la figura 3.19 y las gráficas a) y b) de la figura 3.23. Las gráficas a) y b) de la figura 3.34, muestran  $\mathcal{L}$  obtenida a partir del análisis de los histogramas asociado a los valores tomados por el campo  $v(x, y)$ . El análisis de tales histogramas consiste en contar numéricamente en cuantos lugares para un tiempo  $t$  fijo se encontró un valor de la concentración determinado para  $v$  entre los intervalos  $-0.35 \leq v \leq 0.35$  (para ambos tipos de patrón D y E). La curva de decaimiento de la longitud  $\mathcal{L}(t)$  de las interfases encontrada toma la forma:  $\mathcal{L}(t) \sim t^a$  donde  $a = -0.3$  con un error de ajuste para este exponente del 4 por ciento, correspondiente al patrón del tipo D; y  $\mathcal{L}(t) \sim t^a$  con  $a = -0.4$  para el patrón del tipo E (el error de ajuste encontrado para  $a$  es del 7 por ciento). Encontramos aproximadamente que  $\mathcal{L}(t) \propto L(t)^{-1}$  como es de esperarse, debido a los argumentos geométricos de escala [9, 10].

Concluimos que los patrones uniformes con tensión superficial baja, como en el patrón D, crece más lentamente que  $t^{1/2}$  para los tiempos considerados. Estos resultados son cualitativamente similares a los de [30, 28, 8] obtenidos con modelos distintos, pero nuestra curva de crecimiento  $t^{0.3}$  no ha sido observada anteriormente. En [30], por ejemplo se reporta un crecimiento logarítmico en el tiempo para  $L(t)$ .

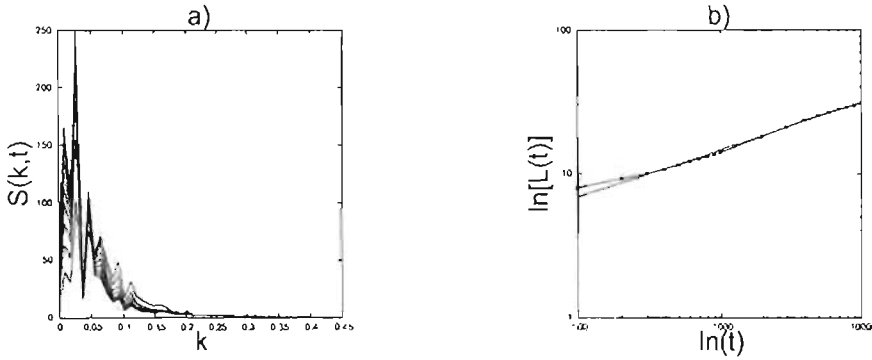


Figura 3.32: La gráfica a) corresponde a las curvas del factor de estructura para el patrón del tipo D. El ajuste por mínimos cuadrados de los datos del factor de estructura, para la ley de escalamiento se muestra en la gráfica en  $\ln - \ln$  b). Para el campo  $u$ , la curva de ajuste  $t^a$  para los datos de  $L(t)$ , da un exponente  $a = 0.3$ . El error cometido es del 2 por ciento al ajustar  $a$ .

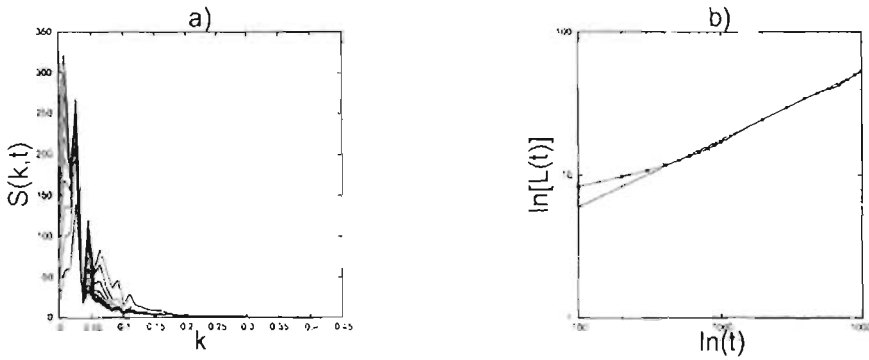


Figura 3.33: La gráfica a) corresponde a las curvas del factor de estructura para el patrón del tipo E. El ajuste por mínimos cuadrados de los datos del factor de estructura, para la ley de escalamiento se muestra en la gráfica en  $\ln - \ln$  b). Para el campo  $u$ , la curva de ajuste  $t^a$  para los datos de  $L(t)$ , da un valor del exponente  $a = 0.5 \pm 0.05$ . El error cometido al ajustar los datos para el exponente  $a$  es del 2 por ciento.

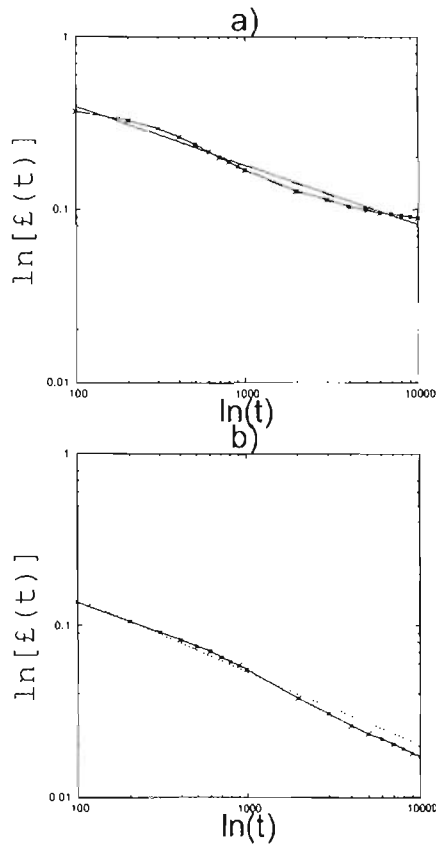


Figura 3.34: Las gráficas a) y b) corresponden a ajustes por mínimos cuadrados de la longitud total de las interfaces  $\mathcal{L}(t)$  para los casos D y E. Para el campo  $u$  del caso D, la curva de ajuste  $t^a$  para los datos de  $\mathcal{L}(t)$ , da un exponente  $a = -0.3$ , con un error cometido del 4 por ciento para  $a$ . Para el campo  $u$  del caso E, la curva de ajuste  $t^a$  para los datos, da un exponente  $a = -0.4$ , con un error cometido al ajustar  $a$  del 3 por ciento.



# Capítulo 4

## Conclusiones

En nuestro trabajo estudiamos un sistema de ecuaciones de Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg acoplado. Estos sistemas por separado son conocidos por formar fases uniformes y modulados, respectivamente. Obtenemos formación de patrones similares a los estudiados en películas de materiales ferromagnéticos [18; 9] (región I del diagrama de la figura 3 a)). También, encontramos otro tipo de patrones similares a los encontrados en modelos de reacciones químicas y películas de materiales con estructuras vítreas[1, 6, 7, 10] (regiones II y IV de la figura 3 b)). Y finalmente, reproducimos patrones con morfología similar a los obtenidos en modelos de microemulsiones[29, 30] (región II de la figura 3 a)).

Los patrones del tipo A y B, son muy similares. Forman dos fases para el campo  $u$ , compuesta de dominios de fases positiva y negativa (manchas negras y blancas) ligeramente moduladas. También forman un campo  $v$  formado por rayas, con dos microfases, una con  $v > 0$  u otra con  $v < 0$ . Las diferencias entre los patrones del tipo A y B son: los patrones del tipo B tienen mayor densidad de puntos que los del tipo A, y B también tiene fases uniformes estables.

Por otro lado, el patrón del tipo C para el campo  $u$  también tiene dos fases: una positiva y una negativa, las cuales se encuentran completamente separadas por una fase de mojado. Debido al acoplamiento estas dos fases están ligeramente moduladas por el campo  $v$ . El campo  $v$  forma una fase hexagonal. La evolución temporal de este patrón es extremadamente lenta, es decir no cambia la forma al transcurrir el tiempo (ver figura 3.8).

Finalmente, los patrones del tipo D y E tienen dos fases uniformes simétricas (positiva y negativa), para el campo  $u$ , sin modulaciones. El otro campo es uniforme ( $v_0 > 0$ ), pero presenta estructuras localizadas puntuales y rayas aisladas ("espaguetis") con  $v < 0$ . Estas estructuras se encuentran en las interfases entre dominios de  $u \simeq \text{constante}$ , produciendo una disminución de la tensión superficial. En el patrón del tipo D, estas estructuras están también presentes en el bulbo. Además, la fase interfacial con  $v < 0$  no siempre está presente en las fronteras entre dominios, dejando huecos a lo largo de las interfases. Una diferencia significativa en el patrón del tipo D y E, es que la densidad de rayas y puntos en D es mucho mayor que en E.

así como la forma en que se encuentran conectadas las interfases, cuya forma es de mayor complejidad en D que en E (ver figuras 3.11 y 3.15).

Analizamos las estructuras interfaciales en los patrones del tipo D y E. Se encuentra que el campo  $v$  forma una bicapa en las interfases, de manera análoga a los lípidos en soluciones[5].

Otro resultado importante es el cálculo de la tensión superficial  $\sigma$ , empleando una interfase plana que separa dominios con  $u \approx \pm u_0$ . Cuando  $\epsilon = 0.2$ ,  $\sigma = 0.02$ , un valor más de 30 veces menor que la tensión interfacial dada por el modelo de Ginzburg-Landau con un solo parámetro de orden ( $\epsilon = 0$ ). Resultados similares se encontraron en la literatura[28]. aunque, a nuestro conocimiento, no se entiende esta propiedad de manera analítica.

Estudiamos para los patrones A, B, C, D y E, la dinámica de ordenamiento a partir de estados completamente desordenados. Esa dinámica es más compleja que en los modelo de Swift-Hohenberg y Ginzburg-Landau desacoplados. En los patrones del tipo A y B para el campo  $u$ , la longitud de escala crece aproximadamente como  $L(t) \sim t^{0.2}$ , es decir, es más lenta que las leyes de escalamiento típicas reportada por la literatura para fases uniformes[9, 32, 6, 7, 29, 30]. También en la formación del patrón del tipo E para el campo  $u$ , se encuentra la forma  $L(t) \sim t^{0.5}$ , curva de crecimiento que coincide con la ley de escalamiento estándar para Ginzburg-Landau. A valores más pequeños del acoplamiento  $|\epsilon|$  (patrón D), la tensión superficial decae y la curva de crecimiento es  $L(t) \sim t^{0.3}$ . Finalmente señalamos que el crecimiento de las longitudes de correlación en el patrón hexagonal del tipo C es prácticamente nulo. Estas leyes de crecimiento no están bien entendidas y no presentan escalamiento dinámico. Un estudio de la dinámica de interfases en los casos mencionados debería motivar una investigación futura.



# Apéndice A

## Cálculos matemáticos

### A.1. Análisis de estabilidad de las ecuaciones de Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg sin acoplamiento

Las ecuaciones de Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg en campo nulo para el caso desacoplado son:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -\alpha u + \nabla^2 u - u^3 \\ \dot{v} &= -\gamma v - (\nabla^2 + 1)^2 v - v^3 \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Para iniciar el análisis de estabilidad, es preciso partir de las soluciones  $u_0$  y  $v_0$  en las que se encuentra al sistema en el *estado estacionario* y con *uniformidad espacial*. Las ecuaciones (A.1) se reducen a:

$$0 = -\alpha u_0 - u_0^3 \quad (\text{A.2})$$

$$0 = -(\gamma + 1)v_0 - v_0^3 \quad (\text{A.3})$$

Por lo que al realizar factorizaciones en estas ecuaciones se obtiene:

$$0 \stackrel{\text{por (A.2)}}{=} -u_0(\alpha + u_0^2) \implies \boxed{u_0 = 0} \vee \boxed{u_0 = \pm\sqrt{-\alpha} \text{ si } \alpha \leq 0} \quad (\text{A.4})$$

$$\wedge 0 \stackrel{\text{por (A.3)}}{=} -v_0[(\gamma + 1) + v_0^2] \implies \boxed{v_0 = 0} \vee \boxed{v_0 = \pm\sqrt{-(\gamma + 1)} \text{ si } \gamma \leq -1} \quad (\text{A.5})$$

Ahora, aplicando al sistema una pequeña perturbación espacialmente periódica:

$$\begin{aligned} u(\vec{r}, t) &= u_0 + \delta u \\ v(\vec{r}, t) &= v_0 + \delta v \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

donde  $\delta u = \delta u_0 \exp(\sigma t + i\vec{k} \cdot \vec{r})$  y  $\delta v = \delta v_0 \exp(\sigma t + i\vec{k} \cdot \vec{r})$ . Al sustituir en las ecuaciones (A.6) en (A.1), obtenemos despues de linealizar:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\delta u) &= -k^2 \delta u - (\alpha + 3u_0^2) \delta u. \\ \frac{d}{dt}(\delta v) &= -(1 - k^2)^2 \delta v - (\gamma + 3v_0^2) \delta v. \end{aligned}$$

Ecuaciones que se transforman en las relaciones de dispersión:

$$\sigma^{(GL)}(k) = -\alpha - k^2 - 3u_0^2. \quad (\text{A.7})$$

$$\sigma^{(SH)}(k) = -\gamma - (1 - k^2)^2 - 3v_0^2. \quad (\text{A.8})$$

Empezamos con la relación de dispersión de Ginzburg-Landau. Una solución uniforme  $u_0$  es estable si se cumple  $\sigma^{GL}(k) < 0 \forall k$ .  $\alpha$  siempre fijo. Las ecuaciones de dispersión correspondientes a cada solución uniforme  $u_0$ , son:

$$\boxed{\sigma^{(GL)}(k) = -\alpha - k^2} \quad \text{si } u_0 = 0. \quad (\text{A.9})$$

$$\boxed{\sigma^{(GL)}(k) = 2\alpha - k^2} \quad \text{si } u_0 = \pm\sqrt{-\alpha}. (\alpha < 0). \quad (\text{A.10})$$

Ecuaciones que al graficarlas respecto de  $k$  y manteniendo  $\alpha$  fijo, dan las graficas a) y b) de la figura A.1, respectivamente. En conclusión, la solución del sistema  $u_0 = 0$  cuando  $\alpha > 0$ , es *estable*; y cuando  $\alpha < 0$ ,  $u_0$  es inestable. Adicionalmente, si  $\alpha < 0$ ,  $u_0 = \pm\sqrt{-\alpha}$  siempre es *estable*.

Para las dos soluciones (A.5) de la ecuación de Swift-Hohenberg, se obtienen las siguientes relaciones de dispersión:

$$\boxed{\sigma^{(SH)}(k) = -\gamma - (1 - k^2)^2} \quad \text{si } v_0 = 0. \quad (\text{A.11})$$

$$\boxed{\sigma^{(SH)}(k) = -(1 - k^2)^2 + 2\gamma + 3} \quad \text{si } v_0 = \pm\sqrt{-(\gamma + 1)}. (\gamma < -1) \quad (\text{A.12})$$

y cuando se grafican respecto a  $k$  y  $\gamma$  se mantiene fijo, dan las gráficas a) y b) de la figura A.2. Para  $v_0 = 0$ , si  $\gamma < 0$ , existen números de onda en la vecindad de  $k = 1$  que son inestables (mientras  $\sigma^{SH}(k) < 0$ .  $\forall k$  si  $\gamma > 0$ ).

Por otra parte, las soluciones  $v_0 = \pm\sqrt{-(\gamma + 1)}$  son estables si  $2\gamma + 3 < 0$ , es decir, si  $\gamma < -3/2$ , y son inestables si  $-3/2 < \gamma < -1$ . Por lo tanto, no existen soluciones de patrones estables en el intervalo  $-3/2 < \gamma < 0$ , sino patrones de rayas.

A.1 Análisis de estabilidad de las ecuaciones de Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg sin acoplamiento

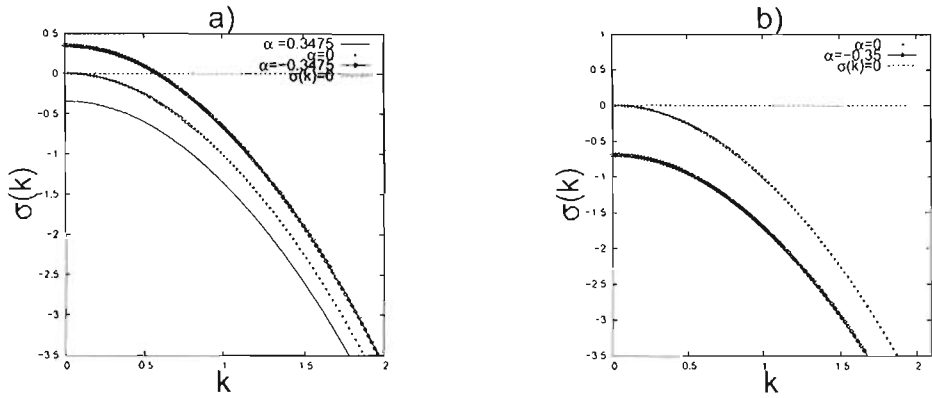


Figura A.1: Las curvas de la gráfica a), corresponden a la relación de dispersión dada por la ecuación (A.9) para valores de  $\alpha = -0.35, 0, -0.35$ . Las curvas de la gráfica b), corresponden a la relación de dispersión dada por la ecuación (A.10) para valores de  $\alpha = -0.35, 0, -0.35$ .

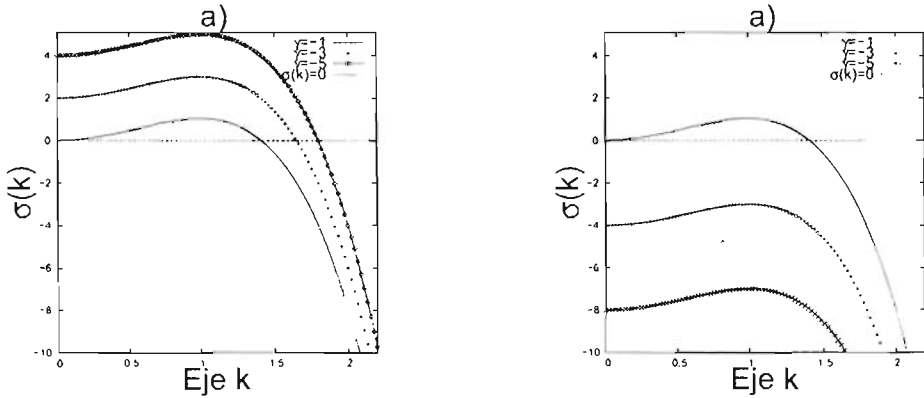


Figura A.2: Las curvas de la gráfica a), corresponden a la relación de dispersión dada por la ecuación (A.11) para valores de  $\alpha = -1, -3, -5$ . Las curvas de la gráfica b), corresponden a la relación de dispersión dada por la ecuación (A.12) para valores de  $\alpha = -1, -3, -5, -0.35$ .

## A.2. Análisis de Estabilidad para Pequeñas Oscilaciones

Este tipo de análisis consiste en determinar la solución del sistema con pequeñas perturbaciones, añadiendo a las soluciones uniformes, un término perturbativo:

$$\begin{aligned} u &= u_0 + \delta U(t) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \\ v &= v_0 + \delta V(t) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

donde  $\delta U$  y  $\delta V$  dependen del tiempo y se tienen que determinar. Para esto, es necesario sustituir las ecs. (A.13) en (2.5) y despreciar los términos de orden mayor a  $\delta U(t)$ ,  $\delta V(t)$ . El resultado de tal linealización es:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\delta U(t))e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} &= -(\alpha + \epsilon v_0 + 3u_0^2 - \nabla^2) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \delta U(t) - \epsilon u_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \delta V(t) \\ \frac{d}{dt}(\delta V(t))e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} &= -\epsilon u_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \delta U(t) - \left(\gamma + \lambda(\nabla^2 + 1)^2 + 3v_0^2\right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \delta V(t) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Este sistema de ecuaciones se pueden escribir en forma matricial. Definimos el vector de variación infinitesimal  $\delta \vec{R} = (\delta U(t), \delta V(t))$  y se obtiene que:

$$\frac{d}{dt}(\delta \vec{R}^T) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = J|_{Total}(\delta \vec{R}^T) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (\text{A.15})$$

con el supraíndice  $T$  significando la transpuesta del vector, y:

$$J|_{Total} = \begin{pmatrix} -(\alpha + \epsilon v_0 + 3u_0^2 - \nabla^2) & -\epsilon u_0 \\ -\epsilon u_0 & -[\gamma + \lambda(\nabla^2 + 1)^2 + 3v_0^2] \end{pmatrix} \quad (\text{A.16})$$

con  $(u_0, v_0)$  raíces del sistema cuyos valores están definidos por los valores del cuadro 2.1. En el caso  $k = 0$  (perturbaciones uniformes), la ecuación (A.16) se reduce a:

$$J|_{(u_0, v_0)} = \begin{pmatrix} -(\alpha + \epsilon v_0 + 3u_0^2) & -\epsilon u_0 \\ -\epsilon u_0 & -[(\gamma + \lambda) + 3v_0^2] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix} \quad (\text{A.17})$$

Eliminando las exponenciales a ambos lados de la ecuación (A.15) y sustituyendo  $J|_{Total}$  por  $J|_{(u_0, v_0)}$ , se implica que:

$$\frac{d}{dt}(\delta \vec{R}^T) = J|_{(u_0, v_0)}(\delta \vec{R}^T)$$

Con la finalidad de resolver esta ecuación se propone una solución de la forma:  $\delta \vec{R} = (\delta U(t), \delta V(t))$  tal que:  $\delta U(t) = \delta u_o \exp(\sigma t)$  y  $\delta V(t) = \delta v_o \exp(\sigma t)$ . La ecuación característica para encontrar los eigenvalores  $\sigma$  del sistema es (ver apéndice A.3):

$$\left| \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -(\alpha + \epsilon v_0 + 3u_0^2) & -\epsilon u_0 \\ -\epsilon u_0 & -[(\gamma + \lambda) + 3v_0^2] \end{pmatrix} \right| = 0.$$

que da los siguientes valores propios:

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= \left[ \frac{1}{2} \text{Tr} \left( J \Big|_{(u_0, v_0)} \right) \right] + \sqrt{\left[ \frac{1}{2} \text{Tr} \left( J \Big|_{(u_0, v_0)} \right) \right]^2 - \left| J \Big|_{(u_0, v_0)} \right|} \\ \sigma_2 &= \left[ \frac{1}{2} \text{Tr} \left( J \Big|_{(u_0, v_0)} \right) \right] - \sqrt{\left[ \frac{1}{2} \text{Tr} \left( J \Big|_{(u_0, v_0)} \right) \right]^2 - \left| J \Big|_{(u_0, v_0)} \right|}\end{aligned}\quad (\text{A.18})$$

donde

$$\text{Tr} \left( J \Big|_{(u_0, v_0)} \right) = f_u + g_v = -(\alpha + \gamma + \lambda + \epsilon v_0 + 3(u_0^2 + v_0^2)) \quad (\text{A.19})$$

$$\left| J \Big|_{(u_0, v_0)} \right| = f_u g_v - f_v g_u = (\alpha + \epsilon v_0 + 3u_0^2) [(\gamma + \lambda) + 3v_0^2] - \epsilon^2 u_0^2 \quad (\text{A.20})$$

Si los puntos fijos son estables, tenemos que  $\sigma_1 < 0$  y  $\sigma_2 < 0$ , es decir:  $\text{Tr}(J|_{(u_0, v_0)}) < 0$  y  $\text{Det}(J|_{(u_0, v_0)}) > 0$ . Pero con la convención  $\sigma_1 > \sigma_2$ , entonces los puntos fijos se vuelven inestables si  $\sigma_1 = 0$ . Por lo cual:  $\text{Det}(J|_{(u_0, v_0)}) = 0$  y  $\text{Tr}(J|_{(u_0, v_0)}) < 0$  (para más detalles sobre estos resultados ver ecuaciones (A.32)). De hecho, estamos interesados en la última condición pues esto es lo que garantiza encontrar valores críticos de los parámetros de control, para obtener formación de patrones.

Por otro lado, para  $k \neq 0$  la ecuación (A.16) se escribe como:

$$J_{\text{Total}} = J \Big|_{(u_0, v_0)} - k^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & k^2 - 2 \end{pmatrix}$$

donde  $J|_{(u_0, v_0)}$  está definido por la ecuación (A.17). Entonces la soluciones a este sistema son de la forma:

$$\begin{aligned}\delta U(t) &= \delta u_1 \exp(\sigma_1 t) + \delta u_2 \exp(\sigma_2 t), \\ \delta V(t) &= \delta v_1 \exp(\sigma_1 t) + \delta v_2 \exp(\sigma_2 t).\end{aligned}$$

con las constantes  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  los valores propios de la matriz  $J_{\text{Total}}$ , que son solución de la ecuación:

$$\left| \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -(\alpha + \epsilon v_0 + 3u_0^2) & -\epsilon u_0 \\ -\epsilon u_0 & -[(\gamma + \lambda) + 3v_0^2] \end{pmatrix} + k^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & k^2 - 2 \end{pmatrix} \right| = 0$$

Y nuevamente, al resolver esta ecuación se obtiene que los valores propios se transforman a:

$$\begin{aligned}\sigma_1(k) &= \left[ \frac{1}{2} \text{Tr} \left( J \Big|_{(u_0, v_0)} \right) + k^2(1 - k^2) \right] + \\ &\quad + \sqrt{\left[ \frac{1}{2} \text{Tr} \left( J \Big|_{(u_0, v_0)} \right) + k^2(1 - k^2) \right]^2 - \left\{ \left| J \Big|_{(u_0, v_0)} \right| - k^2[(2 - k^2)(k^2 - f_u) + g_u] \right\}} \\ \sigma_2(k) &= \left[ \frac{1}{2} \text{Tr} \left( J \Big|_{(u_0, v_0)} \right) + k^2(1 - k^2) \right] - \\ &\quad - \sqrt{\left[ \frac{1}{2} \text{Tr} \left( J \Big|_{(u_0, v_0)} \right) + k^2(1 - k^2) \right]^2 - \left\{ \left| J \Big|_{(u_0, v_0)} \right| - k^2[(2 - k^2)(k^2 - f_u) + g_u] \right\}}\end{aligned}$$

Nótese que cuando  $k = 0$  recuperamos las ecuaciones (A.18). Al observar detenidamente las ecuaciones anteriores, se tienen que  $\sigma_1(k), \sigma_2(k)$  pueden ser reales o complejos. Por lo que se tienen los siguientes casos:

$$\left[ \frac{1}{2} Tr \left( J|_{(u_0, v_0)} \right) + k^2(1 - k^2) \right]^2 - \left\{ \left| J|_{(u_0, v_0)} \right| - k^2 \left[ (2 - k^2)(k^2 - f_u) + g_v \right] \right\} > 0, \quad \forall \sigma_1(k), \sigma_1(k) \in \mathfrak{R}, \quad (\text{A.21})$$

$$\left[ \frac{1}{2} Tr \left( J|_{(u_0, v_0)} \right) + k^2(1 - k^2) \right]^2 - \left\{ \left| J|_{(u_0, v_0)} \right| - k^2 \left[ (2 - k^2)(k^2 - f_u) + g_v \right] \right\} < 0, \quad \forall \sigma_1(k), \sigma_1(k) \in \mathcal{C} \quad (\text{A.22})$$

Por otro lado, para encontrar los estados inestables del sistema, para el caso

$$\sigma_1(k), \sigma_1(k) \in \mathfrak{R} : Tr(J|_{Total}) < 0 : Det(J|_{Total}) = 0. \quad (\text{A.23})$$

y para el caso

$$\sigma_1(k), \sigma_1(k) \in \mathfrak{R} : Tr(J|_{Total}) = 0 : Det(J|_{Total}) < 0. \quad (\text{A.24})$$

partiendo de la ecuación (A.21) y empleando las condiciones (A.23) se obtiene:  $0 = \left| J|_{(u_0, v_0)} \right| < k^2[(2 - k^2)(k^2 - f_u) + g_v]$ . Es fácil demostrar que la última desigualdad se puede transformar en:  $-g_v < (2 - k^2)(k^2 - f_u)$  pero, como se cumple la ecuación (A.19) y  $Tr \left( J|_{(u_0, v_0)} \right) < 0$ , entonces se tiene que  $f_u < (2 - k^2)(k^2 - f_u)$ , de lo cual se implica que:

$$f_u < k^2 \frac{2 - k^2}{3 - k^2}, \quad \forall \sigma_1(k), \sigma_1(k) \in \mathfrak{R}. \quad (\text{A.25})$$

Si ahora se parte de la ecuación (A.22) y se emplean las condiciones (A.24), se llega a que  $k^2[(2 - k^2)(k^2 - f_u) < \left| J|_{(u_0, v_0)} \right|$ . Pero como se cumple la ecuación (A.20) y  $Tr \left( J|_{(u_0, v_0)} \right) = f_u + g_v = 0$ , entonces se puede demostrar que la última desigualdad se transforma en  $g_v^2 - [k^2(k^2 - 3)]g_v - [g_u f_v + k^2(k^2 - 2)] < 0$ . La solución es la siguiente:

$$g_v < \frac{1}{2} k^2(k^2 - 3) + \sqrt{g_u f_v + k^2(k^2 - 2) + \left( \frac{1}{2} k^2(k^2 - 3) \right)^2}, \quad \forall \sigma_1(k), \sigma_1(k) \in \mathcal{C} \quad (\text{A.26})$$

$$g_v > \frac{1}{2} k^2(k^2 - 3) - \sqrt{g_u f_v + k^2(k^2 - 2) + \left( \frac{1}{2} k^2(k^2 - 3) \right)^2}, \quad \forall \sigma_1(k), \sigma_1(k) \in \mathcal{C}. \quad (\text{A.27})$$

### A.3. Clasificación de estabilidad de las soluciones: valores propios y su jacobiano

Sea un sistema dinámico bidimensional:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= f(x, y) \\ \dot{y} &= g(x, y)\end{aligned}\tag{A.28}$$

con  $f$  y  $g$  funciones continuas y derivables de clase  $C^2$  conocidas, con un punto fijo  $f(x^*, y^*) = 0$  y  $g(x^*, y^*) = 0$ . Estudiamos la estabilidad del punto  $(x^*, y^*)$  buscando soluciones  $(x, y)$  de la forma:

$$\begin{aligned}x &= x^* + \delta x(t) \\ y &= y^* + \delta y(t)\end{aligned}$$

en donde  $\delta x(t)$  y  $\delta y(t)$  son pequeñas perturbaciones.

Como la función  $\delta x(t)$  satisface:

$$\delta \dot{x} = \frac{d}{dt}(\delta x)$$

al igualar esta ecuación con la primera de las ecs. (A.28), y desarrollar en serie de Taylor alrededor del punto  $(x^*, y^*)$ , se tiene:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(\delta x) &= f(x^* + \delta x(t), y^* + \delta y(t)) \\ &\approx f(x^*, y^*) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(x^*, y^*)} \delta x(t) + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{(x^*, y^*)} \delta y(t) + O(\delta x^2) + O(\delta y^2) \\ \Rightarrow \frac{d}{dt}(\delta x) &= \left. \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right) \right|_{(x^*, y^*)} \delta x + \left. \left( \frac{\partial f}{\partial y} \right) \right|_{(x^*, y^*)} \delta y\end{aligned}$$

Además, por un procedimiento completamente análogo al anterior, se puede demostrar una ecuación similar para  $\dot{y}$  en la vecindad del punto  $(x^*, y^*)$ . Por lo tanto, se obtiene el sistema de ecuaciones diferenciales lineales:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(\delta x) &= \left. \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right) \right|_{(x^*, y^*)} \delta x + \left. \left( \frac{\partial f}{\partial y} \right) \right|_{(x^*, y^*)} \delta y \\ \frac{d}{dt}(\delta y) &= \left. \left( \frac{\partial g}{\partial x} \right) \right|_{(x^*, y^*)} \delta x + \left. \left( \frac{\partial g}{\partial y} \right) \right|_{(x^*, y^*)} \delta y\end{aligned}$$

Ecuaciones que se pueden escribir como:

$$\frac{d}{dt}(\delta \vec{r}^T) = J^*(\delta \vec{r}^T)\tag{A.29}$$

donde  $\delta\vec{r} = (\delta x, \delta y)$  y el supraíndice  $T$  significa la tanspuesta del vector.  $J^*$  es la matriz jacobiana:

$$J^* = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)\big|_{(x^*, y^*)} & \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)\big|_{(x^*, y^*)} \\ \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)\big|_{(x^*, y^*)} & \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)\big|_{(x^*, y^*)} \end{pmatrix}$$

Por simple inspección de la ecuación (A.29), se puede concluir que es una ecuación vectorial diferencial de primer orden. Se propone una solución de la forma:

$$\delta\vec{r} = (\delta x \exp \sigma t, \delta y \exp \sigma t) = (\delta x, \delta y) \exp \sigma t$$

Así, al sustituir esta solución en la ecuación (A.29) se obtiene que:  $\sigma \delta\vec{r}^T = J^* (\delta\vec{r}^T)$ . Este sistema tiene solución distinta de la trivial (cero), si se cumple la ecuación característica:  $|\sigma J - J^*| = 0$ . Por lo que, se obtiene:

$$\sigma^2 - Tr(J^*)\sigma + |J^*| = 0$$

$$\therefore \sigma_+ = \frac{1}{2}Tr(J^*) + \sqrt{\left[\frac{1}{2}Tr(J^*)\right]^2 - |J^*|} \quad (A.30)$$

$$\sigma_- = \frac{1}{2}Tr(J^*) - \sqrt{\left[\frac{1}{2}Tr(J^*)\right]^2 - |J^*|} \quad (A.31)$$

Y de las ecuaciones (A.30), (A.31) se obtienen:

$$\begin{aligned} \sigma_+ + \sigma_- &= Tr(J^*) \\ \sigma_+ \sigma_- &= |J^*| \end{aligned} \quad (A.32)$$

Ahora bien, debido a la forma de las ecuaciones (A.30) y (A.31) es necesario considerar cuando  $\sigma_{\pm}$  son reales o complejas. Para el caso en que  $\sigma_{\pm} \in \mathbb{R}$  debe ocurrir que  $[Tr(J^*)/2]^2 - |J^*| \geq 0$ , y para el caso  $\sigma_{\pm} \in \mathbb{C}$  se cumple que  $[Tr(J^*)/2]^2 - |J^*| < 0$ . En el caso de valores propios complejos  $\sigma_+$  y  $\sigma_-$  son complejos conjugados y se obtiene:

$$\begin{aligned} \Re(\sigma_+) &= Tr(J^*)/2 = \Re(\sigma_-), \\ \Im(\sigma_+) &= \sqrt{|J^*| - [Tr(J^*)/2]^2}, \\ \Im(\sigma_-) &= -\sqrt{|J^*| - [Tr(J^*)/2]^2}. \end{aligned}$$

Hay por lo tanto dos maneras mediante las cuales el punto  $(x^*, y^*)$  se puede volver inestable. Si  $\sigma_{\pm} \in \mathbb{R}$ ,  $(x^*, y^*)$  es estable cuando  $\sigma_+ < 0$  y  $\sigma_- < 0$ . Con la convención  $\sigma_+ > \sigma_-$ ,  $(x^*, y^*)$  se vuelve inestable si  $\sigma_+ = 0$ , lo que implica:  $|J^*| = 0$  (y  $Tr(J^*) < 0$ ). Si  $\sigma_{\pm} \in \mathbb{C}$ ,  $(x^*, y^*)$  se vuelve inestable cuando  $\Re(\sigma_+) = \Re(\sigma_-) = 0$ , o:  $Tr(J^*) = 0$  (y  $|J^*| > 0$ ).



## A.4. Deducción de las ecuaciones aproximadas en el espacio de Fourier para el sistema GL-SH[27]

En adelante se presenta un esquema numérico del sistema Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg acoplado (GL-SH), mediante el empleo de la transformada compleja de Fourier. El sistema a resolver es:

$$\dot{u} = -\alpha u - \epsilon uv + \nabla^2 u - u^3 \quad (\text{A.33})$$

$$\dot{v} = -\gamma v - (\nabla^2 + 1)^2 v - \frac{\epsilon}{2} u^2 - v^3 \quad (\text{A.34})$$

Tal resolución se llevará a cabo mediante el método de la transformada de Fourier. La ventaja al resolver mediante este método las ecuaciones (A.33) y (A.34), es que la parte lineal del sistema se obtiene muy fácilmente en el espacio de Fourier. Definimos las transformadas de Fourier de  $u$  y  $v$  como:

$$\begin{aligned} \tilde{u}(\vec{q}, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{x}) u(\vec{x}, t) d^3x \\ \tilde{v}(\vec{q}, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{x}) v(\vec{x}, t) d^3x \end{aligned}$$

Y sus respectivas transformadas inversas de Fourier son:

$$\begin{aligned} u(\vec{x}, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{x}) \tilde{u}(\vec{q}, t) d^3q \\ v(\vec{x}, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{x}) \tilde{v}(\vec{q}, t) d^3q \end{aligned}$$

Se obtienen las derivadas con respecto del tiempo de las transformadas de Fourier de  $u$  y  $v$ .

$$\dot{\tilde{u}} = -(\alpha + q^2)\tilde{u}(\vec{q}, t) - \epsilon(\widetilde{uv})(\vec{q}, t) - \tilde{u}^3(\vec{q}, t)$$

donde  $\widetilde{uv}$  es la transformada de Fourier de  $uv$ .

Por otro lado, se obtiene de la ecuación (A.34):

$$\dot{\tilde{v}} = -(\gamma + [1 - q^2]^2)\tilde{v}(\vec{q}, t) - \frac{\epsilon}{2}\tilde{u}^2(\vec{q}, t) - \tilde{v}^3(\vec{q}, t)$$

Por lo tanto, el sistema acoplado Ginzburg-Landau y Swift-Hohenberg en el espacio de Fourier es:

$$\dot{\tilde{u}}(\vec{q}, t) = -(\alpha + q^2)\tilde{u}(\vec{q}, t) - \epsilon(\widetilde{uv})(\vec{q}, t) - \tilde{u}^3(\vec{q}, t) \quad (\text{A.35})$$

$$\dot{\tilde{v}}(\vec{q}, t) = -(\gamma + [1 - q^2]^2)\tilde{v}(\vec{q}, t) - \frac{\epsilon}{2}\tilde{u}^2(\vec{q}, t) - \tilde{v}^3(\vec{q}, t) \quad (\text{A.36})$$

Y como:

$$\frac{d}{dt} (\tilde{u}(\vec{q}, t) \exp [(\alpha + q^2)t]) = - \left[ \epsilon(\tilde{v}\tilde{u})(\vec{q}, t) + \tilde{u}^3(\vec{q}, t) \right] \exp [(\alpha + q^2)t]$$

Por lo cual al integrar el último resultado en el intervalo  $[t_0, t_0 + \Delta t]$ , se implica que:

$$\tilde{u}(\vec{q}, t) \exp [(\alpha + q^2)t] \Big|_{t_0}^{t_0 + \Delta t} = - \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \left[ \epsilon(\tilde{v}\tilde{u})(\vec{q}, t) + \tilde{u}^3(\vec{q}, t) \right] \exp [(\alpha + q^2)t] dt$$

Y por lo tanto, al despejar  $\tilde{u}(\vec{q}, t)$  de la pasada ecuación se obtiene:

$$\begin{aligned} \tilde{u}(\vec{q}, t_0 + \Delta t) &= \tilde{u}(\vec{q}, t_0) \exp [-(\alpha + q^2)\Delta t] - \\ &- \exp [-(\alpha + q^2)(t_0 + \Delta t)] \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \left[ \epsilon(\tilde{v}\tilde{u})(\vec{q}, t) + \tilde{u}^3(\vec{q}, t) \right] \exp [(\alpha + q^2)t] dt \quad (\text{A.37}) \end{aligned}$$

Esta ecuación es una ecuación integral, la cual en lo que sigue será resuelta numéricamente usando un método de Euler mejorado para la parte temporal. Si el incremento de tiempo  $\Delta t$  es suficientemente pequeño, los términos no lineales del integrando son aproximadamente constantes, en el intervalo  $[t_0, t_0 + \Delta t]$ . Por lo tanto, se obtiene  $\tilde{u}$  al tiempo  $t_0 + \Delta t$  como función de  $\tilde{u}$  para el tiempo  $t_0$ . Denotamos por  $\tilde{u}_{temp}(\vec{q}, t_0 + \Delta t)$  a la función  $\tilde{u}$  obtenida por esta aproximación. Tenemos:

$$\tilde{u}_{temp}(\vec{q}, t_0 + \Delta t) = \tilde{u}(\vec{q}, t_0) e^{-(\alpha + q^2)\Delta t} - \left[ \epsilon(\tilde{v}\tilde{u})(\vec{q}, t_0) + \tilde{u}^3(\vec{q}, t_0) \right] \frac{1 - e^{-(\alpha + q^2)\Delta t}}{\alpha + q^2}. \quad (\text{A.38})$$

Aplicando el mismo razonamiento a la ecuación (A.36), se puede demostrar que:

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{temp}(\vec{q}, t_0 + \Delta t) &= \tilde{v}(\vec{q}, t_0) e^{-(\gamma + [1 - q^2])\Delta t} - \\ &- \left[ \frac{\epsilon}{2} \tilde{u}^2(\vec{q}, t_0) + \tilde{v}^3(\vec{q}, t_0) \right] \frac{1 - e^{-(\gamma + [1 - q^2])\Delta t}}{\gamma + [1 - q^2]}. \quad (\text{A.39}) \end{aligned}$$

Se puede mejorar esa aproximación de la siguiente manera. Apartir de las ecuaciones (A.38) y (A.39) es posible calcular  $u_{temp}$ ,  $v_{temp}$ , por transformada rápida de Fourier inversa. Se puede obtener  $u_{temp}^3$ ,  $u_{temp}^2$ ,  $u_{temp}v_{temp}$ ,  $v_{temp}^3$ , y de aquí  $\tilde{u}_{temp}^3(\vec{q}, t_0 + \Delta t)$ ,  $\tilde{u}\tilde{v}_{temp}$ ,  $\tilde{v}_{temp}^3$  y  $\tilde{u}^2_{temp}$  por transformada directa. Una mejor aproximación de los términos no lineales en la ecuación (A.37) en el intervalo  $[t_0, t_0 + \Delta t]$  consiste en escribir:

$$\tilde{u}^3(\vec{q}, t) \simeq \tilde{u}^3(\vec{q}, t_0) + \frac{\tilde{u}_{temp}^3(\vec{q}, t_0 + \Delta t) - \tilde{u}^3(\vec{q}, t_0)}{\Delta t} (t - t_0)$$

y una relación similar para  $\tilde{u}\tilde{v}$ .

#### A.4 Deducción de las ecuaciones aproximadas en el espacio de Fourier para el sistema GL-SH[27]

Se obtiene finalmente  $\tilde{u}(\vec{q}, t_0 + \Delta t)$  como función de los campos a tiempo  $t_0$ :

$$\begin{aligned} \tilde{u}(\vec{q}, t_0 + \Delta t) = & \tilde{u}(\vec{q}, t_0) e^{-(\alpha+q^2)\Delta t} - \left[ \epsilon \tilde{v} \tilde{u} + \tilde{u}^3 \right] (\vec{q}, t_0) \frac{1 - e^{-(\alpha+q^2)\Delta t}}{\alpha + q^2} - \\ & - C_2 \left\{ \left[ \epsilon \widetilde{v_{temp} u_{temp}} + \tilde{u}_{temp}^3 \right] (\vec{q}, t_0 + \Delta t) - \left[ \frac{\epsilon}{2} \tilde{v} \tilde{u} + \tilde{u}^3 \right] (\vec{q}, t_0) \right\} \end{aligned}$$

en donde  $\widetilde{v_{temp} u_{temp}}$  y  $\tilde{u}_{temp}^3$  se obtienen a partir de las ecuaciones (A.38), (A.39) con

$$C_2 = \left[ \exp [-(\alpha + q^2)\Delta t] - 1 + (\alpha + q^2) \Delta t \right] \frac{1}{(\alpha + q^2)^2 \Delta t}.$$

Para el caso de la ecuación (A.36), se puede demostrar de manera análoga:

$$\begin{aligned} \tilde{v}(\vec{q}, t_0 + \Delta t) = & \tilde{v}(\vec{q}, t_0) e^{-(\alpha+q^2)\Delta t} - \left[ \frac{\epsilon}{2} \tilde{u}^2 + \tilde{u}^3 \right] (\vec{q}, t_0) \frac{1 - e^{-(\gamma+|1-q^2|)\Delta t}}{\gamma + [1 - q^2]^2} - \\ & - D_2 \left\{ \left[ \frac{\epsilon}{2} \tilde{u}_{temp}^2 + \tilde{v}_{temp}^3 \right] (\vec{q}, t_0 + \Delta t) - \left[ \epsilon \tilde{u}^2 + \tilde{v}^3 \right] (\vec{q}, t_0) \right\}, \end{aligned}$$

con:

$$D_2 = \frac{\left[ e^{-(\gamma+|1-q^2|)^2 \Delta t} - 1 + (\gamma + [1 - q^2]^2) \Delta t \right]}{(\gamma + [1 - q^2]^2)^2 \Delta t}.$$

Resumiendo, el conjunto de ecuaciones a resolver mediante un procedimiento de cálculo numérico son:

$$\begin{aligned} \tilde{u}(\vec{q}, t_0 + \Delta t) = & \tilde{u}(\vec{q}, t_0) e^{-(\alpha+q^2)\Delta t} - C_1 \left[ \epsilon \tilde{v} \tilde{u} + \tilde{u}^3 \right] (\vec{q}, t_0) - \\ & - C_2 \left\{ \left[ \epsilon \widetilde{v_{temp} u_{temp}} + \tilde{u}_{temp}^3 \right] (\vec{q}, t_0 + \Delta t) - \left[ \epsilon \tilde{v} \tilde{u} + \tilde{u}^3 \right] (\vec{q}, t_0) \right\} \quad (A.40) \end{aligned}$$

en donde:

$$\boxed{C_1 = \frac{1 - e^{-(\alpha+q^2)\Delta t}}{\alpha + q^2}}, \quad \boxed{C_2 = \frac{\left[ e^{-(\alpha+q^2)\Delta t} - 1 + (\alpha + q^2) \Delta t \right]}{(\alpha + q^2)^2 \Delta t}}.$$

$$\begin{aligned} \tilde{v}(\vec{q}, t_0 + \Delta t) = & \tilde{v}(\vec{q}, t_0) e^{-(\alpha+q^2)\Delta t} - D_1 \left[ \frac{\epsilon}{2} \tilde{u}^2 + \tilde{u}^3 \right] (\vec{q}, t_0) - \\ & - D_2 \left\{ \left[ \frac{\epsilon}{2} \tilde{u}_{temp}^2 + \tilde{v}_{temp}^3 \right] (\vec{q}, t_0 + \Delta t) - \left[ \frac{\epsilon}{2} \tilde{u}^2 + \tilde{v}^3 \right] (\vec{q}, t_0) \right\}, \quad (A.41) \end{aligned}$$

con:

$$\boxed{D_1 = \frac{1 - e^{-(\gamma+|1-q^2|)\Delta t}}{\gamma + [1 - q^2]^2}}, \quad \boxed{D_2 = \frac{\left[ e^{-(\gamma+|1-q^2|)^2 \Delta t} - 1 + (\gamma + [1 - q^2]^2) \Delta t \right]}{(\gamma + [1 - q^2]^2)^2 \Delta t}}.$$

y  $\tilde{u}_{temp}$ ,  $\tilde{v}_{temp}$  dados por (A.38), (A.39) respectivamente. Estas relaciones se iteran en el tiempo (dada una condición inicial para  $u$  y  $v$ ) aplicando transformada de Fourier directa e inversa al calcular los términos no lineales de las ecuaciones (A.40) y (A.41).

Este método es eficiente porque es numéricamente estable hasta pasos  $\Delta t$  de orden 1, mucho mayores a los valores del método de Euler simple. En los cálculos numéricos de este trabajo se utiliza  $\Delta t = 0.1$ .

## A.5. Ecuaciones para graficar las soluciones uniformes $u_0$ y $v_0$

En este apéndice es donde se presentan las ecuaciones para graficar las soluciones uniformes  $u_0$  y  $v_0$  del sistema.

$$0 = -\alpha u_0 - \epsilon u_0 v_0 - u_0^3 \quad (\text{A.42})$$

$$0 = -(\gamma + \lambda)v_0 - \frac{\epsilon}{2}u_0^2 - v_0^3 \quad (\text{A.43})$$

Ahora bien, factorizando  $u_0 \neq 0$  en la ecuación (A.42) y despejando  $v_0$  de la correspondiente expresión (A.43), se implica que:

$$v_0 = -\frac{1}{\epsilon} (u_0^2 + \alpha),$$

$$0 = v_0^3 + (\gamma + \lambda)v_0 + \frac{\epsilon u_0^2}{2}.$$

El problema de despejar  $v_0$  de la segunda de las últimas ecuaciones, es equivalente a aplicar nuevamente las fórmulas de Cartan. Entonces encontrando  $v_0$  en terminos completamente de  $u_0$  y los parámetros, se obtiene:

$$\begin{aligned} v_{0_1} &= -\frac{1}{\epsilon}(\alpha + u_0^2) \\ v_{1_1} &= 2\sqrt{-p/3} \cos \theta \\ v_{1_2} &= -2\sqrt{-p/3} \cos[(\pi - \theta)/3] \\ v_{1_3} &= -2\sqrt{-p/3} \cos[(\pi + \theta)/3] \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

donde  $p = (\gamma + \lambda)$ ,  $q = \epsilon u_0^2/2$  y  $\cos \theta = \sqrt{27}q/2p\sqrt{-p}$ . Cuando estas ecuaciones se grafican para valores fijos de  $\alpha$ ,  $\lambda$ ,  $\gamma$  y  $\epsilon$ , los lugares donde las gráficas de las curvas A.44 se intersectan son las raíces del sistema (2.7) y (2.8). Finalmente, el sistema total de funciones que dan las raíces finales para  $u_0 = 0$  y  $u_0 \neq 0$  es:

$$\begin{aligned} v_{0_1} &= -\frac{1}{\epsilon}(\alpha + u_0^2) \\ v_{1_1} &= 2\sqrt{-p/3} \cos \theta \\ v_{1_2} &= -2\sqrt{-p/3} \cos[(\pi - \theta)/3] \\ v_{1_3} &= -2\sqrt{-p/3} \cos[(\pi + \theta)/3] \\ v_{2_1} &= -\frac{\alpha}{\epsilon} \\ v_{2_1} &= 0 \\ v_{2_2} &= -2\sqrt{-p/3} \cos(\pi/6) \\ v_{2_3} &= -2\sqrt{-p/3} \cos(5\pi/6) \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

donde las últimas cuatro ecuaciones se obtienen al evaluar las ecuaciones (A.44) en  $q = 0$  y  $\theta = (2k + 1)\pi/2$ , para  $k = 0, 1, 2, \dots$ .



# Bibliografía

- [1] Michel Seul and David Andelman: **Domain Shapes and Patterns: The Phenomenology of Modulated Phases**: SCIENCE, vol. 267. 27 JANUARY (1995).
- [2] J.P. Gollub, J. S. Langer; **Pattern formation in nonequilibrium physics**; Reviews of Modern Physics, vol. 71, No. 2, Centenary (1999).
- [3] Daniel L. Stein; *Lectures in the Sciences of Complexity*. The proceeding of the 1988 complex systems. Held June-July 1988 in Sante Fe, New Mexico, Addison Wesley; pags. 175-193.
- [4] M. I. Ravinovich, A.B. Ezersky, P.D. Weidman: *The dynamics of patterns*: World Scientific Publishing Co. Pte. Lid. (2000): cap. 4. pags. 45-62.
- [5] Ole G. Mouritsen, *Life-as a matter of fat*. Springer (2005); cap 5, pags 63-71.
- [6] Carmen Varea; **Dynamics of growth in a tree-component mixture with competing interactions**, PHYSICAL REVIEW E, vol. 69, 061504 (2004).
- [7] Carmen Varea; **Spinodal decomposition, power laws, and wetting at a triple point**; PHYSICAL REVIEW E, vol. 67, 011508 (2003).
- [8] K. A. Dawson; **Interfases between phases in a lattices model of micro-emulsions**; PHYSICAL REVIEW A, vol. 35, No. 4, 1766-1773 (1987).
- [9] A.J. Bray; **Theory of phase-ordering kinetics**: ADVANCES IN PHYSICS, vol. 43, No. 3, 357-359. September (1994).
- [10] Denis Boyer, Jorge Viñals; **Grain boundary pinning and glassy dynamics in stripe phases**: PHYSICAL REVIEW E, vol. 65, 046119 (2002).
- [11] L. D. Landau and E.M. Lifshitz: *Fluid Mechanics*. Butterworth Heinemann, 2nd edition (1987) vol. 6, pags. 95-103.
- [12] J. von Hardenberg, E. Meron, M. Shachack, Y. Zarmi: **Diversity of vegetation patterns and Desertification**: Physical Review Letters, 87 (19), November 2001.

- [13] Octavio Mondragón Palomino, *Estudio de Interfases entre Fases Uniformes y Hexagonales en Bifurcaciones Subcríticas*. UNAM, 2004.
- [14] J. Swift, P. C. Hohenberg; **Hydrodynamic fluctuations at the convective instability**; PHYSICAL REVIEW A, vol. 15. No. 1, January 1977.
- [15] P. Manneville: *Dissipative structures and weak turbulence*. Academic New York. (1990).
- [16] R. K. Pathria; *Statistical Mechanics*. Butterworth Heinemann, second edition; **cap. 11**, pags. 314-321.
- [17] D. CHANDLER, *Introduction to modern statistical mechanics*, Oxford University Press, Oxford, 1987.
- [18] J.R. Iglesias, S. Goncalves, O. A. Nagel, Miguel Kiwi: **Modeling Two Dimensional Magnetic Domain Patterns**; PHYSICAL REVIEW B, Vol. 65, 064447 (2002).
- [19] E. A. Jagla; **Numerical Simulation of two dimensional magnetic domain patterns**: PHYSICAL REVIEW E Vol. 70, 046204 (2004).
- [20] John W. Cahn, John E. Hilliard; **Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy**; THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. Vol. 28, No. 2, February 1958, pags. 258-267.
- [21] L. Leibler: **Theory of Microphase Separation in Block Copolymers**: Macromolecules Vol. 13 (1980). pags 1602-1617.
- [22] T. Ohta, K. Kawasaki: **Equilibrium morphology of block copolymer melts**; Macromolecules, Vol. 19, 2621 (1986).
- [23] D. Furman, S. Dattagupta and Robert B. Griffiths: **Global phase diagram for a three-component model**: PHYSICAL REVIEW B, vol. 15, No. 1, January 1977.
- [24] J. D. Gunton, M. San Miguel, P. S. Sahni: *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Ref. [3]); Vol. 8, pag. 267.
- [25] P. M. Chaikin, T. C. Lubensky: *Principles of Condensed Matter Physics*: Cambridge University Press, (1995).
- [26] J. V. Uspensky; *Teoría de ecuaciones*. Limusa: **Cap. 4**, pags. 95-106.
- [27] M.C. Cross, D. Merion and Yahai Tu: **Chaotic domains: A numerical investigation**; CHAOS vol. 4. No. 4. (1994).



- [28] K. P. Shukla, B. Payandeh, M. Robert; **Theory of interfacial Phase Transitions in Surfactant Systems**, *Journal of Statistical Physics*, vol. 63, pags. 1053-1075, (1991).
- [29] Shigeyuki Komura, Hiroya Kodama; **Two-order parameter model for an oil-water-surfactant system**; *PHYSICAL REVIEW E*, vol. 55, 1722-1727, (1997).
- [30] Mohamed Laradji, Hong Guo, Martin Grant, Martin J. Zuckermann; **Dynamics of phase separation in the presence of surfactans**, *J. Phys. A: Math. Gen.* vol. 24 L629-L635. (1991).
- [31] Gerald Patzold, Kenneth Dawson; **Numerical simulation of phase separation in the presence of surfactants and hydrodynamics**; *PHYSICAL REVIEW E*, vol 52, 6908-6911. (1995).
- [32] L. Berthier, J.L. Barrat, and J. Kurchan; **Response function of coarsening systems**; *The European Physical Journal B*, vol. 11, pags. 635-641 (1992).