

Formação de padrões em sistemas complexos

Robson Luiz Santos

Fevereiro de 2004

Formação de padrões em sistemas complexos

Robson Luiz Santos

Orientador: Prof. José Marcos Andrade Figueiredo

Dissertação apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS, como requisito parcial para a obtenção do grau de MESTRE EM CIÊNCIAS (Física).

Agradecimentos

Ao meu orientador José Marcos, que me apoiou em todas as fases deste trabalho, possibilitando que os percalços fossem contornados num tempo tão breve quanto possível. Também, pela paciência e presteza em me ensinar aquilo que precisei para cumprir esta tarefa.

À Silvana, Maria Luiza e João Pedro, minha companheira e meus filhos, e minha família, que me forneceram a energia necessária para a realização deste trabalho.

À Arlete devo um agradecimento especial pela afeição demonstrada aos meus filhos.

Aos primeiros colegas de laboratório, Nathan, Orlando e Custela, e primordialmente ao Bira, pelo companheirismo e pelas boas dicas.

Ao Sr. João e demais funcionários da oficina mecânica e ao Rubens da Eletrônica pelos serviços prestados.

Aos colegas de graduação, em especial ao Mauro, Waldecy, Vagno, Roberto, Eduardo, e Ana Márcia com os quais formei um grupo de estudos que muito facilitou minha vida acadêmica.

A todos os meus companheiros do departamento de Física, professores, funcionários, estudantes de pós e graduação com os quais me relaciono no dia-a-dia.

Ao Cláudio e ao Aurélio, cuja sólida e instigante amizade muito contribuiu para minha formação.

Às instituições financiadoras: CNPq e Finep, pela concessão de bolsas, investimentos nos materiais de consumo e na estrutura do laboratório através do *PRONEX*.

A todos aqueles que contribuíram, da sua forma, e torceram para o sucesso deste trabalho.

Sumário

RESUMO	vi
ABSTRACT	vii
1 Introdução	1
1.1 Complexidade	1
1.2 Sistemas Uni-Dimensionais	3
1.3 Instabilidade do Impressor	3
2 Sistemas Clássicos que exibem Formação de Padrões	6
2.1 Turing	6
2.2 Convecção de Rayleigh-Bénard	8
2.3 Reações de Belousov-Zhabotinski	9
2.4 Padrões em sistemas biológicos	12
2.5 Solidificação direcional - Padrões em cristais líquidos	15
3 Termodinâmica de Não-equilíbrio e Sistemas Dinâmicos	17
3.1 Sistemas fora do equilíbrio Termodinâmico	17
3.2 Teoria de Estabilidade de Lyapunov	19
3.3 Análise de Estabilidade Linear	21
3.4 Teoria de Bifurcação	25
3.4.1 Equação de Landau-Ginzburg	26
4 Instabilidade do Impressor	30
4.1 A Equação de Movimento de um Fluido Viscoso	30
4.2 Estado Estacionário de um Fluxo Laminar	31

4.3	Interface Plana	34
4.4	Análise Linear na Instabilidade	36
5	Descrição do Experimento	43
5.1	Configuração Experimental	44
5.2	Preparando e realizando o Experimento	47
6	Resultados e Análises	49
6.1	Interface Plana	50
6.2	A Instabilidade na Interface	52
6.3	Análise do Padrão da Interface	54
6.4	Evolução da Amplitude do Modo Dominante	61
6.5	Crescimento da Instabilidade	62
7	Conclusão	66

Lista de Figuras

1.1	Padrão celular visto no cilindro.	4
2.1	Estruturas de Turing observadas numa reação química autocatalítica. (Figura extraída de [1]).	7
2.2	Rolos convectivos numa célula de Rayleigh-Bénard. (Figura extraída de [2]).	8
2.3	Propagação de onda numa camada bi-dimensional numa reação de Belousov-Zhabotinski(BZ). a) Padrão em forma de anéis. b) Ondas espirais nos sentidos horário e anti-horário. c) Espirais multiarmadas. (Figura extraída de [3]).	10
2.4	Uma reação química autocatalítica tipo BZ mostrando a coexistência de espirais e anéis. (Figura extraída de [4]).	11
2.5	Ciclo de vida da ameba <i>Dictyostelium discoideum</i> . (Figura extraída de [3]).	13
2.6	Ondas concêntricas e espirais da agregação de populações da ameba <i>Dictyostelium discoideum</i> numa superfície de ágar. As amebas movendo para o centro aparecem em claro e as amebas estacionárias aparecem em preto. (Figura extraída de [3]).	14
2.7	Evolução de um padrão celular em um experimento de solidificação direcional de um cristal líquido. (Figura extraída de [5]).	16
3.1	Diagrama de estabilidade de um sistema.	21
3.2	Bifurcação das soluções A_k como função do parâmetro $\omega(k)$. A linha pontilhada representa a solução que é instável.	28
3.3	a) Bifurcação supercrítica ilustrada para a equação de Landau-Ginzburg.	29

4.1	Diagrama das condições de contorno usadas na análise do fluxo. (Figura extraída de [6]).	32
4.2	Geometria usada para descrever a perturbação na interface plana . . .	37
5.1	Montagem experimental	44
5.2	Variação do perfil do cilindro ao longo de seu comprimento. A legenda especifica os ângulos de 90° , 180° e 270° à partir de um ponto zero de referência.	45
6.1	Posição da interface em função da velocidade do cilindro para: a) $b_o = 400\mu m$ e velocidade crítica de $0.021m/s$; b) $b_o = 800\mu m$ e velocidade crítica de $0.032m/s$. A linha representa a previsão teórica e os pontos os dados experimentais.	51
6.2	Imagem capturada pela câmera e sua correspondente interface detectada pelo programa. Nesse experimento, $b_o = 400\mu m$ e velocidade do cilindro é de $30.2mm/s$	53
6.3	Transformada de Fourier da imagem mostrada na Fig.6.2. A linha representa a transformada do harmônico e os pontos a transformada dos dados experimentais.	54
6.4	Evolução temporal do padrão para $V = 30.2mm/s$ e $b_o = 400\mu m$. . .	55
6.5	Sequência das transformadas de Fourier para as imagens mostradas na Fig.6.4. As linhas pontilhadas representam a transformada dos dados experimentais e a linha inteira sem ponto representa a transformada de um harmônico simples.	60
6.6	Ajuste dos pontos experimentais usando a equação de amplitude de Landau (Eq.3.21), onde obtivemos $w = 0.154s^{-1}$ e $\sigma = 4.3 \times 10^{-6} (mm \cdot s)^{-1}$ para $V = 41.7mm/s$ e $b_o = 400\mu m$	61
6.7	Representação da taxa de crescimento em função da velocidade do cilindro para $b_o = 400\mu m$. A linha representa a curva teórica dada pela Eq.6.3 e os pontos representam os dados experimentais. O gráfico menor detalha os pontos próximos a bifurcação.	63

6.8 Representação da taxa de crescimento em função da velocidade do cilindro para $b_o = 800\mu m$. A linha representa a curva teórica dada pela Eq.6.3 e os pontos representam os dados experimentais. O gráfico menor detalha os pontos próximos a bifurcação. 64

Resumo

Neste trabalho, foi feito e analisado um estudo experimental de um sistema formador de padrão. Deste modo, uma abordagem das propriedades de formação de padrões é apresentada, baseando-se em modelos de termodinâmica de não-equilíbrio, obtidos na literatura.

Na sequência, apresentamos os nossos resultados do experimento, no qual é observada a desestabilização de uma interface fluido-fluido sob condições de escoamento viscoso. Técnicas de processamento de imagens nos permitiram obter medidas que nos deram informações relevantes da interface de modo a caracterizar a dinâmica do padrão observado.

Deste modo, a relação de dispersão para a taxa de crescimento do padrão foi medida e observamos que ela está em bom acordo com o modelo teórico disponível, na região próxima à bifurcação. Obtivemos também uma consistência qualitativa para a totalidade do conjunto de condições do escoamento utilizadas.

A análise da posição média da interface também forneceu informações importantes, e mostra um comportamento crítico na bifurcação. Isto possibilita que futuras observações relativas à dinâmica de precursores neste sistema sejam realizadas.

Abstract

In this work an experimental study of a pattern forming system was performed and analyzed. A general approach to properties of pattern formation is presented based on a non-equilibrium thermodynamic model, following results found in the literature.

We present results of the experiment performed observing the destabilization of a fluid-fluid interface under a viscous flow. Image processing techniques allowed us to obtain measurements of relevant interface information in order to capture the pattern dynamics.

This way pattern growth rate dispersion curve was measured and found to be in good agreement with the theoretical model, in a region close to the bifurcation. Full qualitative agreement was obtained in the whole range of flow conditions used.

Analysis of the mean interface position also delivered important information, and showed a critical behavior at the bifurcation. This opens the possibility of future observations concerning precursor dynamics in this system.

Capítulo 1

Introdução

1.1 Complexidade

O nosso mundo físico é um mundo de instabilidades e flutuações, que são responsáveis pela variedade e riqueza de formas e estruturas que observamos ao nosso redor. Para entendermos essa *complexidade*, temos de fazer uso de duas disciplinas: a termodinâmica de não-equilíbrio e a moderna teoria de sistemas dinâmicos (*caos*). A primeira, com a descoberta de novas propriedades da matéria em condições fora do equilíbrio [7] e a segunda com a descoberta de que pequenas mudanças nas condições iniciais podem levar à amplificações dos efeitos desses desvios, ou seja, que a instabilidade tende a prevalecer em muitos sistemas dinâmicos [8]. Vivemos num ambiente onde encontramos igualmente, regularidade e flutuações de larga escala. Como evidência da regularidade vemos que a matéria está associada à um esmagador domínio de partículas sobre as antipartículas. Então, qual será o mecanismo de seleção que permite o surgimento de tal regularidade em larga escala? Contrariamente, esperaríamos uniformidade e estabilidade de nossas condições climáticas. Contudo, o nosso clima flutua violentamente em períodos muito curtos quando comparados ao tempo característico da evolução do Sol. Como isto é possível? O entendimento destas e de muitas outras questões se dão quando lançamos mão da teoria de Sistemas Complexos.

Não é difícil entender porquê fomos, inicialmente, levados a identificar *complexidade* com o fenômeno da vida. Tendo em vista sua morfologia e sua funcionalidade, os seres vivos são os mais complexos e organizados objetos existentes na Natureza.

Eles servem como protótipos dos quais as ciências podem obter motivação e inspiração para entender a complexidade, já que eles preservam memória das formas e funções adquiridas durante a evolução biológica e também representam sistemas sob condições fora do equilíbrio. No nível celular, as grandes não homogeneidades presentes, como por exemplo, a concentração de íons de potássio, K^+ , dentro dos neurônios é maior que no ambiente externo enquanto que o oposto é verdadeiro para íons de sódio, Na^+ , implicam em estados de elevado não-equilíbrio que originam processos tais como a condução de impulsos nervosos que desempenham um importante papel na vida. Estes estados de não-equilíbrio são mantidos por transporte ativo e reações bio-energéticas como glicólise ou respiração.

Mas, há algum tempo, o desenvolvimento da Matemática e das ciências físicas impuseram uma nova atitude na descrição da natureza. O desenvolvimento paralelo na teoria termodinâmica de fenômenos irreversíveis [9, 7, 3], na teoria de sistemas dinâmicos [8] e na mecânica clássica mostrou-nos que a diferença entre "simples" e "complexo", entre "ordem" e "desordem" é muito mais estreita que previamente se pensava. Um exemplo de sistema mecânico simples que pode manifestar comportamento complexo é o pêndulo forçado periodicamente, que no limite entre rotação e vibração dá origem a uma rica variedade de movimentos, incluindo a possibilidade de excursões quase-turbulentas aleatórias em torno de sua posição de equilíbrio. Outros sistemas ordinários como uma camada de fluido ou uma mistura de produtos químicos podem gerar, sob certas condições, fenômenos auto-organizados numa escala macroscópica na forma de padrões no espaço ou ritmos no tempo. Em resumo, a idéia de *complexidade* não está limitada à Biologia. Ela invade as ciências físicas e parece estar profundamente encrustada nas leis da natureza.

Tendo dito que sistemas físicos-químicos podem ter comportamento complexo que exibem muitas das características usualmente atribuídas à vida, é legítimo perguntar se algumas das características de sistemas biológicos podem vir de transições induzidas pelo não-equilíbrio e mecanismos desestabilizadores similares à autocatálise química? Provavelmente, esta seja uma das muitas questões fundamentais que podem ter surgido na ciência para a qual ainda não se obteve uma resposta satisfatória.

1.2 Sistemas Uni-Dimensionais

Alguns sistemas físicos que se estendem em somente uma dimensão espacial podem exibir uma variedade de padrões espaço-temporais que são muito úteis para o entendimento de padrões que surgem em sistemas de maior dimensionalidade. Couillet e Iooss [10], tendo como referência alguns experimentos e baseando-se em argumentos de simetria, determinaram a existência de dez modos de instabilidades de padrões celulares uni-dimensionais em alguns experimentos e isto serve como motivação para procurar novas instabilidades uni-dimensionais. Experimentalmente, isto não significa olhar para instabilidades em um meio uni-dimensional mas, sim, estudar instabilidades que dão origem a uma série de estruturas (células de convecção, vórtices, dendritos, etc.) em geometrias tais que o acoplamento e a dinâmica dessas estruturas possam ser consideradas uni-dimensionais. Como exemplo, podemos citar experimentos como os da *instabilidade de Rayleigh-Bénard*, quando confinados em células estreitas.

Na recente investigação de regimes dinâmicos em sistemas uni-dimensionais, aqueles que exibem interfaces estão entre os mais estudados [11]. Quando uma interface é globalmente estabilizada por um gradiente externo, a instabilidade presente leva a formação de um padrão celular. Entre os sistemas onde isto ocorre podemos citar a transição de fase direcional em cristais líquidos [5], o padrão de uma coluna de líquido formada abaixo de uma fonte circular [12] e o *Directional Viscous Fingering* [11, 6, 13]. Esta última instabilidade ocorre em muitos processos industriais de tingimento e também em gráficas que usavam cilindros na impressão de jornais [14] e ela se deve ao deslocamento de um fluido de baixa viscosidade(ar) passando por um outro fluido de maior viscosidade(óleo, tinta, etc.). Ela é também conhecida como *instabilidade do impressor*. Nela, assim como na *instabilidade de Saffman-Taylor* [15], a tensão superficial e o gradiente de pressão são os fatores de estabilização. Esse gradiente é gerado pelo estreitamento da passagem do fluido mais viscoso sob o cilindro.

1.3 Instabilidade do Impressor

Neste trabalho, estudamos o padrão formado na interface entre dois fluidos de viscosidades muito diferentes, o ar e um óleo de silicone. Para gerar esse padrão, usamos

um experimento, simples e bem preciso, que consiste em um cilindro parcialmente em contato com uma camada desse óleo distribuído sobre um plano liso, tal como o usado por Batista [16] e também por Hakim *et al* [6]. O óleo fica sujeito a um gradiente de pressão, devido à estreita lacuna existente entre o cilindro e o plano, que compete com a tensão superficial da interface ar-óleo. Dessa competição, na qual as variáveis termodinâmicas envolvidas nesse processo evoluem no tempo e no espaço, é gerado dinamicamente o padrão observado na figura 1.1.

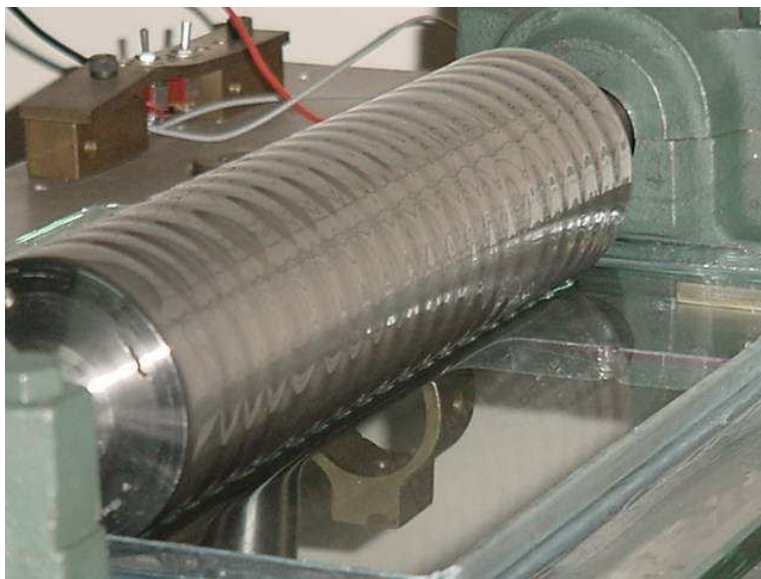


Figura 1.1: Padrão celular visto no cilindro.

Para descrever esse padrão, fazemos o processamento das imagens que são capturadas por uma placa existente num computador através de uma câmera digital de alta resolução. Essas imagens são processadas num programa desenvolvido em C por nós e posteriormente analisadas. De muito interesse para nossas análises são as transformadas de Fourier do padrão e a evolução temporal da amplitude do padrão, bem como o recuo da interface plana para as diversas velocidades do cilindro.

Essa dissertação segue o roteiro dado a seguir: No capítulo 2, daremos um bom exemplo da conexão entre a auto-organização físico-química e a ordem observada em um sistema biológico, juntamente com exemplos de outros fenômenos

complexos que surgem em sistemas mais elaborados de natureza físico-químicos bem como em nosso meio ambiente. No capítulo 3 mostraremos alguns aspectos teóricos usados para descrição desses fenômenos e que tratam de mecanismos que são comuns aos diferentes tipos de padrões; são eles: não-equilíbrio, instabilidades, análise de estabilidade linear e bifurcação. No capítulo 4, mostraremos e desenvolveremos o modelo teórico em que nos baseamos para produzir este trabalho. No capítulo 5 descreveremos a configuração experimental mostrando o objeto desta dissertação que é o padrão formado numa instabilidade do impressor. No capítulo 6, mostraremos e faremos a análise dos resultados atingidos. No capítulo 7 daremos uma conclusão sobre o trabalho e relacionaremos as perspectivas abertas por ele.

Capítulo 2

Sistemas Clássicos que exibem Formação de Padrões

2.1 Turing

Um dos primeiros trabalhos que levaram ao estudo sistemático de formação de padrões foi um artigo escrito em 1952, pelo matemático Britânico Alan Turing [17]. Nele, Turing sugeriu que reações químicas com uma apropriada cinética não-linear acoplada a difusão levam a formação de padrões estacionários do tipo encontrados em organismos vivos. As figuras que aparecem na pele de zebras e girafas, por exemplo, seriam resultados do desenvolvimento de uma instabilidade de Turing. Esses padrões surgem espontaneamente em um sistema uniforme sem qualquer influência externa específica. Nesses sistemas simétricos mas instáveis, determinadas irregularidades, mesmo que muito pequenas, se ampliam levando o sistema para um novo estado estacionário. Embora os processos dissipativos em sistemas termodinâmicos fora do equilíbrio forneçam alguma resposta, nós sabemos hoje que a morfogênese biológica é um processo muito mais complexo que os processos de difusão e reações químicas. Contudo, as estruturas espaciais dissipativas que Turing descreveu são de grande interesse e tem merecido estudos teóricos e experimentais em sistemas químicos fora do equilíbrio.

Uma característica importante destes sistemas para o nosso propósito é a competição entre diferentes taxas de crescimento temporal e o alcance espacial da difusão para os diversos elementos químicos do sistema. É preciso enfatizar que os padrões

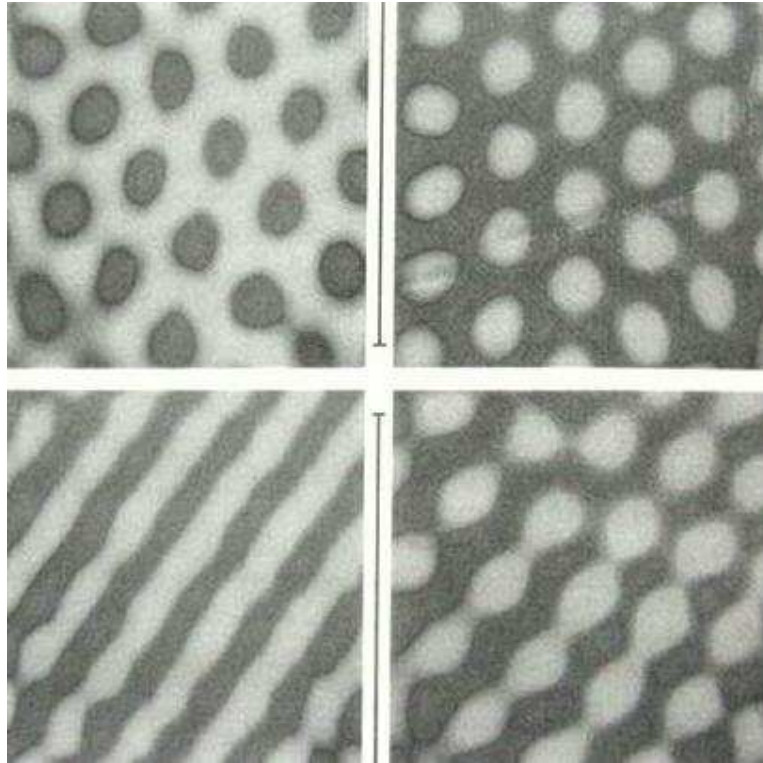


Figura 2.1: Estruturas de Turing observadas numa reação química autocatalítica. (Figura extraída de [1]).

de Turing são formados por difusão somente quando o estado de homogeneidade espacial é estável na ausência de efeitos difusivos. Uma condição descrita como *ativação local com inibição lateral* é que produz os padrões de Turing e ela consiste em que o inibidor precisa difundir mais rapidamente que o ativador.

Os coeficientes de difusão usualmente homogeneizam a concentração no sistema, mas quando acoplado com reações químicas autocatalíticas, na qual o aumento de uma substância u autocatalítica leva a um crescimento ainda maior de u , os coeficientes de difusão geram não-homogeneidades ou padrões. Para a formação de padrões, os coeficientes de difusão precisam ser diferentes. Se eles forem quase iguais, a difusão não gera instabilidade; ela somente tende a homogeneizar a instabilidade presente. Agora, se numa pequena região, uma das espécies difunde mais rapidamente que a outra, o crescimento de uma espécie pode ser facilitado pela diminuição da outra. Assim o estado perde estabilidade e as não homogeneidades começam a

crescer, emergindo desta instabilidade um padrão espacial que é chamado de *estrutura de Turing* (Fig.2.1). É possível, em certos casos, que surja uma perturbação que contenha oscilações temporais, que gerarão ondas propagadoras e, experimentalmente, elas podem ser observadas numa reação de Belousov-Zhabotinski.

2.2 Convecção de Rayleigh-Bénard

A instabilidade de Rayleigh-Bénard surge num fluido localizado entre duas placas horizontais, estando a placa inferior a uma temperatura maior que a da placa superior. Quando a diferença de temperatura ΔT é pequena, existe *condução de calor* para a placa superior. Mas, quando ΔT é maior que um certo valor, a condução é substituída por *convecção*, e surgem os rolos mostrados na Fig.2.2.

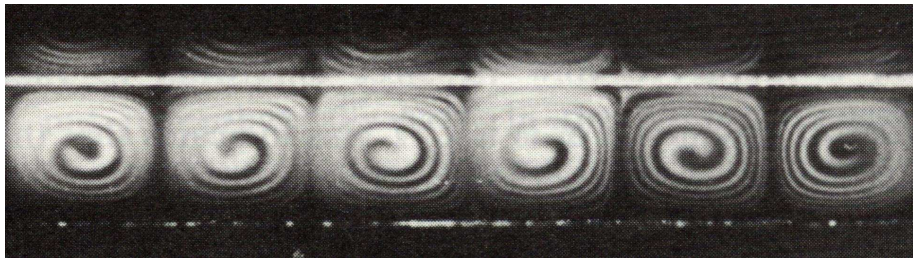


Figura 2.2: Rolos convectivos numa célula de Rayleigh-Bénard. (Figura extraída de [2]).

Para entender essa instabilidade devemos considerar uma pequena região do fluido sujeita à uma flutuação da temperatura, $T = T(z) + \Theta$ ($\Theta > 0$). Essa porção do fluido, por ser menos densa, está sujeita à um empuxo orientado para cima e pode subir. Como T decresce no sentido para cima, essa porção do fluido encontra fluido mais denso, o que faz aumentar o empuxo. Nessa situação temos uma amplificação da perturbação. Os fatores que tendem a estabilizar são: a) A viscosidade do fluido se opondo ao empuxo; b) A condução térmica reduzindo a flutuação da temperatura Θ . Assim, em condições tais que o gradiente de temperatura seja suficiente para superar a viscosidade e a condução térmica, a instabilidade tem início e o movimento do fluido organiza-se de tal modo a apresentar rolos convectivos (Fig.2.2)

que possuem diâmetros comparáveis à altura da camada. Usando outra linguagem, podemos dizer que a instabilidade ocorre para o menor ΔT em que há equilíbrio entre a energia dissipada pela viscosidade e a energia liberada pelo empuxo.

Um parâmetro adimensional que caracteriza esse sistema é o número de Rayleigh dado por

$$R_a \equiv \frac{\alpha \cdot g \cdot \Delta T \cdot h^3}{\kappa \cdot \nu} \quad (2.1)$$

onde α é o coeficiente de expansão térmica, g é a aceleração da gravidade, h é a distância entre as placas, κ é a condutividade térmica e ν é a viscosidade cinética.

2.3 Reações de Belousov-Zhabotinski

Algumas estruturas dissipativas mostram como a quebra de simetria, temporal e translacional, podem levar a um comportamento oscilatório. Quando Bray, em 1921, estudava a decomposição de peróxido de hidrogênio em água e oxigênio, com iodine como catalisador, ele fez uma das primeiras observações de reações oscilatórias. No entanto, seus resultados encontraram desconfiança geral, pois havia a suposição de que eles contrariavam a 2ª lei da Termodinâmica. Aproximadamente 30 anos depois, graças ao trabalho de Onsager e Prigogine, se tornou claro que reações químicas oscilatórias nada tinham a ver com a 2ª lei da termodinâmica porque nessas reações estavam envolvidos processos de não-equilíbrio para os quais o princípio do aumento contínuo da entropia, que vem da 2ª lei, não é válido para a termodinâmica fora do equilíbrio. Somente usando a termodinâmica dos processos irreversíveis, fomos capazes de entender como estruturas regulares no espaço e no tempo podem surgir de uma desordem inicial.

Após a publicação dos trabalhos de Onsager e Prigogine e graças às observações de B. P. Belousov e aos trabalhos de A. M. Zhabotinski, essas reações químicas puderam ser entendidas e se tornaram protótipos de várias outras reações similares nas quais surgem estruturas na forma de espirais, anéis ou ondas circulares concêntricas (ondas químicas).

A principal característica da versão moderna das reações de Belousov-Zhabotinski, B.Z., é a oxidação por íons de bromato, em uma solução ácida (e.g., ácido cítrico, ácido malônico, etc.), de várias substâncias orgânicas. Surgem da reação

CO_2 e H_2O , e atuam como catalisadores Ce^{3+}/Ce^{4+} , Mn^{2+}/Mn^{3+} , etc. Num reator bi-dimensional preenchido com uma solução tendo iguais concentrações iniciais de reagentes, o desenvolvimento da instabilidade leva a uma quebra espontânea de simetria. Isto resulta na formação de padrões com simetria cilíndrica, como visto na figura 2.3

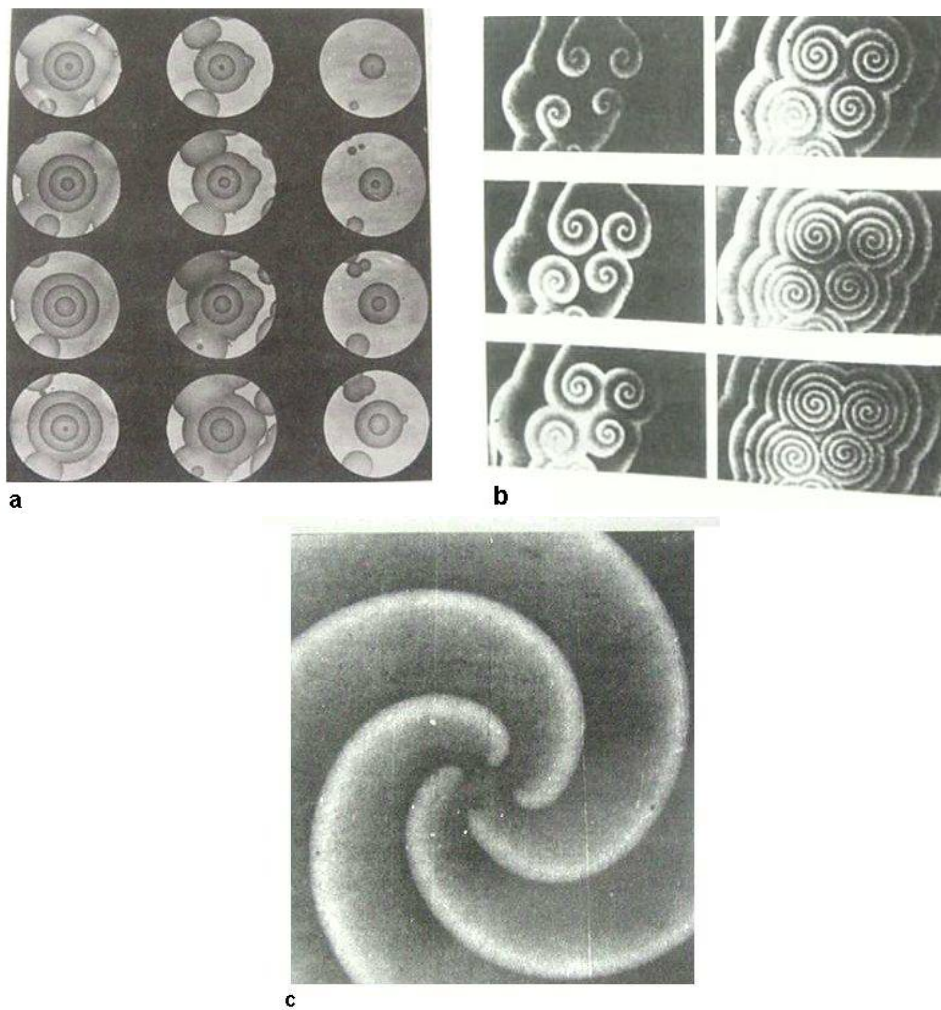


Figura 2.3: Propagação de onda numa camada bi-dimensional numa reação de Belousov-Zhabotinski(BZ). a) Padrão em forma de anéis. b) Ondas espirais nos sentidos horário e anti-horário. c) Espirais multiarmadas. (Figura extraída de [3]).

Nesta reação, os efeitos não-lineares são vistos quando os reagentes da reação B.Z. são colocados em contato: além das estruturas espaciais sob a forma de anéis, espirais ou de ondas circulares concêntricas, observam-se também oscilações temporais com padrões mais ou menos complexos, e sob certas condições, padrões caóticos. Prigogine e Nicolis[3] e Glansdorff[9] não somente mostraram que as oscilações transientes observadas nas reações B.Z. são consistentes com a termodinâmica de um sistema fechado fora do equilíbrio, mas também demonstraram que desvios suficientes do equilíbrio podem dar origem a *estruturas ordenadas* ou *dissipativas*, assim como Turing[17] também havia observado.



Figura 2.4: Uma reação química autocatalítica tipo BZ mostrando a coexistência de espirais e anéis. (Figura extraída de [4]).

Nessa reação, a simetria de translação é quebrada e se quisermos observar espirais e não anéis, nós somente precisamos agitar o reator ou de alguma maneira romper a frente de onda cilíndrica. O resultado será a formação de deslocamentos topológicos e uma onda espiral passará a existir (Fig.2.4).

2.4 Padrões em sistemas biológicos

O desenvolvimento embrionário é uma sequência de eventos que fazem emergir de uma única célula, o óvulo fertilizado, um organismo completo. Dentre os inúmeros exemplos que a natureza nos fornece como ilustração deste processo, um dos mais simples é o de bactérias, cujo desenvolvimento se reduz a uma sequência de divisões celulares. No outro extremo do espectro, estão os organismos mais avançados como os mamíferos cujo desenvolvimento leva a um corpo multicelular no qual as células formam tecidos e órgãos específicos que podem comprimir algo como 10^{12} células.

No presente, está fora de questão conseguir um detalhado entendimento de como tais processos ocorrem e, em particular, de como eles são coordenados com a fantástica precisão que permite que cada célula desempenhe seu papel no tempo certo e no lugar certo. Em vez disso, discutiremos sistemas vivos cujo desenvolvimento é caracterizado por um nível intermediário de complexidade, como as amebas da espécie *Dictyostelium discoideum*. Aqui, desenvolvimento se reduz essencialmente ao fenômeno de transição que marca a passagem do estágio unicelular para o pluricelular e que exhibe padrões similares àqueles que ocorrem nas reações B.Z.

A Fig.2.5 descreve o ciclo de vida dessa espécie. Em (a) as amebas estão no estágio unicelular. Elas se movem no meio que as rodeiam; elas se alimentam de bactérias e se proliferam por divisão celular. Globalmente falando, elas constituem um sistema uniforme, visto que sua densidade (número de células por centímetro quadrado) é essencialmente constante. Supondo que essas amebas estejam sujeitas à carência alimentar, que pode ser induzida num laboratório ou pode ocorrer na natureza devido às condições ambientais desfavoráveis. Isso é análogo a aplicar uma força num experimento físico ou químico. Interessantemente, as células individuais não morrem, mas elas respondem a essa força se agregando (b) em torno de um centro de atração. A homogeneidade inicial é quebrada e o espaço se torna estruturado. O corpo multicelular resultante, o plasmódio (c), é capaz de se mover,

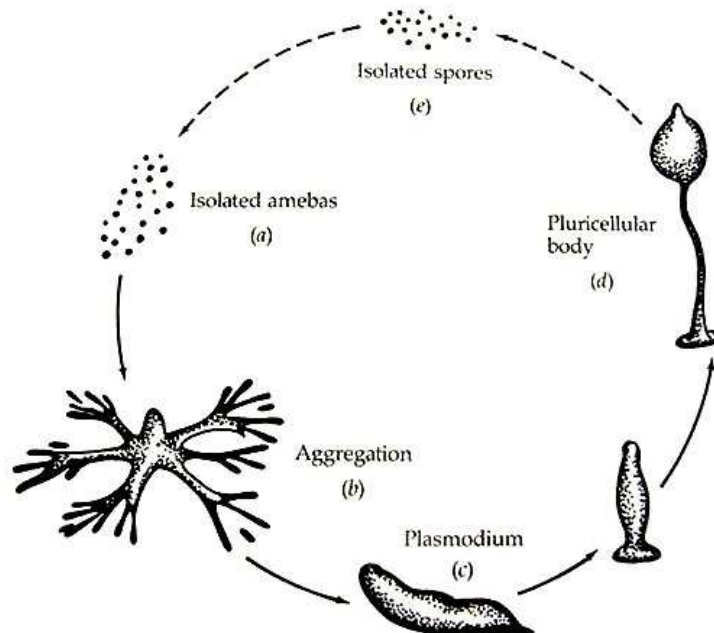


Figura 2.5: Ciclo de vida da ameba *Dictyostelium discoideum*. (Figura extraída de [3]).

presumivelmente, para obter condições mais favoráveis de temperatura e umidade. Após essa migração, o plasmódio pára de se movimentar e sofre uma morfogênese complexa, se diferenciando (d) em um corpo de frutificação multicelular constituído de um talo que sustenta e mantém distante do solo uma cabeça repleta de esporos. Eventualmente, os esporos são disseminados (e) no meio ambiente, e, se as condições forem favoráveis, eles germinam em amebas e o ciclo de vida reinicia.

O fenômeno de agregação nessa ameba representa a transição de um estágio unicelular do ciclo de vida para um estágio multicelular e nos fornece um bom exemplo de formação de um padrão espaço-temporal, em nível supracelular. Sujeitas à inanição, algumas células começam a sintetizar e lançar no meio extracelular, sinais de uma substância química conhecida com *monofosfato cíclico de adenosina* (cAMP). A sua síntese e emissão são periódicas, como num sistema B.Z.. Esse sinais químicos se difundem no meio extracelular e dois tipos de eventos são disparados. Primeiro, as outras amebas são atraídas para as centrais emissoras (centro de agregação), num movimento orientado conhecido como *quimiotaxia*. Este movi-

mento dá origem à um padrão entre as células, como mostra a Fig.2.6 que é muito parecido com o padrão ondulatório em uma reação tipo B.Z. (Fig.2.4).

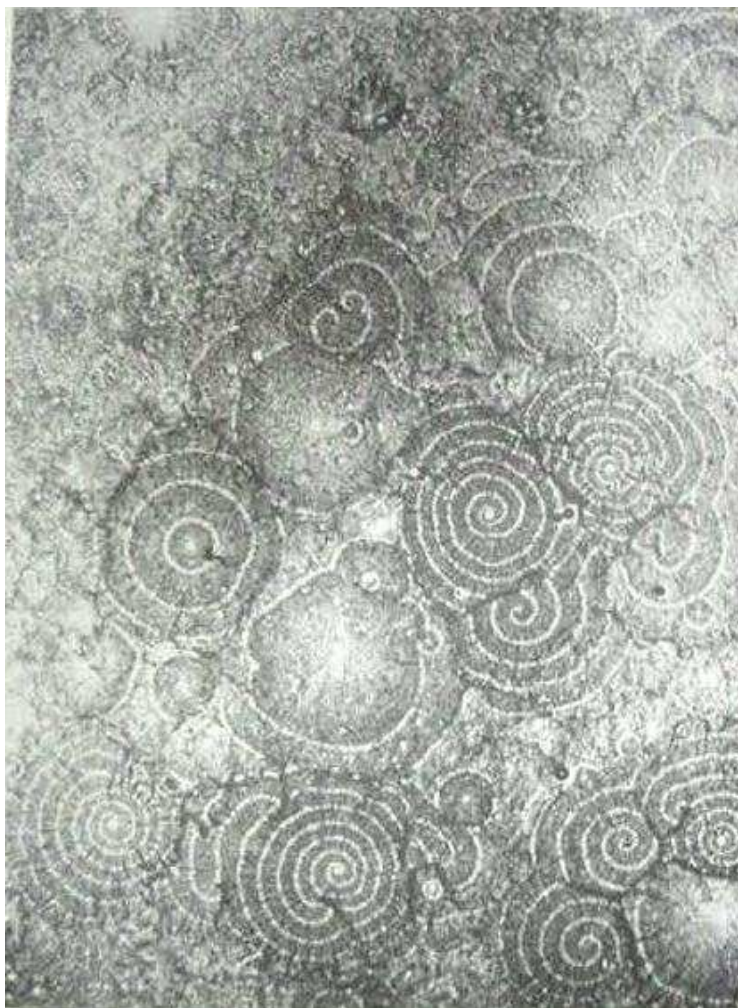


Figura 2.6: Ondas concêntricas e espirais da agregação de populações da ameba *Dictyostelium discoideum* numa superfície de ágar. As amebas movendo para o centro aparecem em claro e as amebas estacionárias aparecem em preto. (Figura extraída de [3]).

No segundo evento, o processo de agregação é amplificado já que as amebas são capazes de "sentir" os sinais periódicos vindos desta central e, numa resposta

excitável, retransmití-los produzindo ondas de agregação, concêntricas ou espirais, numa periodicidade de 5 a 10 minutos. A periodicidade do movimento das amebas coincide com a dos pulsos de cAMP. Este movimento permite ao organismo controlar um largo território e formar aglomerados com $\sim 10^5$ células não divisionárias, envolvidas por uma matriz extracelular[18].

2.5 Solidificação direcional - Padrões em cristais líquidos

Padrões em solidificação direcional fazem parte de uma ampla classe de padrões onde o crescimento da interface e a difusão são os processos dominantes. Nele, o fenômeno físico básico é o crescimento de uma fase estável de um material (usualmente a fase sólida em uma transição sólido-líquido mas, em particular, a fase ordenada em uma transição de fase nemático-isotrópico em um cristal líquido) em uma fase líquida instável, usualmente preparada por super-resfriamento. O processo que limita o crescimento é a difusão completa do calor latente liberado pela solidificação ou, no caso da solidificação de misturas, a difusão completa do componente da mistura que tem uma baixa concentração no soluto.

Numa solidificação direcional de uma amostra de cristal líquido dopado com uma pequena quantidade de impureza e submetida a um gradiente de temperatura, instabilidades morfológicas podem ocorrer formando um padrão na interface nemático-isotrópico dessa mistura binária. Na Fig.2.7, mostramos um padrão em uma interface de um cristal líquido tipo *8CB* obtido num experimento realizado por Gomes[5].

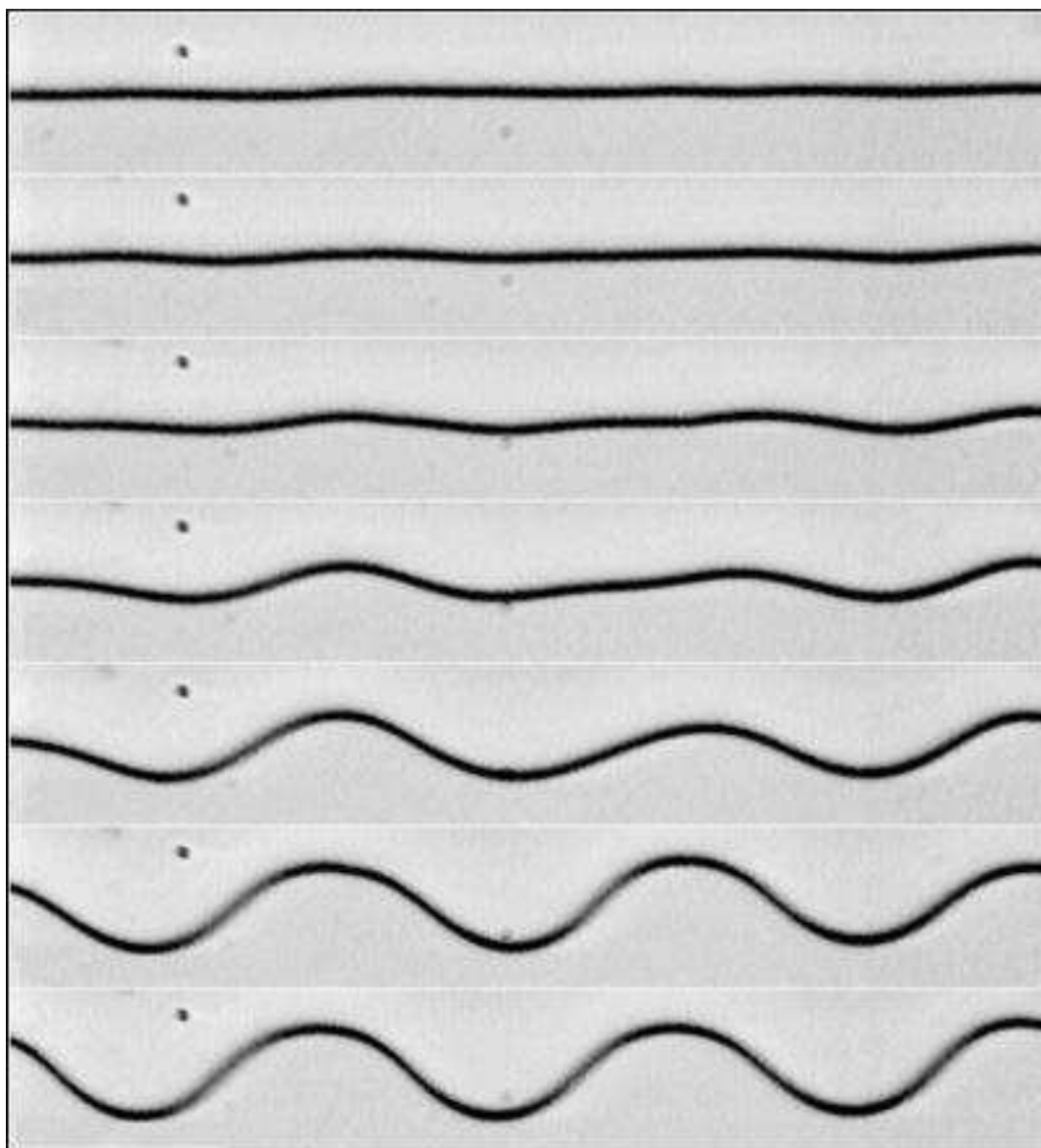


Figura 2.7: Evolução de um padrão celular em um experimento de solidificação direcional de um cristal líquido. (Figura extraída de [5]).

Capítulo 3

Termodinâmica de Não-equilíbrio e Sistemas Dinâmicos

3.1 Sistemas fora do equilíbrio Termodinâmico

Num mundo em que sistemas em equilíbrio termodinâmico são exceção, faz-se necessário lançar mão de uma teoria Termodinâmica para sistemas fora do equilíbrio para que possamos descrever e entender os fenômenos que advém desses sistemas. É exatamente deles que observamos a riqueza exibida pela Natureza. Mesmo assim, não podemos desprezar o tratamento dado pela termodinâmica que descreve sistemas no estado de equilíbrio já que é muitas vezes possível descrever um sistema no não-equilíbrio assumindo que para um dado elemento de volume, δV , desse sistema, as relações termodinâmicas de equilíbrio permanecem válidas. Este conceito é chamado de **equilíbrio local** e ele desempenha papel satisfatório em muitos casos.

Em sistemas abertos, sujeitos à troca de matéria e energia, portanto fora do equilíbrio termodinâmico, podemos escrever a mudança na entropia de um elemento de volume como

$$dS = d_e S + d_i S \quad (3.1)$$

onde $d_e S$ é a mudança na entropia devido à troca de matéria e energia e $d_i S$ é a mudança na entropia devido aos processos irreversíveis que ocorre dentro do sistema.

Como em sistemas fora do equilíbrio termodinâmico, as variáveis termodinâmicas podem mudar com o tempo, vemos que a entropia de um elemento de volume pode mudar por duas razões. Primeiro, por causa do possível fluxo de entropia

para dentro (ou para fora) desse elemento de volume e , segundo, porque existe uma fonte efetiva de entropia devido aos processos irreversíveis dentro do elemento de volume. Essa fonte é sempre não negativa já que a entropia só pode ser criada ou, no mínimo, não destruída. É possível, quando um sistema não está muito distante do equilíbrio, formular uma teoria de campo que relaciona a produção efetiva de entropia com os vários processos irreversíveis que ocorrem dentro do sistema. Ela envolve as leis macroscópicas de conservação, relacionando difusão de elementos químicos, condução de calor e fluxo viscoso com os gradientes de uma variável de estado intensiva como o gradiente de potencial químico, de temperatura e de velocidade. Assim, obtemos que a fonte de entropia pode se mostrar como a soma de termos onde cada um desses termos é formado pelo produto de um fluxo (caracterizando um processo irreversível) com uma quantidade chamada de *força termodinâmica* que é devida às não uniformidades do sistema ou o desvio do valor de equilíbrio, de alguma variável de estado. Essa força é representada pelos gradientes dessas variáveis termodinâmicas.

Um sistema onde essas relações são válidas é dito estar no regime linear. Nele podemos aplicar as relações recíprocas de Onsager que estabelece que os fluxos sejam funções lineares das forças termodinâmicas quando o desvio do equilíbrio não é muito grande. Essa relação é dada por

$$J_k = \sum_j L_{kj} F_j \tag{3.2}$$

onde L_{kj} são constantes chamadas **coeficientes fenomenológicos**.

Há situações em que o fluxo de matéria e energia pode levar um sistema para muito distante do equilíbrio termodinâmico, que não podem ser especificados unicamente por equações macroscópicas. Assim, não mais se aplicam as relações de Onsager. Nesse regime "não-linear", os processos irreversíveis geram a instabilidade que destrói a "ordem" enquanto que as flutuações internas, as não homogeneidades e pequenas influências podem dirigir o sistema de um estado instável para um dentre os vários possíveis estados de não-equilíbrio. Eventualmente, esses novos estados podem apresentar a organização espaço-temporal mostrada nos modelos formadores de padrão como os padrões em fluidos(Fig.1.1), padrões geométricos com grande simetria em concentrações(Fig.2.3) ou variações periódicas de concentrações(Fig.2.5) exibidos no capítulo 2.

Não existe, no regime "não-linear", um princípio geral como o da minimização da energia ou da maximização da entropia para determinar o estado de um sistema. No entanto, existem critérios que nos permitem identificar se a instabilidade presente pode fazer o sistema evoluir para um estado estacionário estável ou não. Dentre essas ferramentas que nos possibilitam descrever a condição de estabilidade de um sistema, desenvolveremos neste capítulo as seguintes teorias:

- i) Teoria de Estabilidade de Lyapunov;
- ii) Análise de Estabilidade Linear;
- iii) Teoria de Bifurcação.

3.2 Teoria de Estabilidade de Lyapunov

A *teoria de estabilidade de Lyapunov* estabelece um critério que nos fornece as condições para a estabilidade em termos matemáticos bastante precisos e que possui um significado bem intuitivo. Considere um sistema que evolua de acordo com uma lei dinâmica dada por

$$\frac{dX_k}{dt} = F_k(X_1, X_2, \dots, X_n; \lambda_j) \quad (3.3)$$

onde X , em geral, pode ser um vetor n -dimensional com componentes X_k , $k = 1, 2, \dots, n$. F_k é uma função cuja estrutura depende do sistema considerado, podendo ser um operador diferencial parcial se as componentes X_k forem funções do tempo e da posição \mathbf{x} e λ_j representa parâmetros de controle que podem depender ou não do tempo. Na ausência de forças, a Eq.3.3 deve reproduzir um estado estacionário de não equilíbrio

$$F_k(X_{s1}, X_{s2}, \dots, X_{sn}; \lambda_j) = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad (3.4)$$

onde X_{sk} representa as n componentes de um estado estacionário em um sistema físico.

A estabilidade dos estados estacionários X_{sk} depende dos tipos de interações que o sistema pode ter com o ambiente. Devido à complexidade dessas interações, é impossível controlar as variáveis de estados com a precisão necessária para que possamos fazer previsões exatas desse sistema. No entanto, fazendo uma pequena perturbação, $x_k(t)$, no estado de equilíbrio do sistema, estaremos tornando-o mais

compatível com o que acontece e assim poderemos obter algumas informações acerca dele. Então, o estado perturbado fica sendo

$$X_k(t) = X_{sk} + x_k(t) \tag{3.5}$$

De fato, como estamos tratando de um amplo número de interações, devemos entender que as variáveis de estado representam a média temporal de estados instantâneos num dado intervalo de tempo. Se obtivermos um dado estado, veremos que o valor de referência de suas variáveis macroscópicas apresentam desvios gerados espontaneamente dentro do sistema, os quais chamamos de *flutuações*. Assim, $x_k(t)$ na Eq.3.5 constitui parte da dinâmica interna do sistema que estamos considerando. Abaixo, descreveremos a resposta do sistema a esses desvios do estado de referência, X_{sk} , levando em conta casos específicos.

a) Considere um sistema num estado X_k , distante do estado de equilíbrio por um valor arbitrário $\epsilon > 0$. Se o desvio do equilíbrio, $x_k(t) = | X_k(t) - X_{sk} |$, permanecer menor que ϵ para qualquer tempo maior que t_o , então $X_k(t)$ permanece próximo do seu valor de referência e esse tipo de equilíbrio é dito estável.

b) Se a perturbação $x_k(t)$ decair para zero quando o tempo $t \rightarrow \infty$, o estado $X_k(t)$ tende a X_{sk} . Podemos dizer que um sistema assim não guarda memória da perturbação, portanto esse tipo de equilíbrio, chamado de assintoticamente estável, necessariamente implica irreversibilidade.

c) Se nas vizinhanças de X_{sk} existir uma perturbação tal que seu valor, $x_k(t) = | X_k(t) - X_{sk} |$, seja maior que o valor arbitrário (e positivo) ϵ para qualquer tempo maior que t_o , então o estado de referência é instável. Isto se manifesta, geralmente, através de um crescimento exponencial da perturbação em seu estágio inicial.

d) Em alguns sistemas, o comportamento do estado, $X_k(t)$, pode depender dos valores iniciais da perturbação. $X_k(t)$ permanece próximo do estado de referência, X_{sk} , para valores iniciais da perturbação menores que um dado valor ϵ e, se afasta de X_{sk} para perturbações que ultrapassam esse dado valor. Dizemos, assim, que X_{sk} é localmente estável, porém globalmente instável.

Podemos resumir essa discussão através de um diagrama de estabilidade como mostrado na figura 3.1. O valor do parâmetro Δ é uma medida da distância do equilíbrio. Para cada valor de Δ , o sistema relaxa para um estado estacionário,

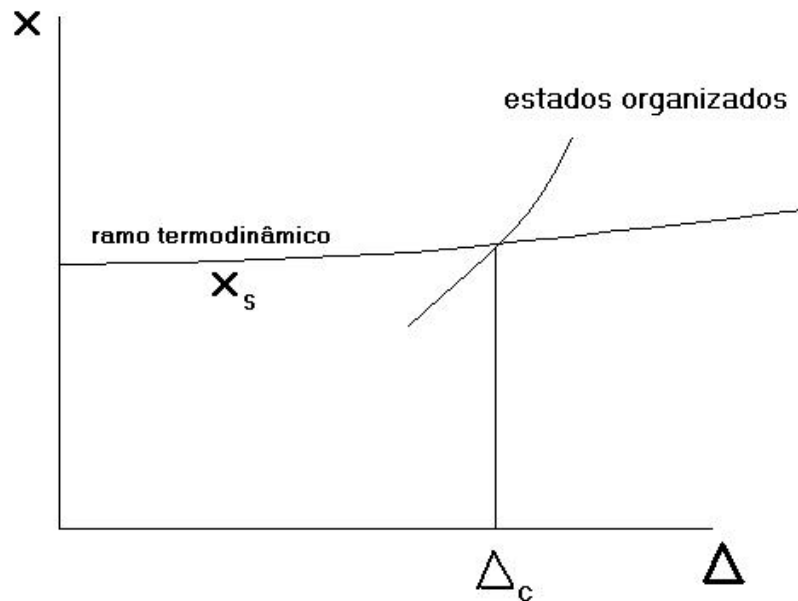


Figura 3.1: Diagrama de estabilidade de um sistema.

denotado por X_s . O estado de equilíbrio corresponde a $\Delta = 0$; X_s é uma extensão contínua do estado de equilíbrio e é chamada de **ramo termodinâmico**. Para $\Delta < \Delta_c$, o ramo termodinâmico é estável, enquanto que para $\Delta > \Delta_c$ o ramo termodinâmico *pode* se tornar instável. Nessa última situação, o sistema faz uma transição para um novo ramo, que, geralmente, pode ser uma estrutura organizada.

3.3 Análise de Estabilidade Linear

Na *teoria de estabilidade de Lyapunov*, fizemos uma perturbação no estado de equilíbrio de um sistema de modo que essa perturbação pudesse representar as flutuações devido às interações do sistema com o meio. Nessa seção, semelhantemente ao desenvolvido na seção sobre a *teoria de estabilidade de Lyapunov*, perturbaremos o estado de referência de um sistema de modo a estudá-lo na presença das instabilidades a que estão sujeitos os sistemas fora do equilíbrio termodinâmico. Essas instabilidades dão origem à uma grande variedade de estruturas. Para determinar em que ponto do sistema o estado estacionário se torna instável, usamos a *análise de estabilidade linear* que é um método matemático bem conhecido e que pode ser

usado quando conhecemos as equações de movimento do sistema.

As propriedades da estabilidade se referem a resposta do sistema aos diversos tipos de perturbações. Imagine um certo estado de referência, X_{s1}, \dots, X_{si} , onde X_i representa o conjunto das variáveis de estado que é acessada pelas flutuações internas ou influências externas. Se tratarmos de sistemas livres de forças externas e sujeitos a um ambiente completamente uniforme e independente do tempo, $\{X_i\}$ representa soluções que naturalmente descreve ausência de auto-organização e de comportamento complexo dentro do sistema.

Muitas das dificuldades da teoria da estabilidade reside na presença de um grande número de variáveis que caracteriza um problema e do fato que muitas dessas variáveis podem ser funções de coordenadas espaciais. Assim, para estabelecer a estabilidade de um estado de referência, usaremos uma notação na qual o conjunto das variáveis será representada por um vetor coluna \mathbf{X} , cujas componentes são X_1, \dots, X_i, \dots . Assim podemos escrever a taxa de mudança de \mathbf{X} da seguinte forma:

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = \mathbf{F}(\mathbf{X}, \lambda) \tag{3.6}$$

onde \mathbf{F} é um operador, geralmente não-linear, que atua no espaço no qual \mathbf{X} está definido e λ representa um conjunto de parâmetros de controle relacionados à evolução.

O estado de referência \mathbf{X}_s que introduzimos acima é uma solução particular da 3.6

$$\frac{\partial \mathbf{X}_s}{\partial t} = \mathbf{F}(\mathbf{X}_s, \lambda) \tag{3.7}$$

Consideramos, agora, uma pequena perturbação \mathbf{x} :

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}_s + \mathbf{x} \tag{3.8}$$

Derivando a 3.8 em relação ao tempo e usando a 3.7, temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{X}_s + \mathbf{x}) &= \frac{\partial \mathbf{X}_s}{\partial t} + \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{X}_s + \mathbf{x}, \lambda) \\ \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \mathbf{F}(\mathbf{X}_s + \mathbf{x}, \lambda) - \mathbf{F}(\mathbf{X}_s, \lambda) \end{aligned} \tag{3.9}$$

Se \mathbf{F} tiver uma estrutura polinomial em \mathbf{X} , é possível expandir o primeiro termo da direita na equação acima em série de Taylor, em torno do estado de

referência \mathbf{X}_s , e obter um número finito de termos. Mesmo em situações mais intrincadas, onde \mathbf{F} não tenha uma estrutura polinomial, nós assumiremos que \mathbf{F} ainda possa ser expandido em potências de \mathbf{x} e que a expansão possa ser truncada numa ordem finita.

Isto nos limita ao estudo da *estabilidade infinitesimal*, onde a resposta do sistema à pequenos distúrbios é $\frac{|\mathbf{x}|}{|\mathbf{X}_s|} \ll 1$. Mesmo assim esse estudo é muito útil, já que a estabilidade infinitesimal nos dá as condições necessárias para a instabilidade, pelo fato que se \mathbf{X}_s é instável para pequenos \mathbf{x} ele será instável para qualquer \mathbf{x} .

Formalmente, a expansão pode ser representada assim:

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}_s + \mathbf{x}, \lambda) = \mathbf{F}(\mathbf{X}_s) + \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{X}} \right)_{\mathbf{X}_s} \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \mathbf{F}}{\partial \mathbf{X}^2} \right)_{\mathbf{X}_s} \cdot \mathbf{x}\mathbf{x} + \dots \quad (3.10)$$

Na análise de estabilidade linear, somente o termo linear em \mathbf{x} é considerado porque os termos de maior ordem são desprezados já que assumimos que \mathbf{x} é pequeno. Como \mathbf{X} é um vetor coluna que representa um conjunto de variáveis, representaremos a 3.9, apenas com o termo linear assim:

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}_s + \mathbf{x}, \lambda) \simeq \mathbf{F}(\mathbf{X}_s) + \left(\sum_j \frac{\partial \mathbf{F}_k}{\partial \mathbf{X}_j} \right)_{\mathbf{X}_s} \cdot \mathbf{x}_j \quad (3.11)$$

Substituindo a 3.11 na 3.9, fica

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \left(\sum_j \frac{\partial \mathbf{F}_k}{\partial \mathbf{X}_j} \right)_{\mathbf{X}_s} \cdot \mathbf{x}_j \quad (3.12)$$

onde o subscripto \mathbf{X}_s indica que a derivada é avaliada no estado estacionário. Fazendo $\mathbf{M}_{kj}(\lambda) = \left(\frac{\partial \mathbf{F}_k}{\partial \mathbf{X}_j} \right)_{\mathbf{X}_s}$, sendo função do parâmetro λ , podemos escrever a 3.12 assim

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{M}\mathbf{x} \quad (3.13)$$

onde o vetor $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ e \mathbf{M}_{kj} são os elementos da matriz \mathbf{M} conhecida como **matriz Jacobiana** e dada por(em duas dimensões):

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \partial \mathbf{F}_k / \partial x_j & \partial \mathbf{F}_k / \partial x_j \\ \partial \mathbf{F}_k / \partial x_j & \partial \mathbf{F}_k / \partial x_j \end{bmatrix} \quad (k, j = 1, 2) \quad (3.14)$$

Em geral, a solução da 3.13 pode ser escrita se os autovalores e os autovetores da matriz \mathbf{M} são conhecidos. Façamos ω_k serem os autovalores e Ψ_k os correspondentes autovetores

$$\mathbf{M}\Psi_k = \omega_k \Psi_k \quad (3.15)$$

A solução dessa equação é

$$\mathbf{x} = e^{\omega_k t} \Psi_k \quad (3.16)$$

Já que uma combinação de soluções de uma equação linear é também uma solução, a solução geral da 3.13 é

$$\mathbf{x} = \sum_k c_k e^{\omega_k t} \Psi_k \quad (3.17)$$

na qual os coeficientes c_k são determinados por \mathbf{x} em $t = 0$.

A questão da estabilidade do estado de referência está relacionada com os autovalores de \mathbf{M} , ou seja, as raízes da equação $|\mathbf{M} - \omega_k \mathbf{I}| = 0$. Assim os autovalores ω_k determinarão o tipo de estabilidade desses estados e podemos sintetizar as possibilidades assim:

(i) Se um ou mais autovalores tiver uma parte real positiva, as soluções associadas da 3.16 crescerão exponencialmente. Os autovetores correspondentes são chamados **modos instáveis**.

(ii) Se todos os autovalores têm parte real negativa, qualquer pequena perturbação \mathbf{x} na vizinhança da solução estacionária decairá exponencialmente. (Isto não é válido para grandes perturbações já que, nesse caso, a aproximação 3.12 não é válida.)

Da análise dessas possibilidades concluímos que a condição necessária e suficiente para a estabilidade de um estado estacionário é que todos os autovalores da matrix Jacobiana associada, \mathbf{M} , tenham parte real negativa. Um único autovalor com parte real positiva implica em instabilidade no modo correspondente.

Porém, o crescimento exponencial da perturbação é limitado pelos efeitos não-lineares e as imperfeições do próprio sistema que o fazem passar por uma transição de um estado instável para um estado estável. Assim, a instabilidade presente pode levar um sistema para um estado, que em alguns casos, apresenta-se organizado, com baixa entropia.

A análise de estabilidade linear não fornece um meio de determinar como o sistema evoluirá quando ele se torna instável. Sua importância consiste em mostrar que

uma mudança qualitativa no comportamento do sistema se dá para um valor crítico de um dado parâmetro de controle. Para entender o comportamento do sistema inteiramente, a equação não-linear completa deve ser considerada. Frequentemente, encontramos equações não-lineares para as quais soluções não podem ser obtidas analiticamente. Contudo, com a disponibilidade de poderosos computadores e programas, soluções numéricas podem ser alcançadas, mesmo com alguma dificuldade.

3.4 Teoria de Bifurcação

Já mostramos nas seções anteriores, que a estabilidade do ramo termodinâmico não é assegurada por muito tempo quando um sistema é dirigido para muito distante do equilíbrio. Uma maneira de entender o comportamento de um sistema seria usar suas características específicas, tratando diretamente as equações hidrodinâmicas ou as reações químicas envolvidas. Mesmo quando possível, isto é extremamente difícil, devido ao excesso e a imprecisão no conhecimento das variáveis presentes nessas equações. No entanto, a perda de estabilidade de um estado no não-equilíbrio pode ser analisada usando a *teoria de bifurcação*. Na seção sobre a *teoria de estabilidade linear*, vimos que foi preciso manter apenas o termo não-linear na expansão. A *teoria de bifurcação*, no entanto, consiste em analisar a estabilidade das soluções de uma equação diferencial não-linear. Em sistemas fora do equilíbrio, a perda de estabilidade e a transição para novos estados pode ser pensada como função de um parâmetro de controle, λ , que é característico do sistema. Exemplos são a frequência natural de oscilação em um pêndulo e a temperatura ou a vazão de um fluido. Quando esse parâmetro alcança um valor particular de não equilíbrio, o ramo termodinâmico se torna instável e surgem novas soluções para o sistema.

Na teoria de bifurcação, o estado do sistema pode ser especificado por X_k , $k = 1, 2, \dots, n$ que em geral podem ser funções da posição \mathbf{r} e do tempo t . Seja a evolução espaço-temporal do sistema dada por

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} = F_k(X_i, \lambda) \tag{3.18}$$

onde λ é o parâmetro de controle no não-equilíbrio. Assim, as soluções agora dependem tanto do tempo quanto de λ . Para um sistema não-homogêneo, que é mais geral, F_k pode representar uma matriz jacobiana como a 3.14 e tanto ela quanto seus autovetores e autovalores dependerão também de λ .

Estabeleceremos a teoria de bifurcação fazendo X_{sk} ser uma solução estacionária da 3.18. A estabilidade desse estado pode ser analisado considerando uma pequena perturbação δ_k em sua solução estacionária. Variando-se o valor de λ , as características das soluções estacionárias também podem mudar. Em geral, quando λ é menor que um "valor crítico", λ_c , a perturbação δ_k decai exponencialmente, e então o estado estacionário é estável. Porém, se λ excede λ_c , pode acontecer que a perturbação cresça exponencialmente, fazendo o estado X_{sk} se tornar instável. É precisamente em λ_c , onde novas soluções para 3.18 aparecem, que o sistema perde a estabilidade e dizemos que ocorreu a *bifurcação* e então λ_c é chamado de *ponto de bifurcação*. Em sua vizinhança, as novas soluções muitas vezes tomam a forma:

$$X_k(\mathbf{r}, t; \lambda) = X_{sk}(\lambda_c) + \alpha_k \Psi_k(\mathbf{r}, t) \tag{3.19}$$

na qual α_k são um conjunto de "amplitudes" determináveis e $\Psi_k(r, t)$ são funções obtidas de F_k em 3.18 de modo semelhante ao feito na seção anterior.

Assim, a teoria de bifurcação fornece um meio de obter a evolução temporal das soluções estacionárias através de um conjunto de equações do tipo

$$\frac{d\alpha_k}{dt} = G(\alpha_k, \lambda) \tag{3.20}$$

que são chamadas de **equações de bifurcação**. A quantidade de soluções para a 3.20 corresponde às múltiplas soluções para a equação original 3.18.

3.4.1 Equação de Landau-Ginzburg

Como exemplo para desenvolver a teoria de bifurcação, trataremos uma equação de amplitude muito conhecida, usada em nosso trabalho, que é a equação de Landau-Ginzburg. Ela é do tipo

$$\frac{\partial A_k}{\partial t} = \omega(k)A_k - \sigma(k)A_k^3 \tag{3.21}$$

Na equação acima, A_k representa α e ω é o parâmetro λ da 3.20. A solução da 3.21 é

$$A_k = \left[\frac{\sigma(k)}{\omega(k)} + \left(\frac{1}{A_o^2} - \frac{\sigma(k)}{\omega(k)} \right) e^{-2\omega(k)t} \right]^{-1/2} \tag{3.22}$$

Na qual $\omega(k)$ representa uma taxa de crescimento da amplitude e $\sigma(k)$, que é o coeficiente que acompanha o termo cúbico na equação, devido ao tipo de bifurcação

que ocorre em nosso experimento, assume valor positivo. Nosso objetivo é estudar a solução estacionária dessa equação como função do parâmetro de controle, $\omega(k)$. Os estados estacionários desta equação diferencial são

$$\begin{aligned} A_k &= 0 \\ A_k &= \pm\sqrt{\frac{\omega}{\sigma}} \end{aligned} \tag{3.23}$$

Assumimos, por ora, que estamos olhando somente para soluções reais da 3.21. Quando $\omega(k) < 0$, existe somente uma solução real, mas quando $\omega(k) > 0$, existem três soluções, como mostrado na Fig.3.2. As novas soluções para $\omega(k) > 0$ se ramificam à partir de $A_k = 0$, e o valor de $\omega_c(k)$ no qual essas novas soluções se originam é chamado de **ponto de bifurcação**. Na Fig.3.2, $\omega_c(k) = 0$ é o ponto de bifurcação. Este tipo de bifurcação ocorre com frequência em equações não-lineares, seja uma simples equação como acima, um conjunto de equações diferenciais ordinárias acopladas ou equações diferenciais parciais mais complicadas. Mesmo que uma equação dependa suavemente do parâmetro $\omega(k)$, nas vizinhanças do ponto de bifurcação, as soluções não podem ser expandidas em uma série de potências desse parâmetro, pois elas dependem dele de um modo não analítico e isso é consequência da mudança qualitativa do comportamento do sistema introduzida pelo fenômeno da bifurcação.

Voltando à questão da estabilidade, mostraremos agora que a solução $A_k = 0$ se torna instável no ponto onde as novas soluções $A_k = \pm\sqrt{\frac{\omega}{\sigma}}$ surgem. Já vimos que uma solução estacionária A_{sk} é localmente estável se uma pequena perturbação $\delta(t)$ existente na solução decai para um estado estacionário. Portanto, precisamos fazer a evolução temporal de $A_k = A_{sk} + \delta(t)$ para determinar se A_{sk} é estável ou não. Substituindo $A_k = A_{sk} + \delta(t)$ na equação 3.21, e mantendo somente termos de primeira ordem em $\delta(t)$, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{dA_{sk}}{dt} + \frac{d\delta}{dt} &= -\sigma(k)(A_{sk} + \delta(t))^3 + \omega(k)(A_{sk} + \delta(t)) \\ \frac{d\delta}{dt} &= -3\sigma(k)A_{sk}^2\delta(t) + \omega(k)\delta(t) \end{aligned} \tag{3.24}$$

Para o estado estacionário $A_{sk} = 0$, vemos que a solução é estável se $\omega(k) < 0$, porque $\delta(t)$ decai exponencialmente. Por outro lado, se $\omega(k) > 0$, a solução é localmente instável, já que $\delta(t)$ cresce exponencialmente. Ao mesmo tempo, se

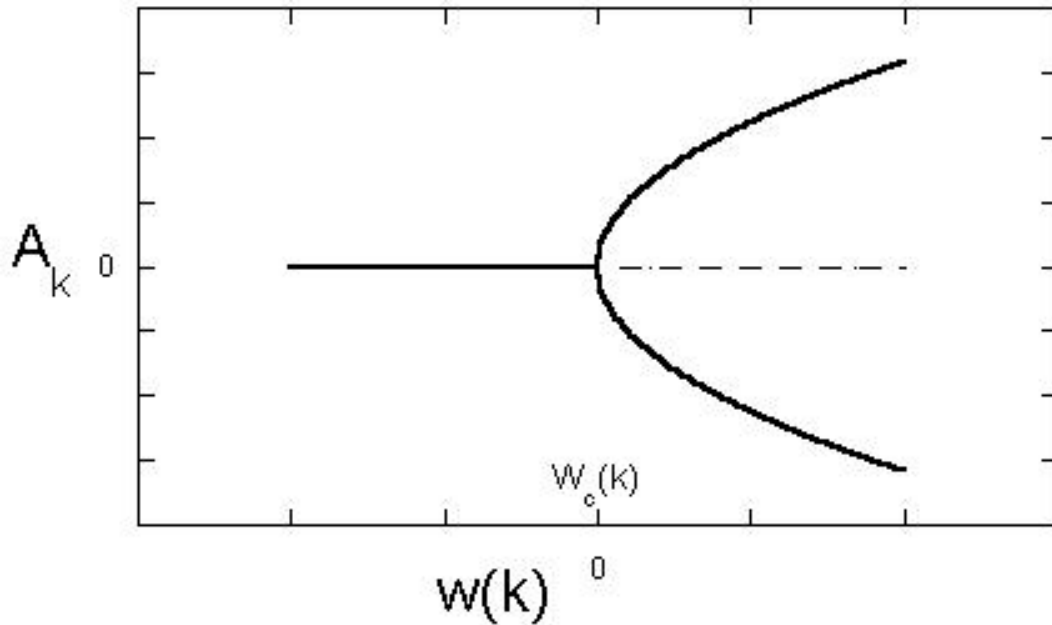


Figura 3.2: Bifurcação das soluções A_k como função do parâmetro $\omega(k)$. A linha pontilhada representa a solução que é instável.

usarmos a equação 3.24 para analisar a estabilidade dos estados estacionários $A_{sk} = \pm\sqrt{\frac{\varepsilon}{\sigma}}$, vemos que eles são estáveis. Essas propriedades de estabilidade de estados estacionários significam que, quando $\delta(t)$ se desloca de um valor menor que zero para um valor maior que zero, a solução $A_k = 0$ se torna instável e o sistema faz uma transição para uma das duas novas soluções que bifurcam em $\omega(k) = 0$. Mas, para qual desses dois possíveis estados o sistema evoluirá não é determinístico; isto depende das flutuações aleatórias no sistema. A perda de estabilidade implica que uma flutuação aumenta e dirige o sistema para um dos dois estados, $A_{sk} = +\sqrt{\frac{\varepsilon}{\sigma}}$ ou $A_{sk} = -\sqrt{\frac{\varepsilon}{\sigma}}$. A bifurcação para novas soluções no exato ponto onde uma solução perde estabilidade não é coincidência, ela é uma propriedade geral das soluções de equações não-lineares.

O sistema que estudamos obedece a equação de Landau-Ginzburg para o crescimento da amplitude depois da bifurcação. Estamos interessados nos valores positivos para $\omega(k)$, admitindo a solução não trivial $A_{sk} = +\sqrt{\frac{\varepsilon}{\sigma}}$, que é assintoticamente estável, enquanto que o ponto fixo $A_{sk} = 0$ é instável. $\omega(k) = 0$ é um ponto

dessa bifurcação conhecida como bifurcação supercrítica.

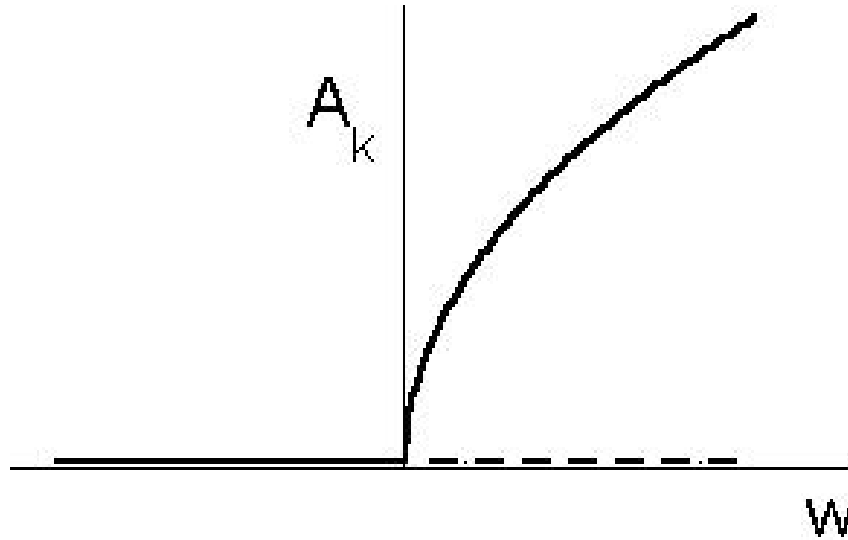


Figura 3.3: a) Bifurcação supercrítica ilustrada para a equação de Landau-Ginzburg.

Este tipo de bifurcação é um fenômeno dinâmico na qual a amplitude da solução cresce suavemente de zero quando o parâmetro $\omega(k)$ se afasta de seu ponto de bifurcação, como visto na Fig.3.3. A amplitude da instabilidade é intrínseca ao sistema e ela depende somente dos valores de $\omega(k)$, que são inerentes à equação de evolução. Isto é marcadamente diferente de sistemas conservativos, onde as características das soluções dependem das condições iniciais.

Capítulo 4

Instabilidade do Impressor

4.1 A Equação de Movimento de um Fluido Viscoso

Como nesse trabalho trataremos de fluido em movimento, faremos uso de duas das equações fundamentais da dinâmica de fluidos. Usaremos a equação que expressa a conservação da matéria:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (4.1)$$

que é conhecida como *equação da continuidade*.

A outra equação leva em conta a dissipação de energia que ocorre durante o movimento do fluido e que se deve, particularmente, às fricções internas (viscosidade). A forma mais geral de uma equação de movimento para um fluido viscoso é, (cf.[19]),

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right] = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} + \left(\zeta + \frac{1}{3} \mu \right) \nabla \nabla \cdot \vec{v} \quad (4.2)$$

onde ρ é a densidade do fluido e μ e ζ são coeficientes de viscosidade.

Se a condição de incompressibilidade for satisfeita, ou seja, se a velocidade de escoamento do fluido, num fluxo estacionário, for pequena em relação à velocidade do som nesse mesmo fluido, $v_{escoamento} \ll v_{som}$, a Eq.4.1 se torna

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (4.3)$$

Levando em conta esse resultado, podemos modificar a Eq.4.2, já que seu último termo à direita é zero. Portanto, a equação de movimento de um fluido viscoso

incompressível é

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \right] = -\vec{\nabla} p + \mu \nabla^2 \vec{v} \quad (4.4)$$

Essa equação é chamada de *equação de Navier-Stokes*.

Estamos interessados no regime estacionário, assim a derivada temporal se anula, ficando

$$\rho \left[(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \right] = -\vec{\nabla} p + \mu \nabla^2 \vec{v} \quad (4.5)$$

Os fluidos podem ser caracterizados por um parâmetro adimensional, chamado *número de Reynolds* que é dado por:

$$R = \frac{\rho v L}{\mu} = \frac{v L}{\nu} \quad (4.6)$$

onde L é um comprimento característico do sistema, v é a velocidade e $\nu \equiv (\mu/\rho)$ é a viscosidade cinemática. A razão entre o termo não-linear, $\rho(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}$ que é da ordem de $(\rho v^2/L)$, e o termo viscoso, $\mu \nabla^2 \vec{v}$, que é da ordem de $(\mu v/L^2)$, nos dá o *número de Reynolds*. Como em nossos experimentos o *número de Reynolds* é muito pequeno, podemos desprezar o termo não-linear na Eq.4.5 e ficamos com

$$\vec{\nabla} p = \mu \nabla^2 \vec{v} \quad (4.7)$$

Em nosso trabalho, estamos interessados na dinâmica da interface, que na Fig.4.1, está situada no lado direito.

4.2 Estado Estacionário de um Fluxo Laminar

Neste trabalho, seguiremos o artigo de Hakim et al [6] no qual foi considerada a aproximação de lubrificação para o fluxo de óleo. Assim podemos supor que o gradiente de pressão localiza-se no plano (x, y) , ou seja, $p(x, y)$. Então, a Eq. 4.7, fica

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial x} &= \mu \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \\ \frac{\partial p}{\partial y} &= \mu \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Como as condições de fronteira são:

$$\begin{aligned} \vec{v}(z=0) &= 0 \\ \vec{v}(z=h) &= V_o \hat{i} \end{aligned} \quad (4.9)$$

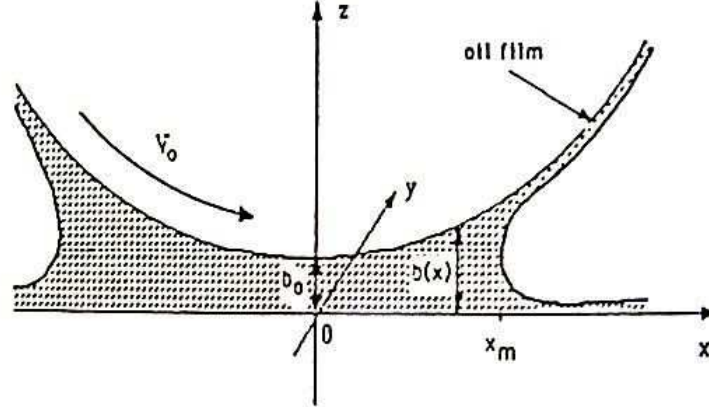


Figura 4.1: Diagrama das condições de contorno usadas na análise do fluxo. (Figura extraída de [6]).

Para um gradiente de pressão constante, a solução das 4.8, é

$$\vec{v} = \left(az + \frac{b}{2}z^2 \right) \hat{i} + \left(cz + \frac{d}{2}z^2 \right) \hat{j} \quad (4.10)$$

Derivando a expressão acima e substituindo na 4.8, fica

$$\mu (b\hat{i} + d\hat{j}) = \frac{\partial p}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial p}{\partial y} \hat{j} \quad (4.11)$$

O que nos fornece

$$\begin{aligned} b &= \frac{1}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \\ d &= \frac{1}{\mu} \frac{\partial p}{\partial y} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Em $z = h$, ficamos com

$$\vec{v} = \left(ah + \frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} h^2 \right) \hat{i} + \left(ch + \frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial y} h^2 \right) \hat{j} = V_o \hat{i} \quad (4.13)$$

O que implica que

$$\begin{aligned} a &= \left(\frac{V_o}{h} - \frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} h \right) \\ c &= \left(-\frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial y} h \right) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Como h é função de x , iremos definir $h \equiv b(x)$, e assim chegamos a

$$\vec{v}(x, z) = z \left(\frac{V_o}{b(x)} \hat{i} + \frac{z - b(x)}{2\mu} \nabla_h p \right) \quad (4.15)$$

onde $\nabla_h p$ representa o gradiente da pressão no plano (x, y) . Para obtermos a velocidade média local do fluido, integramos em z e dividimos por $b(x)$. Assim:

$$\begin{aligned} \vec{v}(x) &= \frac{1}{b(x)} \int_0^{b(x)} \left(\frac{V_o}{b(x)} \hat{i} + \frac{z - b(x)}{2\mu} \nabla_h p \right) z dz \\ &= \frac{1}{b(x)} \left(\frac{V_o}{2b(x)} z^2 \Big|_0^{b(x)} \hat{i} + \frac{z^3}{6\mu} \nabla_h p \Big|_0^{b(x)} - \frac{b(x)}{4\mu} z^2 \nabla_h p \Big|_0^{b(x)} \right) \Rightarrow \\ \vec{v}(x) &= \frac{V_o}{2} \hat{i} - \frac{b^2(x)}{12\mu} \nabla_h p \end{aligned} \quad (4.16)$$

A Eq.4.3 será modificada para levar em conta a velocidade média do fluido e a recomposição do fluxo. Assim ela se torna:

$$\nabla \cdot [b(x) \vec{v}(x)] = 0 \quad (4.17)$$

Vamos determinar o fluxo através do espaço entre o plano e o cilindro. Chamando esse fluxo na direção x de Q , temos:

$$\begin{aligned} Q &= \int_0^{b(x)} \vec{v}(x) \cdot \hat{i} dz \\ &= \int_0^{b(x)} \left(\frac{V_o}{2} - \frac{b^2(x)}{12\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \right) dz \Rightarrow \\ Q &= \frac{V_o b(x)}{2} - \frac{b^3(x)}{12\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Assim, encontramos uma expressão para a distribuição de pressão entre o cilindro que gira imerso num fluido e a placa, desprezando a influência do menisco em função do fluxo constante através desse espaço

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{6\mu V_o}{b^2(x)} - \frac{12\mu Q}{b^3(x)} \quad (4.19)$$

Para resolver esta equação diferencial, consideraremos o perfil do cilindro como uma parábola, já que estamos lidando com valores pequenos de x . Então, fazendo

$b(x) \simeq x^2/2R + b_o$, onde R é o raio do cilindro, e introduzindo $x = (2Rb_o)^{1/2} \tan \theta$, a expressão para $p(x, Q)$ fica:

$$p(x, Q) - p_o = \frac{12\mu V_o R^2}{(2Rb_o)^{3/2}} \left[\left(\theta(x) + \frac{\pi}{2} \right) + \frac{1}{2} \sin(2\theta) \right] - \frac{48\mu Q R^3}{(2Rb_o)^{5/2}} \left[\frac{3}{4} \left(\theta(x) + \frac{\pi}{2} \right) + \frac{1}{2} \sin(2\theta) + \frac{1}{16} \sin(4\theta) \right] \quad (4.20)$$

onde p_o é a pressão atmosférica em $x = -\infty$. Como a pressão na saída é a pressão atmosférica, teremos $p(\infty) = p_o$, sendo que $x \rightarrow \infty \Rightarrow \theta \rightarrow \pi/2$, e essas condições na 4.20 determinam o fluxo Q :

$$Q = \frac{2}{3} b_o V_o \quad (4.21)$$

4.3 Interface Plana

Uma expressão para a posição da interface plana pode ser obtida usando conservação do fluxo: O fluxo de óleo que passa entre o cilindro e a placa, Q_{en} , deve ser igual ao fluxo de óleo, Q_{ex} , que sai pela película que reveste o cilindro. Este fluxo é igual à velocidade do cilindro multiplicada pela espessura do filme de óleo que recobre o cilindro

$$Q_{ex} = V_o b(x_m) F(Ca) \quad (4.22)$$

onde $b(x_m)$ é a medida da altura no início do menisco, x_m é uma posição estável para a interface plana. $F(Ca)$ é uma função empírica que deve ter um valor menor que 1 para que se mantenha a conservação do fluxo, e é dada, de acordo com Tabeling et al[20], por

$$F(Ca) = a \left[1 - \exp \left(-b \left(\frac{\mu V_o}{T} \right)^c \right) \right] \quad (4.23)$$

onde $Ca \equiv \frac{\mu V_o}{T}$ é o número de capilaridade e T a tensão superficial entre o óleo e o ar. Como não fizemos medidas da espessura do filme de óleo, obteremos os valores para os parâmetros a, b e c através de ajuste dos nossos dados experimentais.

Para obtermos Q_{en} , precisamos considerar o menisco. Para baixas velocidades, $Ca \ll 1$, a queda de pressão devido à tensão superficial na interface é dada aproximadamente pelo seu valor estático:

$$p(x_m) = p_o - T \left(\frac{2}{b(x_m)} + \frac{1}{\rho} \right) \quad (4.24)$$

onde ρ é o raio de curvatura do menisco no plano horizontal (xy). Para interface plana o termo $1/\rho$ vale zero.

Aplicando a conservação do fluxo usando $Q_{en} = Q_{ex}$ com Q_{ex} dada pela 4.22, e igualando a equação 4.24, com $\rho \rightarrow \infty$, à 4.20, teremos um sistema de equações, (4.25), que resolvido nos permite obter uma expressão para a posição da interface plana:

$$\begin{aligned} Q_{en} &= V_o b(x_m) F(Ca) \\ p(x_m, Q_{en}) &= p_o - T \left(\frac{2}{b(x_m)} \right) \end{aligned} \quad (4.25)$$

Vamos expressar Q_{en} com $\alpha b_o V_o$ e usar a dependência em θ para a pressão.

$$\alpha b_o V_o = V_o b(x_m) F(Ca)$$

Usando $b(x_m) = b_o \left(1 + \frac{x_m^2}{2Rb_o} \right)$ e sabendo que $\frac{x_m^2}{2Rb_o} = \tan^2 \theta$, temos

$$b(x_m) = b_o (1 + \tan^2 \theta) = \frac{b_o}{\cos^2 \theta} \quad (4.26)$$

Então, teremos:

$$\begin{aligned} \alpha b_o V_o &= V_o \frac{b_o}{\cos^2 \theta} F(Ca) \\ \alpha &= \frac{1}{\cos^2 \theta} F(Ca) \end{aligned} \quad (4.27)$$

Para a pressão, temos:

$$\begin{aligned} T \left(\frac{2}{b(x_m)} \right) &= \frac{12\mu V_o R^2}{(2Rb_o)^{3/2}} \left[\left(\theta_m + \frac{\pi}{2} \right) + \frac{1}{2} \sin(2\theta_m) \right] \\ &- \frac{48\mu Q R^3}{(2Rb_o)^{5/2}} \left[\frac{3}{4} \left(\theta_m + \frac{\pi}{2} \right) + \frac{1}{2} \sin(2\theta_m) + \frac{1}{16} \sin(4\theta_m) \right] \end{aligned} \quad (4.28)$$

Substituindo acima, a expressão para $b(x_m)$ obtida na Eq. 4.26, chegamos a

$$\begin{aligned} \frac{T}{6\mu V_o} \sqrt{\frac{2b_o}{R}} &= \frac{1}{\cos^2(\theta_m)} \left[2\alpha \left[\frac{3}{4} \left(\theta_m + \frac{\pi}{2} \right) + \frac{1}{2} \sin(2\theta_m) + \frac{1}{16} \sin(4\theta_m) \right] \right] \\ &- \left[\left(\theta_m + \frac{\pi}{2} \right) + \frac{1}{2} \sin(2\theta_m) \right] \end{aligned} \quad (4.29)$$

Obtemos em nossos experimentos, valores típicos para o termo $\frac{T}{6\mu V_o} \sqrt{\frac{2b_o}{R}}$ da ordem de 10^{-2} , o que implica que $\theta_m \ll \pi$ e isso leva α a se aproximar de $2/3$ quando

usamos a Eq. 4.29. Este resultado já havia sido obtido na 4.21, o que demonstra que o fluxo é aproximadamente o mesmo com ou sem o menisco. Hakim et al [6] mostraram com seus resultados experimentais que, usando uma função empírica $F(Ca)$, onde seus parâmetros valem, $a = 0.12, b = 8.6$ e $c = 2/3$, a posição da interface se ajusta bem com a previsão dessa teoria. Nossos dados experimentais também se ajustaram bem quando usando os mesmos valores para os parâmetros, porém, preferimos fazer um ajuste para obter novos valores desses parâmetros que se adequassem ao tipo de fluxo existente em nosso experimento que consiste de um cilindro e um plano e não um fluxo existente entre dois cilindros como aquele para o qual os valores acima foram obtidos.

4.4 Análise Linear na Instabilidade

Com as equações da seção anterior, fomos capazes de descrever a posição da interface plana, que no regime estacionário, é um estado estável de nosso sistema. Para que a dinâmica seja completada, precisamos de uma equação de movimento para a interface que é usualmente dada pela conservação do fluxo.

$$u_n b(x_m) \left[1 - F\left(\frac{\mu V_o}{T}\right) \right] = b(x_m) \left[\hat{n} \cdot \vec{v}(r_m) - V_o F\left(\frac{\mu V_o}{T}\right) \right] \quad (4.30)$$

onde u_n é a velocidade normal da interface no ponto r_m . Essa equação iguala o fluxo de matéria através do movimento da interface e do fluido, subtraindo o fluxo de matéria que sai pela película de fluido que recobre o cilindro.

Para estudarmos o surgimento de instabilidades na interface, devemos perturbar a sua posição $x(y)$ e a pressão, o que nos permitirá fazer uma análise linear. Assim a posição fica:

$$\begin{aligned} x(y) &= [x_m + \epsilon(t) \sin(ky)] \rightarrow \\ \mathbf{r} &= [x_m + \epsilon(t) \sin(ky)] \hat{i} + y \hat{j} \end{aligned} \quad (4.31)$$

E o campo de pressão fica com a forma:

$$p(r) = [p^0(x) + \eta(t) q_k(x) \sin(ky)] \quad (4.32)$$

onde $p^0(x)$ é o campo de pressão determinado pela Eq.4.20.

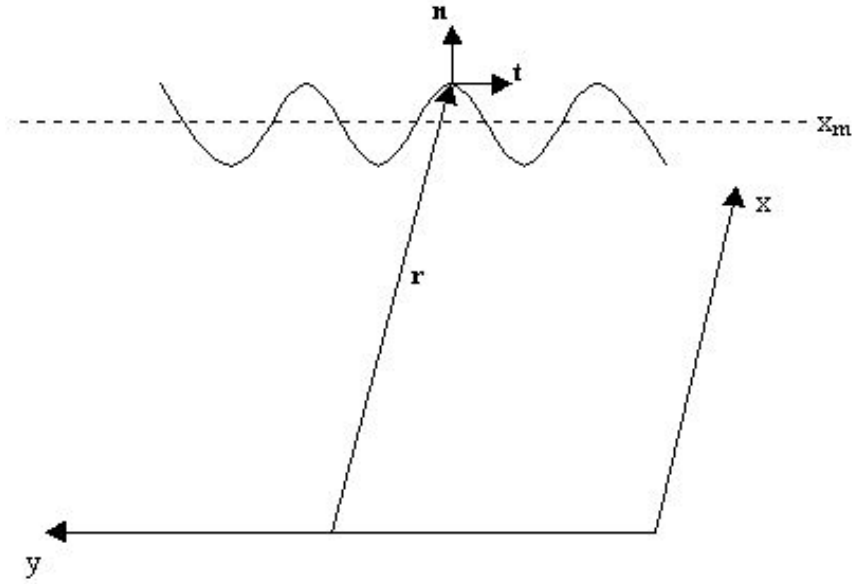


Figura 4.2: Geometria usada para descrever a perturbação na interface plana

A Fig.4.2, nos mostra a geometria do problema que estamos tratando, onde \mathbf{n} é o vetor unitário normal à interface, \mathbf{t} é o vetor unitário tangencial e \mathbf{r} é o vetor que localiza um ponto r na interface. Assim, temos

$$\mathbf{r} = x(y)\hat{i} + y\hat{j} \quad (4.33)$$

$$d\mathbf{r} = x'\hat{i} + \hat{j} \quad (4.34)$$

$$\mathbf{t} = \frac{1}{|d\mathbf{r}/dy|} \frac{d\mathbf{r}}{dy} = \frac{x'\hat{i} + \hat{j}}{[x'^2 + 1]^{1/2}} \quad (4.35)$$

Então, a normal é obtida de:

$$\begin{cases} \mathbf{n} \cdot \mathbf{t} = 0 \\ \mathbf{n}^2 = 1 \end{cases}$$

Assim

$$\mathbf{n} = \frac{\hat{i} - x'\hat{j}}{[x'^2 + 1]^{1/2}} \quad (4.36)$$

Pela Eq.4.17, temos:

$$\nabla b(x) \cdot \vec{v} + b(x) \cdot \nabla \vec{v} = 0 \quad (4.37)$$

Substituindo na Eq.4.37, a velocidade dada pela Eq.4.16 e a pressão perturbada dada pela Eq.4.32, ficamos com:

$$b' \cdot \left[\frac{V_o \hat{i}}{2} - \frac{b^2}{12\mu} \nabla_h [p^0 + \Phi] \right] + b \nabla \left[\frac{V_o \hat{i}}{2} - \frac{b^2}{12\mu} \nabla_h [p^0 + \Phi] \right] = 0 \quad (4.38)$$

onde omitimos a dependência em x para $b(x)$ e usamos a seguinte notação para não carregar muito o desenvolvimento:

$$\nabla b(x) = \frac{\partial b(x)}{\partial x} \equiv b'$$

$$\Phi \equiv \eta(t) q_k(x) \sin(ky)$$

Assim a Eq.4.38 pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} b' \frac{V_o}{2} - \frac{b'b^2}{12\mu} \partial_x [p^0 + \Phi] - \frac{b^3}{12\mu} (\partial_x^2 + \partial_y^2) [p^0 + \Phi] - \frac{b'2b^2}{12\mu} \partial_x [p^0 + \Phi] = 0 \\ \left(b' \frac{V_o}{2} - \frac{b'b^2}{4\mu} \partial_x p^0 - \frac{b^3}{12\mu} \partial_x^2 p^0 \right) - \left(\frac{b'b^2}{4\mu} \partial_x \Phi + \frac{b^3}{12\mu} (\partial_x^2 + \partial_y^2) \Phi \right) = 0 \end{aligned} \quad (4.39)$$

onde usamos $\frac{\partial}{\partial k} \equiv \partial_k$. A expressão no primeiro parantêses é identicamente nula, logo, temos:

$$\begin{aligned} \frac{b'b^2}{4\mu} \partial_x \Phi + \frac{b^3}{12\mu} (\partial_x^2 + \partial_y^2) \Phi = 0 \\ 3b' \partial_x \Phi + b(\partial_x^2 + \partial_y^2) \Phi = 0 \end{aligned} \quad (4.40)$$

Como $\Phi = \eta(t) q_k(x) \sin(ky)$, temos

$$\partial_x \Phi = \eta(t) \partial_x q_k(x) \sin(ky)$$

$$\partial_x^2 \Phi = \eta(t) \partial_x^2 q_k(x) \sin(ky)$$

$$\partial_y^2 \Phi = -\eta(t) q_k(x) k^2 \sin(ky)$$

Assim, chegamos a

$$\frac{d^2 q_k}{dx^2} + \frac{3}{b} \frac{db}{dx} \frac{dq_k}{dx} - k^2 q_k = 0 \quad (4.41)$$

Agora, usaremos a perturbação na posição na condição de contorno 4.24 e substituiremos o valor da curvatura até ordem ϵ

$$\frac{1}{\rho} \approx -k^2 \epsilon(t) \sin(ky)$$

$$p(x_m + \epsilon(t) \sin(ky)) = p_o - T \left(\frac{2}{b(x_m + \epsilon(t) \sin(ky))} - k^2 \epsilon(t) \sin(ky) \right) \quad (4.42)$$

Usando a perturbação $p(r) = p^0 + \Phi$, e expandindo até termos de primeira ordem em ϵ e η , temos:

$$\begin{aligned} (p^0(x_m + \epsilon(t) \sin(ky)) + \Phi(x_m + \epsilon(t) \sin(ky))) &= p^0(x_m) + \Phi(x_m) \\ &+ \left[\frac{dp^0}{dx_m} \right] \epsilon(t) \sin(ky) \\ &+ O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (4.43)$$

Já o termo b^{-1} da Eq.4.42, expandido, fica:

$$\begin{aligned} \frac{1}{b(x_m + \epsilon(t) \sin(ky))} &= \frac{1}{b(x_m)} \left[\frac{1}{1 + \frac{\epsilon(t) \sin(ky)}{b(x_m)} \frac{db}{dx_m} + O(\epsilon^2)} \right] \\ &= \frac{1}{b(x_m)} - \frac{\epsilon(t) \sin(ky)}{b^2(x_m)} \frac{db}{dx_m} + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (4.44)$$

Finalmente, chegamos a

$$\begin{aligned} p^0(x_m) + \Phi(x_m) + \epsilon(t) \sin(ky) \frac{dp^0}{dx_m} &= p_o(x_m) \\ &- T \left[\frac{2}{b(x_m)} - \frac{2\epsilon(t) \sin(ky)}{b^2(x_m)} \frac{db}{dx_m} - k^2 \epsilon(t) \sin(ky) \right] \Rightarrow \\ \eta(t) q_k(x_m) &= \epsilon(t) \left[-\frac{dp^0}{dx_m} + \frac{2T}{b^2(x_m)} \frac{db}{dx_m} + T k^2 \right] \end{aligned} \quad (4.45)$$

Usando a equação de conservação do fluxo 4.30, determinaremos a dependência temporal de nosso sistema. Derivando a Eq.4.31 em relação ao tempo, e fazendo o produto com a normal, que é dada pela Eq.4.36, obtemos

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}} &= [\dot{\epsilon}(t) \sin(ky)] \hat{i} \\ u_n = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{n} &= \frac{\dot{\epsilon}(t) \sin(ky)}{[1 + k^2 \epsilon^2 \cos^2(ky)]^{1/2}} \\ u_n &= \dot{\epsilon}(t) \sin(ky) + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (4.46)$$

A Eq.4.16 com a perturbação na posição e na pressão, fica

$$\vec{v}(x) = \frac{V_o \hat{i}}{2} - \frac{b^2(x_m + \epsilon(t) \sin(ky))}{12\mu} \nabla_h [p^0(x_m + \epsilon(t) \sin(ky)) + \eta(t) q_k(x_m + \epsilon(t) \sin(ky)) \sin(ky)] \quad (4.47)$$

Expandindo os termos

$$b^2(x_m + \epsilon(t) \sin(ky))$$

e

$$\nabla_h [p^0(x_m + \epsilon(t) \sin(ky)) + \eta(t)q_k(x_m + \epsilon(t) \sin(ky)) \sin(ky)]$$

e mantendo até ordem ϵ e η , ficamos com:

$$\begin{aligned} \vec{v}(x) &= \left[\frac{V_o}{2} - \frac{b^2(x_m)}{12\mu} \partial_x p^0(x_m) \right] \hat{i} \\ &- \frac{b^2(x_m)}{12\mu} [\epsilon \partial_x p^0(x_m) + \eta(t) \partial_x q_k(x_m)] \sin(ky) \hat{i} \\ &- \frac{b(x_m)}{6\mu} [\epsilon b'(x_m) \partial_x p^0(x_m)] \sin(ky) \hat{i} \\ &- \frac{b^2(x_m)}{12\mu} [\eta(t) k q_k(x_m)] \cos(ky) \hat{j} \end{aligned} \quad (4.48)$$

Tomando o produto com a normal, temos:

$$\begin{aligned} \vec{v}(x) \cdot \hat{n} &= v(x_m) \\ &- \frac{b^2(x_m)}{12\mu} [\epsilon \partial_x^2 p^0(x_m) + \eta(t) \partial_x q_k(x_m)] \sin(ky) \\ &- \frac{b(x_m)}{6\mu} [\epsilon b'(x_m) \partial_x p^0(x_m)] \sin(ky) \end{aligned} \quad (4.49)$$

onde

$$v(x_m) = \frac{V_o}{2} - \frac{b^2(x_m)}{12\mu} \partial_x p^0(x_m)$$

O termo $\cos(ky)$ após o produto com a normal fica da ordem $\epsilon\eta$, portanto é desprezado. Da Eq.4.25, obtemos o seguinte resultado

$$\frac{Q_{en}}{b(x_m)} = v(x_m) = V_o F(Ca) \quad (4.50)$$

Substituindo os resultados obtidos nas Eqs.4.46, 4.49 e 4.50 na equação de conservação de fluido 4.30

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}(t)[1 - F(Ca)] &= - \frac{b^2(x_m)}{12\mu} [\epsilon \partial_x^2 p^0(x_m) + \eta(t) \partial_x q_k(x_m)] \\ &- \frac{b(x_m)}{6\mu} [\epsilon b'(x_m) \partial_x p^0(x_m)] \end{aligned} \quad (4.51)$$

Usando a primeira expressão entre parênteses na 4.39, temos:

$$\begin{aligned} \left(b' \frac{V_o}{2} - \frac{b'b^2(x_m)}{4\mu} \partial_x p^0(x_m) - \frac{b^3(x_m)}{12\mu} \partial_x^2 p^0(x_m) \right) &= 0 \\ \frac{b^2(x_m)}{12\mu} \partial_x^2 p^0(x_m) &= \left(\frac{b'V_o}{2b(x_m)} - \frac{b'b(x_m)}{4\mu} \partial_x p^0(x_m) \right) \end{aligned} \quad (4.52)$$

Substituindo este resultado no primeiro parenteses da Eq.4.51, fica

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}(t)[1 - F(Ca)] &= -\epsilon(t) \left[\frac{b'V_o}{2b(x_m)} - \frac{b'b(x_m)}{12\mu} \partial_x p^0(x_m) \right] \\ &\quad - \left[\frac{b^2(x_m)}{12\mu} \eta(t) \partial_x q_k(x_m) \right] \end{aligned} \quad (4.53)$$

Usando a Eq.4.19, eliminamos $\partial_x p^0(x_m)$ acima e chegamos a:

$$\dot{\epsilon}(t)[1 - F(Ca)] = -\epsilon(t) \frac{Q}{b^2(x_m)} \left[\frac{db}{dx} \right]_{x_m} - \eta(t) \frac{b^2(x_m)}{12\mu} \left[\frac{\partial q_k}{dx} \right]_{x_m} \quad (4.54)$$

Substituindo na equação acima a expressão para $\eta(t)$ obtida na Eq. 4.45, chegamos ao resultado $\epsilon \propto \exp(wt)$, ou seja, a amplitude da perturbação na interface varia exponencialmente no tempo com taxa de crescimento w da instabilidade dada por:

$$w = \frac{1}{[1 - F(Ca)]} \left\{ -\frac{Q}{b^2(x_m)} \left[\frac{db}{dx} \right]_{x_m} + \frac{b^2(x_m)}{12\mu q_k} \left[\frac{\partial q_k}{dx} \right]_{x_m} \left(\left[\frac{dp^0}{dx} \right]_{x_m} - \frac{2T}{b^2(x_m)} \left[\frac{db}{dx} \right]_{x_m} - Tk^2 \right) \right\} \quad (4.55)$$

Para obtermos os parâmetros da instabilidade, precisamos encontrar $q_k(x)$. Numa aproximação, consideramos o termo $\left(\frac{1}{b} \frac{db(x)}{dx} \right)$ como constante, definindo-o assim

$$\frac{1}{h} = \left(\frac{3}{2b} \frac{db(x)}{dx} \right) \quad (4.56)$$

e podemos supor que a solução para $q_k(x)$ na Eq.4.41 seja

$$q_k(x) \sim \exp(m_k x)$$

Assim obtemos:

$$m_k = \frac{1}{h} \left[\sqrt{1 + h^2 k^2} - 1 \right] \quad (4.57)$$

Então, observamos que

$$\frac{1}{q_k(x_m)} \frac{dq_k(x)}{dx}$$

é m_k e então podemos resolver a equação 4.55 para obtermos a taxa de crescimento da instabilidade.

Usaremos a expressão 4.55 no capítulo de resultados e análises e mostraremos a consistência de sua previsão com os nossos dados experimentais.

Capítulo 5

Descrição do Experimento

Já dissemos na introdução, que sistemas físicos unidimensionais podem servir como protótipos para o estudo de padrões espaço-temporais e auxiliar no entendimento do estudo de sistemas complexos de mais alta dimensionalidade. Nossa investigação em formação de padrões foi feita tendo como base experimental um arranjo que, a despeito da aparente simplicidade, revela uma certa complicação devido ao elevado grau de precisão exigido no controle dos parâmetros experimentais. Desse experimento obtemos um padrão unidimensional do qual pode-se extrair informações bastante precisas.

Nesse trabalho visamos dar sequência à pesquisa em formação de padrões na interface ar-óleo desenvolvida aqui no Departamento de Física da UFMG por Batista[16] e orientada pelo mesmo orientador desta dissertação. Seu trabalho foi importante por ter me apresentado vários aspectos da formação de padrões e preciso salientar que o conceito da base experimental que usei já estava bastante desenvolvido, o que me beneficiou no início de meu trabalho.

No entanto, iniciei minha pesquisa, ainda durante a Iniciação Científica, reformulando parte do experimento. Mudamos o cilindro para outro de diâmetro maior. Adquirimos mancais tipo Burger SN 506 com rolamentos SKF auto-compensadores de esfera dupla, que davam mais estabilidade ao cilindro quando este girava. Posteriormente, vieram recursos financeiros que nos permitiram adquirir uma base para aquisição e tratamento das imagens dos experimentos. Esta base consistia de uma câmera CCD digital da Kodak, modelo ES 310, com resolução de 648x484 pixels, uma lente Nikkor, 60mm f/2.8D AF, placa de aquisição de imagens da EPIX, mo-

delo PIXCI D, software de captura e análise de imagens XCAP da própria EPIX, computador com processador Pentium II Xeon de 400 MHz com 512 Megabytes de memória RAM, vídeo cassete digital Sony DSR-10 e gravador de CD-ROM Sony, ambos para gravação dos experimentos.

5.1 Configuração Experimental

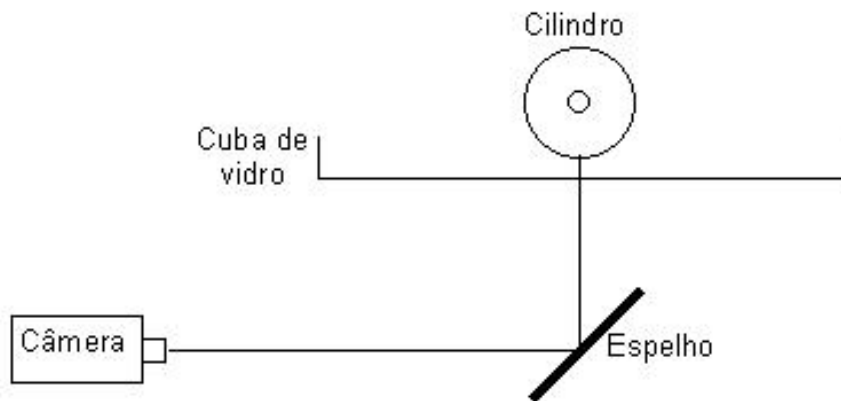


Figura 5.1: Montagem experimental

Um diagrama do aparato experimental que usamos é mostrado na Fig.5.1. Ele consiste de um cilindro de comprimento L ($L = 250mm$) e raio R ($R = 31.3mm$) feito de aço inoxidável e retificado com precisão melhor que $0.01mm$ como mostrado na Fig.5.2. Ele é mergulhado numa cuba de vidro onde colocamos óleo de silicone da Dow Corning©200, um polímero dimetil siloxano, nas viscosidades dinâmicas de 50 ctk a 350 ctk ($1 \text{ centistokes} \equiv 10^{-6}m^2/s$), dependendo da amostra que estávamos

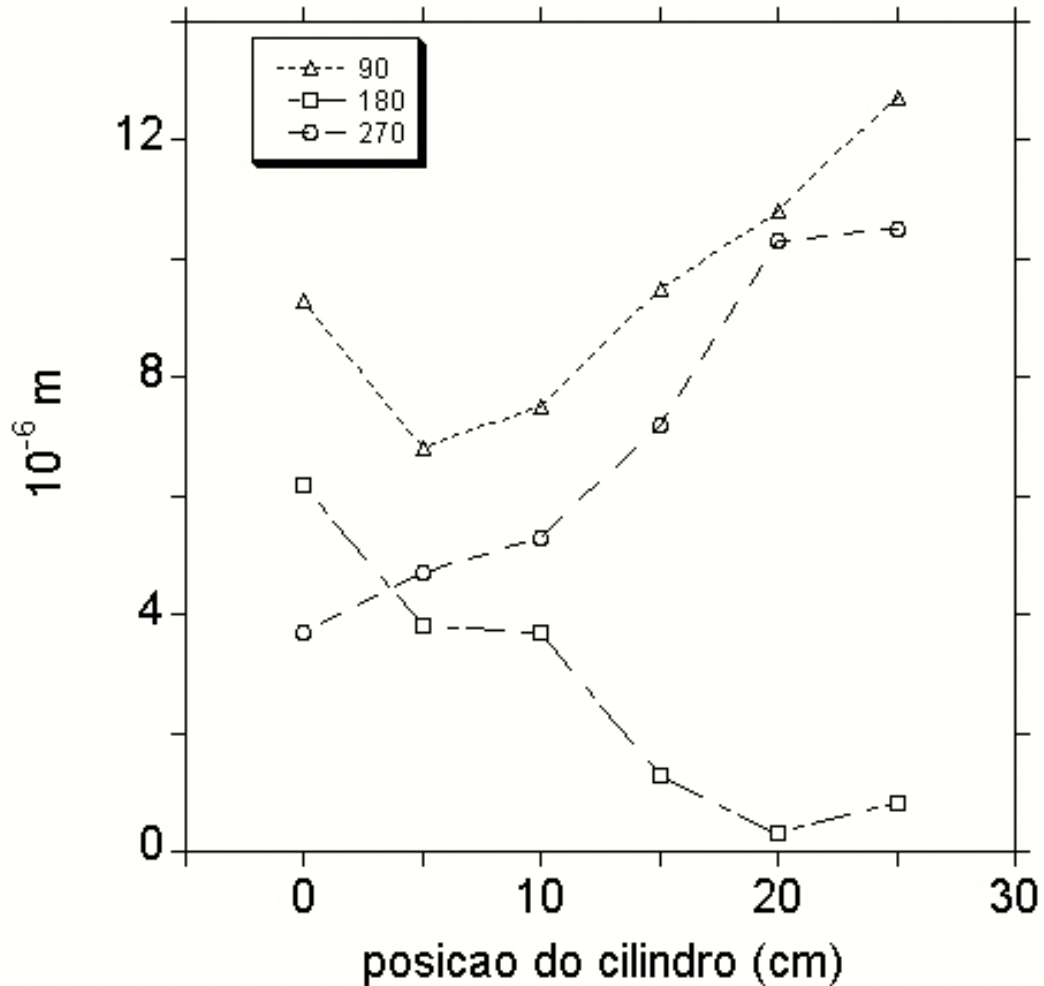


Figura 5.2: Variação do perfil do cilindro ao longo de seu comprimento. A legenda especifica os ângulos de 90°, 180° e 270° à partir de um ponto zero de referência.

usando num dado experimento. A densidade para as quatro amostras do fluido variou de 960kg/m^3 a 970kg/m^3 (25°C) e sua tensão superficial variou de $20.9 \times 10^{-3}\text{N/m}$ a $21.1 \times 10^{-3}\text{N/m}$. Essas especificações foram obtidas através de tabela do próprio fabricante. O volume de óleo usado também variou de acordo com a altura entre o cilindro e a cuba de vidro, ficando entre 90ml a 140ml e as distâncias do cilindro à placa variaram de 0.3mm a 0.8mm . Este cilindro é movido por um motor de corrente contínua da Minimotors, tipo 2233 F 030 S, ao qual acoplamos um encoder do tipo 09A2, que nos permite obter a frequência de rotação através de um

frequencímetro Minipa MF 7130. A esse motor acoplamos, de modo conveniente, reduções tipo 22/2 da Minimotors com taxas de redução de 54,6:1, 173:1 e 548:1, o que nos permite ampliar o espectro de velocidades em função do experimento que se deseja realizar. A alimentação é feita por uma fonte de corrente contínua bastante estável modelo Minipa MPS 3006D que fornece até 6A numa faixa de tensão de 0 a 30V. A velocidade desejada é conseguida diretamente controlando a tensão nessa fonte de alimentação do motor. A aquisição das imagens é feita por uma câmera de vídeo digital da Kodak modelo ES-310 que pode capturar a taxas entre 15 e 300 quadros por segundo(Frame Per Second=FPS). Nessas câmeras de vídeo digital, as características de captura, dentre elas, a taxa de aquisição, o tempo de varredura horizontal e a região de captura no *CCD*, podem ser controladas por hardware e software, logo as propriedades da imagem são determinadas na própria origem. Isso permite que adequemos as características da aquisição de imagens de acordo com o fenômeno que se quer observar e estudar. As sequências de imagens capturadas por essa câmera, são descarregadas em uma placa de aquisição de imagens que serve como *buffer* de dados no barramento do computador, controlando e protocolando o envio das imagens à memória em disco. O nosso sistema possui um programa que acompanha e que serve para monitorar o *buffer* de memória dessa placa e nos permite salvar toda a sequência de imagens em um só arquivo. Esse arquivo é então gravado em disco rígido para posterior tratamento. Em nossos experimentos usamos taxas de 17 a 38 FPS. A resolução na posição do menisco e no comprimento de onda da instabilidade foi de 0.20mm/*pixel* e a região de captura foi de 648 x 60 *pixels*.

Para variar a distância entre o plano (cuba) e o cilindro, podemos mover a cuba de vidro usando parafusos micrométricos AJS 0.5 da Newport que tem um passo de 0.32mm. O ajuste da altura foi feito usando dois relógios comparadores com precisão de 5 μ m, que eram apoiados sobre a cuba, um em cada lado.

Para obter as imagens usamos um espelho situado abaixo da cuba formando um ângulo de 45° com o plano horizontal. Esse espelho permite que a imagem da interface seja levada até a câmera que então libera um sinal digital diretamente para a placa de aquisição de imagens. A câmera também possui uma saída analógica que é conectada a um monitor para ajudar no monitoramento. Para a iluminação usamos duas lâmpadas dicróicas, situadas abaixo do conjunto, o que nos dá uma boa imagem.

5.2 Preparando e realizando o Experimento

Seguindo parte da metodologia aplicada por Batista[16], procurei sempre colocar a menor quantidade de óleo que fosse suficiente para cobrir toda a cuba e que fosse compatível com a altura do cilindro ao plano. Para distâncias entre 200 e 400 μm , o volume colocado foi de 90ml e para a distância de 800 μm o volume foi de 140ml.

Para cada configuração dos parâmetros experimentais, que é dada pela altura, b_o , e a viscosidade do óleo, o experimento destinado a obter dados para a posição média da interface e a dinâmica da evolução da instabilidade, seguiu o protocolo descrito à seguir:

- a) Limpeza da cuba de vidro e do cilindro para remover o óleo usado em um experimento anterior;
- b) Ajuste da distância(altura b_o) entre o cilindro e o plano;
- c) Distribuição do óleo sobre toda a extensão do cilindro, aguardando o tempo necessário para que ele se espalhasse sobre toda a cuba de vidro. Em geral, esse tempo era de 30 minutos;
- d) Remoção de qualquer impureza e das bolhas de ar que eventualmente surgiam no óleo;
- e) Cobertura do conjunto cilindro-cuba, para evitar que impurezas caíssem no óleo e que houvesse incidência de luz por cima. Esse procedimento melhorou bastante a qualidade das imagens;
- f) Ajuste da região de captura no *CCD* da câmera digital;
- g) Captura das sequências de imagens, iniciando sempre da menor velocidade, onde a interface se mantinha na forma planar. Durante a captura de uma sequência de imagens, a velocidade era mantida constante. O tempo de captura de uma sequência típica foi de, aproximadamente, 300s;
- h) Após o término da captura de uma sequência de imagens, elas são descarregadas do *buffer* de memória da placa de aquisição de imagens diretamente para o disco rígido do computador. Esse processo demanda um tempo de ~ 30 minutos para um arquivo com tamanho de 200 *megabytes* de memória;
- i) Após, se iniciava uma nova captura de imagens para uma velocidade maior que a anterior, sendo o intervalo entre as velocidades de $\sim 0.5mm/s$. O cilindro sempre partiu do repouso em cada experimento;

j) Nas cinco velocidades imediatamente antes e após a velocidade crítica (bifurcação), o intervalo entre as velocidades diminuía para o menor valor possível que é de $0.2mm/s$.

Observa-se que, um único experimento para uma certa velocidade demanda, para os ajustes da velocidade, a captura de imagens e a gravação do arquivo das imagens no disco rígido, um tempo médio de 50 minutos. Levando em conta que para uma dada configuração experimental são realizados experimentos para cerca de 45 velocidades diferentes, notamos que para obter os dados, como aqueles usados para fazer o gráfico mostrado na Fig.6.1, são necessárias cerca de 38 horas para a realização das etapas de uma única configuração dos parâmetros de controle.

Para descrever esse padrão, fizemos o processamento e tratamento das sequências de imagens capturadas e que são armazenadas em um só arquivo, usando um programa, desenvolvido em C pelo professor José Marcos A. Figueiredo, orientador desta dissertação, e que passou por algumas alterações desde sua versão original, alterações essas feitas por alunos aqui do departamento que o usaram em suas pesquisas[16, 5]. Coube a mim, adaptar toda a estrutura do programa em C para trabalhar com um arquivo do tipo mencionado acima e também fazer as alterações exigidas pelo compilador que passamos a usar, já que migramos de um sistema que trabalhava numa máquina PowerMac da Macintosh para o sistema Windows num PC. Como saída desse programa, obtínhamos para nossas análises as transformadas de Fourier do padrão e a evolução temporal da amplitude do padrão, bem como o recuo da interface plana para as diversas velocidades do cilindro.

Capítulo 6

Resultados e Análises

Como tinha à disposição quatro viscosidades diferentes para o óleo e a possibilidade de ajustar a altura entre o cilindro e o plano fiz, ao longo desse trabalho, vários experimentos, que contribuíram muito para que a metodologia fosse aprimorada constantemente. Para se ter uma idéia da quantidade de experimentos realizados e, conseqüentemente, de dados experimentais obtidos, esses estão armazenados em cerca de 70 CD-ROM's. Nessa dissertação, vou mostrar os resultados de dois experimentos que realizei com os procedimentos experimentais já bastante refinados. Neles usei o óleo na viscosidade dinâmica $\mu = 33.95 \times 10^{-2} \text{ Kg}/(m \cdot s)$ e tensão superficial $T = 21.1 \times 10^{-3} \text{ N}/m$, ambos a 25°C . Sendo a temperatura um dos fatores que pode alterar a viscosidade e a tensão superficial do óleo, ela deve ser estável durante todo o experimento que, lembrando, consistia da captura de imagens para cerca de 45 velocidades diferentes. Assim fiz a termalização do ambiente usando um aparelho de ar-condicionado, permitindo que a temperatura se mantivesse estável, ficando em $(24 \pm 1)^\circ\text{C}$ durante o tempo gasto para fazer os experimentos para todas as velocidades (cerca de 38 horas como dito no capítulo anterior).

Como podemos variar a taxa de captura das imagens, após usar alguns valores, percebemos que fixando em 17 quadros por segundo, conseguimos uma coleta de dados suficiente com um menor *buffer* de memória, o que diminuiu o tempo para gravação de cada sequência de imagens, pois a transferência dessas imagens do *buffer* que usa memória RAM para o disco rígido é demorada (cerca de 30 minutos para um arquivo com 200 MegaBytes). A região de captura, que também pode ser definida por conveniência, ficou com o tamanho de $646 \times 60 \text{ pixels}$.

As distâncias entre o cilindro e o plano nas configurações experimentais que adotamos, foram de 400 *micrômetros* e 800 *micrômetros*. A resolução, tanto para a posição, o comprimento de onda e a amplitude dos modos foi de 0.20 *mm* por *pixel*.

Para evitar os efeitos de borda, filmamos sempre no centro do cilindro, dividindo a "janela" de captura, simetricamente em relação ao centro do cilindro. Essa janela tinha uma largura de 13 *cm*. Isto é importante, porque a teoria desenvolvida no capítulo 5 estabelece que o comprimento do cilindro deve ser infinito.

Nesse capítulo mostraremos os resultados e análise dos dados experimentais conseguidos para as sequências de imagens citadas acima.

6.1 Interface Plana

Devido à simetria cilíndrica, a interface se mantém paralela ao eixo do cilindro quando a velocidade deste é zero. Para baixas velocidades, esse paralelismo deixa de existir, porque a interface recua mais facilmente próximo ao centro do cilindro do que próximo às suas extremidades. Com o incremento na velocidade, a interface passa a recuar paralelamente ao cilindro em toda a sua extensão. No entanto, como capturamos longe da extremidade, esse efeito não atrapalhou nossas medidas.

Para ajustar a posição média da interface durante o recuo, usamos a equação abaixo, conseguida através das Eqs. 4.21, 4.22 e 4.23 e usando a aproximação parabólica para o perfil do cilindro, $b(x_m) = b_o \left(1 + \frac{x_m^2}{2Rb_o}\right)$:

$$x_m = \sqrt{2Rb_o \left[\frac{2}{3F \left(\frac{\mu V_o}{T}\right)} - 1 \right]} \quad (6.1)$$

Usamos a Eq.6.1 que foi obtida para interface plana, para ajustar a posição da interface depois de surgir a instabilidade e para isso usamos a posição média dessa interface. A função empírica, $F(Ca)$, foi obtida do artigo de Tabeling et al[20], e nele não encontramos justificativa teórica para sua construção. No capítulo 5, dissemos que essa função devia assumir valor menor 1 para manter a conservação do fluxo e ela foi usada originalmente para um fluxo simétrico, um *fluxo de Poiseuille*, existente entre dois cilindros concêntricos. No nosso caso, devido à assimetria do sistema, já que ele consiste de um cilindro e um plano, temos localmente um *fluxo de Poiseuille-Couette*. Assim, não desprezamos essa diferença e usamos aquela função

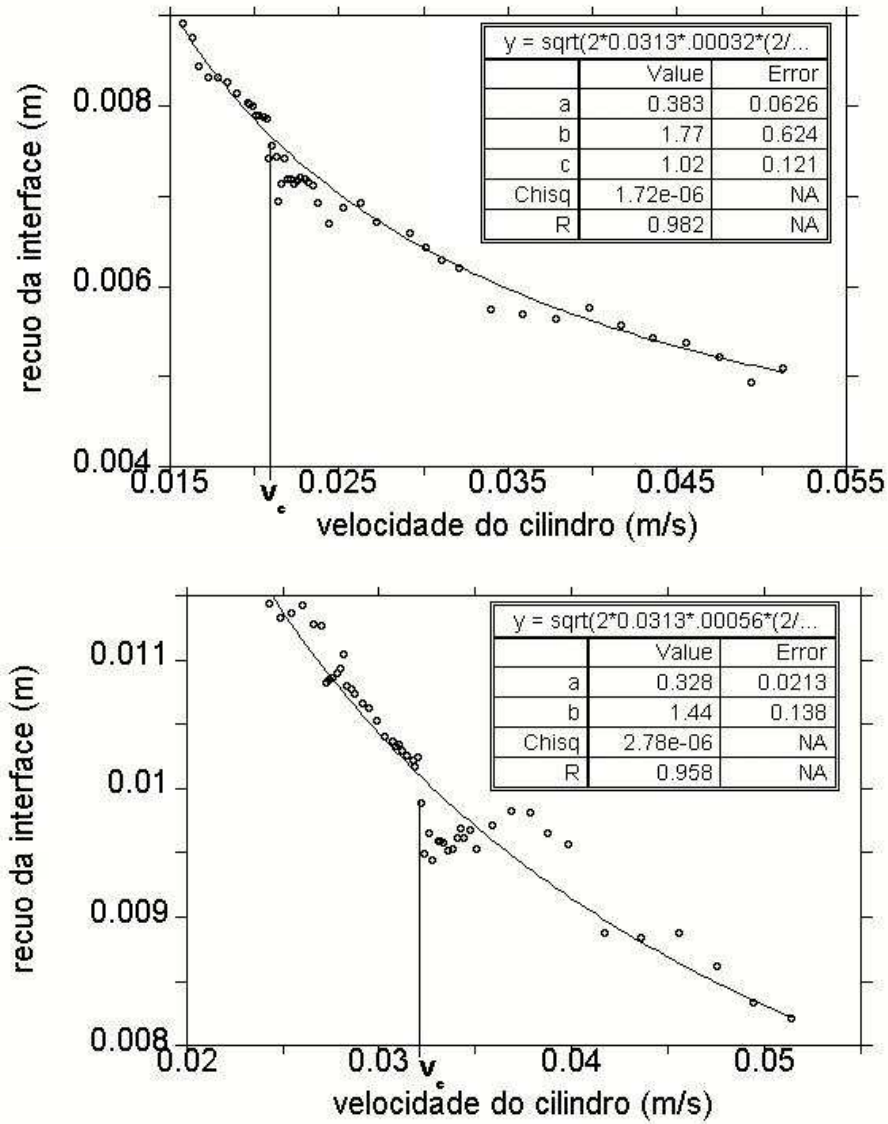


Figura 6.1: Posição da interface em função da velocidade do cilindro para: a) $b_o = 400\mu\text{m}$ e velocidade crítica de 0.021m/s ; b) $b_o = 800\mu\text{m}$ e velocidade crítica de 0.032m/s . A linha representa a previsão teórica e os pontos os dados experimentais.

$F(Ca)$, porém, com os valores para seus parâmetros obtidos por ajuste feito para nossos dados experimentais.

Para a variação da posição da interface em função da velocidade, fizemos um ajuste pelo método dos mínimos quadrados, usando o programa *KaleidaGraph 3.5*,

e mostramos os resultados na figura 6.1, para as duas configurações experimentais, ou seja, para as diferentes alturas do cilindro e viscosidades do óleo usadas.

Percebemos que há uma boa concordância entre os dados experimentais e a curva baseada na Eq.6.1. Em ambos os gráficos, verificamos que ao atingir a velocidade crítica, os dados experimentais deixam de se ajustar à Eq.6.1, devido a uma maior dispersão nos dados experimentais. Isso indica uma quebra, em primeira ordem (primeira derivada descontínua), na analiticidade da posição da interface na bifurcação. Entretanto, para velocidades de rotação mais altas, verificamos novamente um ajuste bastante razoável entre os dados experimentais e a Eq.6.1. Essas observações sinalizam um acoplamento entre a dinâmica do padrão e a dinâmica da posição da interface plana no regime pré-bifurcação. Se isso for verdade, é possível que a dinâmica da posição da interface plana possua informações a respeito de eventuais precursores da instabilidade. Esta é uma hipótese muito atraente e será objeto de estudos futuros em nosso laboratório.

6.2 A Instabilidade na Interface

Na velocidade crítica, o sistema se desestabiliza, quebrando a simetria planar. Vários vetores de onda coexistem e a forma da interface começa a apresentar ondulações irregulares que lentamente começam a tomar a forma senoidal com um comprimento de onda λ bem definido e amplitude muito pequena. A partir dessa velocidade, que denotamos por V_c , esta forma senoidal passa a ter um comprimento de onda que decresce e uma amplitude que cresce com o aumento da velocidade. Observamos que há uma saturação para o crescimento da amplitude da interface, porém o comprimento de onda, até a velocidade máxima que pudemos atingir, sempre decrescia. Também, se percebe que para velocidades distantes de V_c , o padrão exibe um achatamento em sua forma o que o afasta da senóide apresentada para as velocidades imediatamente acima de V_c .

No programa de processamento de imagens que utilizamos, o arquivo da sequência de imagens é aberto e armazenado num *buffer* de memória. Uma rotina dentro desse programa, localiza a interface utilizando como critério os *pixels* com maior nível de cinza em cada linha vertical. Como a interface possui espessura de alguns *pixels*, fizemos uma média localizando assim apenas um ponto em cada linha

vertical da imagem. Em sequência, os pontos assim obtidos são armazenadas em um arquivo; eles ficam também disponíveis para o programa que calcula a transformada de Fourier da interface e a evolução da amplitude do modo dominante. Mostramos na figura 6.2 uma imagem típica, capturada pela câmera e a correspondente interface detectada pelo nosso programa.

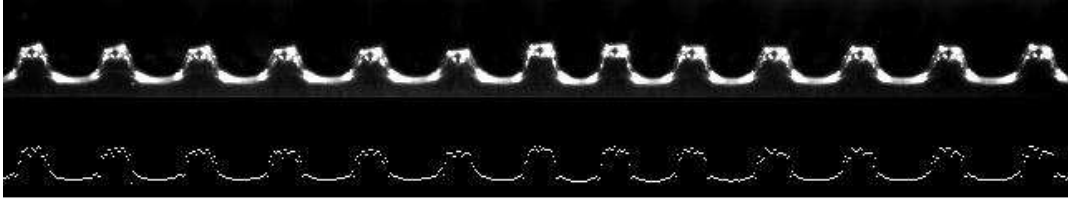


Figura 6.2: Imagem capturada pela câmera e sua correspondente interface detectada pelo programa. Nesse experimento, $b_o = 400\mu m$ e velocidade do cilindro é de $30.2mm/s$.

Uma vez obtido um arquivo com uma sequência de interfaces armazenadas, procedemos o cálculo numérico da transformada de Fourier das mesmas. Obtemos então o espectro de modos de Fourier $\bar{A}(k)$, onde \bar{A} é o coeficiente de Fourier para o vetor de onda k . Para isto, o cálculo é feito utilizando-se a definição da transformada de Fourier, ou seja, somando-se numericamente

$$\bar{A}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left| \sum_{j=0}^L A(x_j) \exp(-ikx_j) \right|$$

onde $A(x)$ representa os pontos da interface e L é o tamanho da janela que é definido pelo tamanho horizontal da imagem.

Uma rotina localiza, neste espectro, o valor máximo da amplitude, \bar{A}_{max} , e o seu vetor de onda correspondente, k_{max} . Como a interface é bem aproximada por um harmônico, temos $\bar{A}_{max} \simeq A$, onde A é a amplitude real do modo Fourier dominante, k_{max} . A evolução temporal desses parâmetros é armazenada para posterior análise. A figura 6.3 mostra a transformada de Fourier para a imagem apresentada na Fig.6.2

Poderíamos usar o método FFT de um programa de gráfico comercial, por exemplo o *KaleidaGraph*, para fazer a transformada de Fourier de nossos dados.

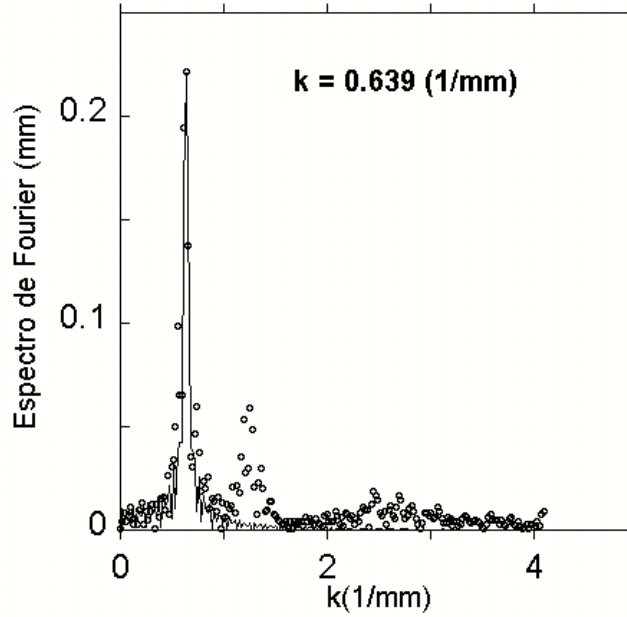


Figura 6.3: Transformada de Fourier da imagem mostrada na Fig.6.2. A linha representa a transformada do harmônico e os pontos a transformada dos dados experimentais.

Porém, esse método apresenta uma desvantagem no presente caso. Como a FFT trabalha somente com vetores de onda que sejam múltiplos da janela ($k = 2\pi/NL$), haveria uma perda de precisão na determinação do vetor de onda do padrão. Por isso optamos pelo cálculo analítico da transformada. Essa mesma técnica já foi usada em nosso laboratório em trabalhos anteriores [21, 16].

Para garantir que a amplitude do modo no espaço recíproco representa de fato a amplitude da interface, usamos o teorema de Parseval (Eq.6.2), mostrando que essa amplitude está calibrada em relação ao padrão no espaço real.

$$\int f(x, t)^2 dx = \int |A_k(t)|^2 dk \quad (6.2)$$

6.3 Análise do Padrão da Interface

Nesta seção, faremos a análise do padrão celular. Na Fig.6.4, apresentamos a evolução temporal de uma instabilidade celular.

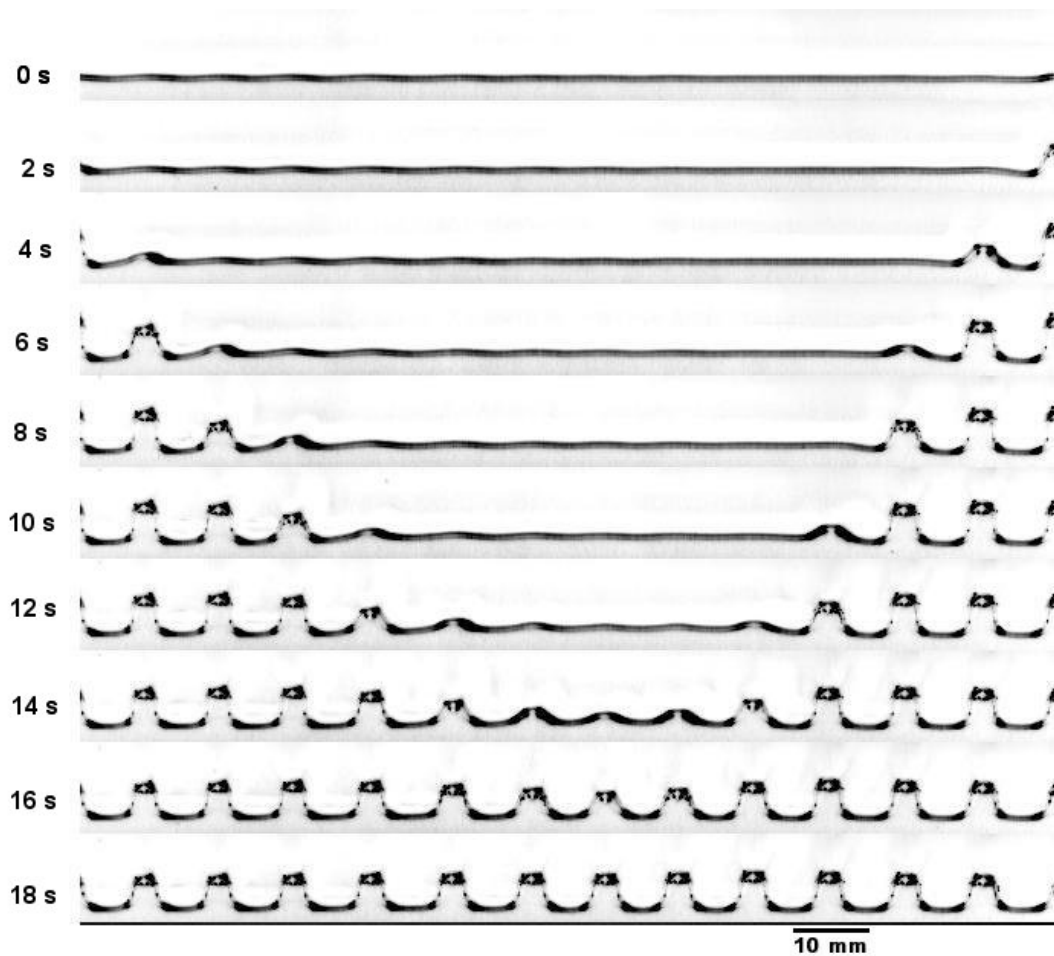
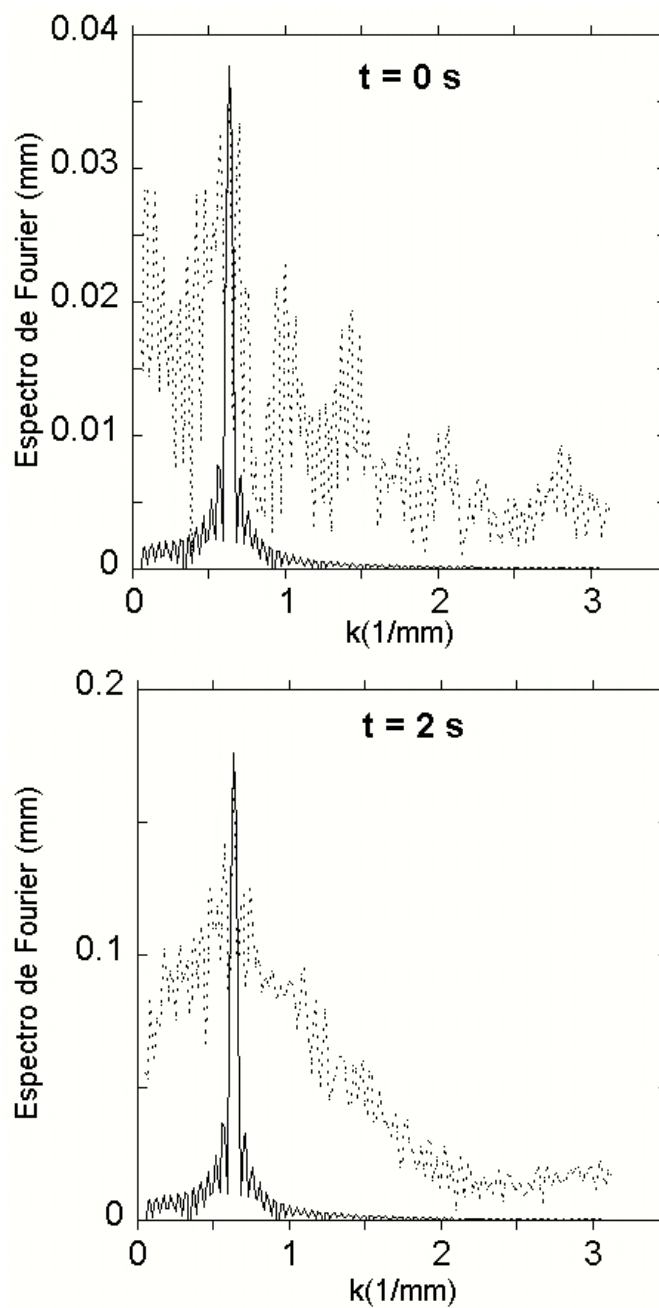
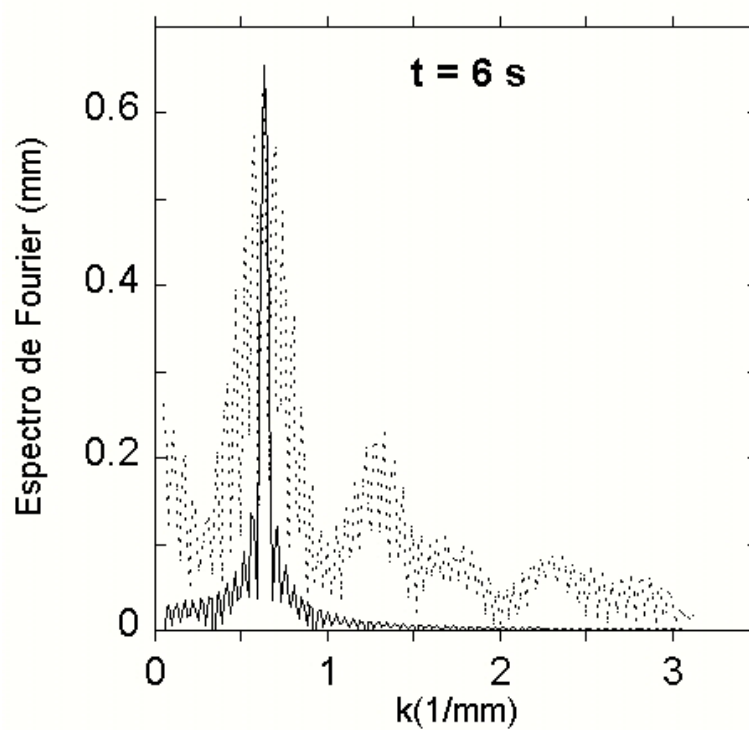
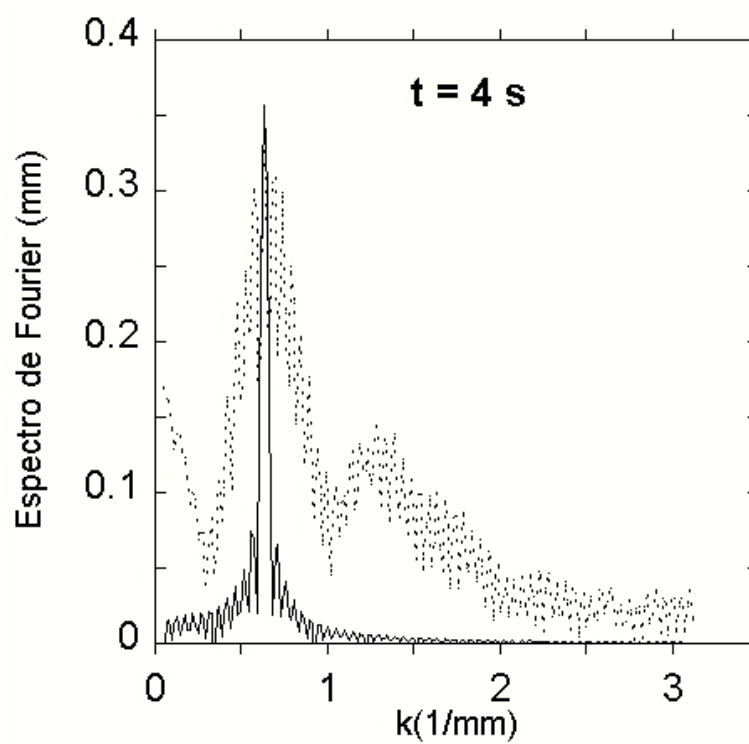


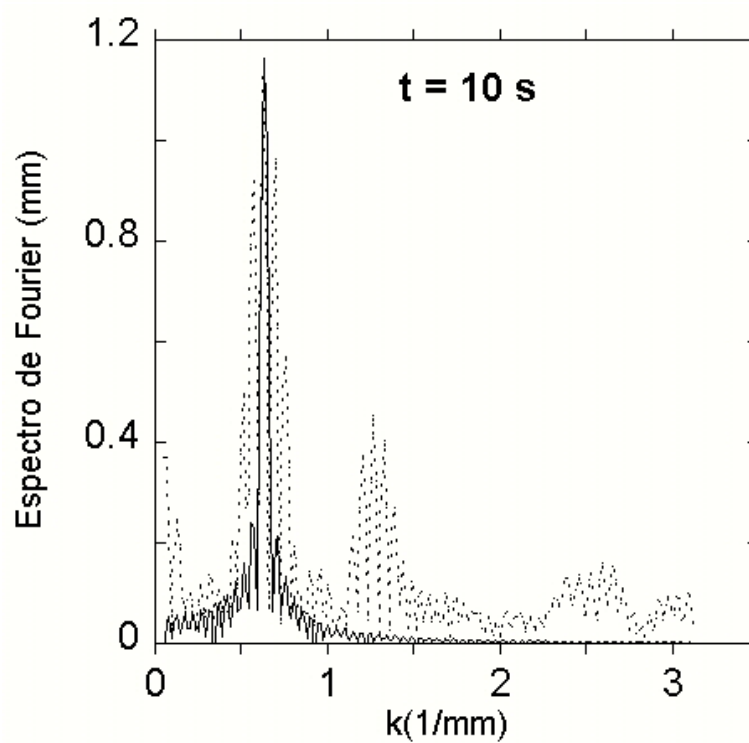
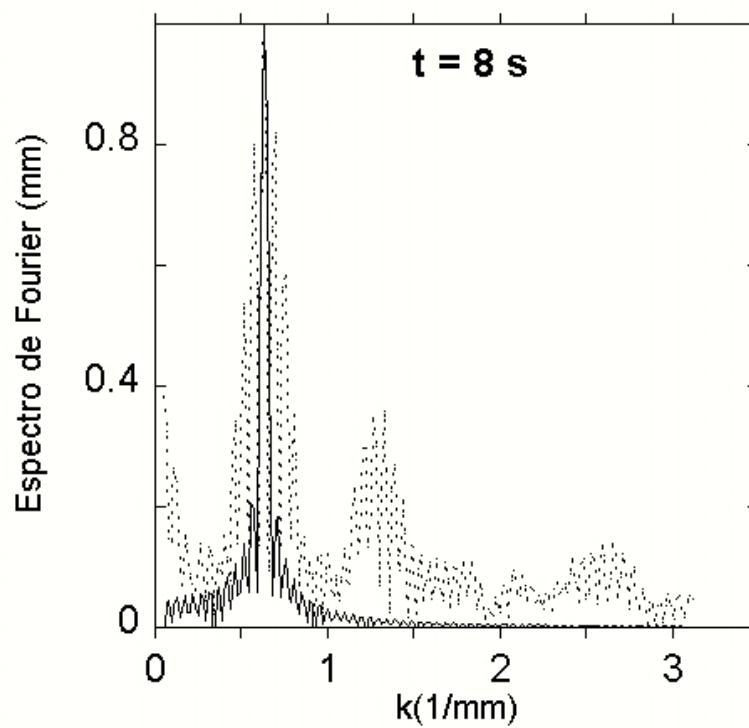
Figura 6.4: Evolução temporal do padrão para $V = 30.2\text{mm/s}$ e $b_o = 400\mu\text{m}$

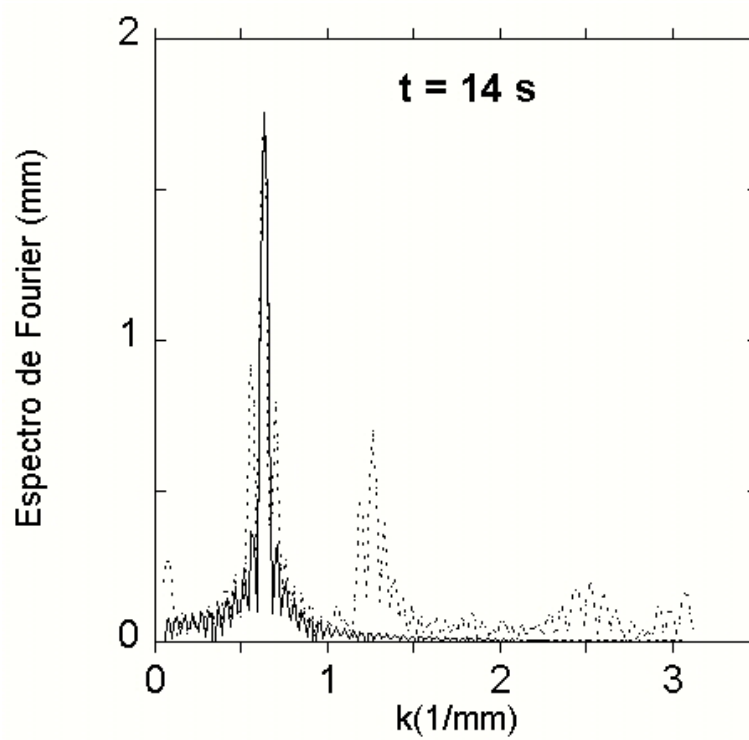
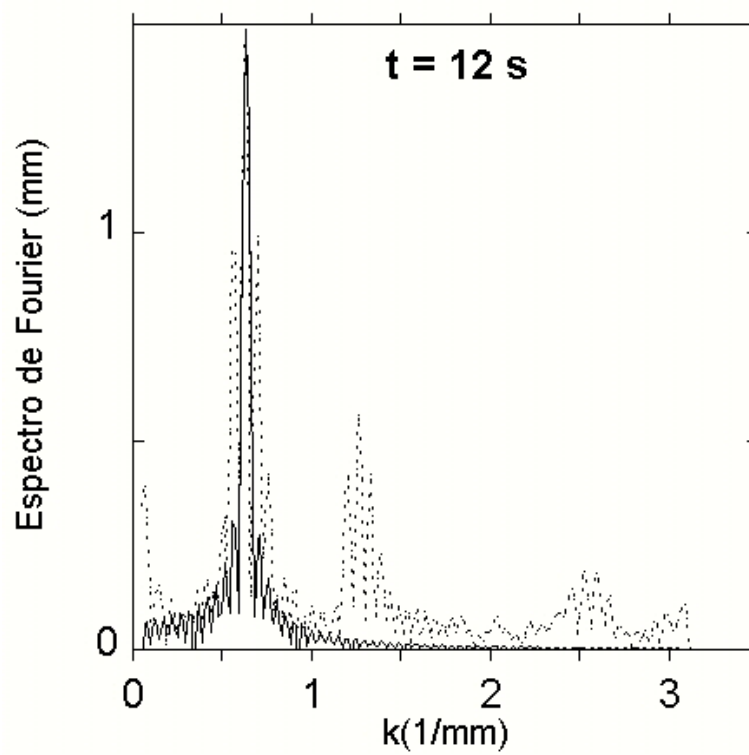
O experimento foi realizado com óleo de silicone na viscosidade (tabelada) de $\mu = 33.95 \times 10^{-2} \text{Kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$, distância entre o cilindro e a cuba de vidro de $b_o = 400\mu\text{m}$ e velocidade do cilindro de $V = 31.2\text{mm/s}$. O programa, após ter localizado a interface e armazenado os seus pontos como explicamos na seção anterior, calcula as transformadas de Fourier, numericamente para o padrão detectado. O resultado é mostrado na Fig.6.5. Os pontos representam o módulo do espectro de Fourier da interface, $\bar{A}(k)$, as linhas representam a transformada de Fourier do harmônico simples dado por $\bar{A}_{max} \sin(k_{max}x)$, onde \bar{A}_{max} é o módulo da amplitude máxima do espectro experimental e k_{max} é o vetor de onda correspondente. Com isso, podemos comparar o que representa a difração da janela finita utilizada para a transformada

de Fourier e o que, realmente, representa um outro harmônico no sistema.









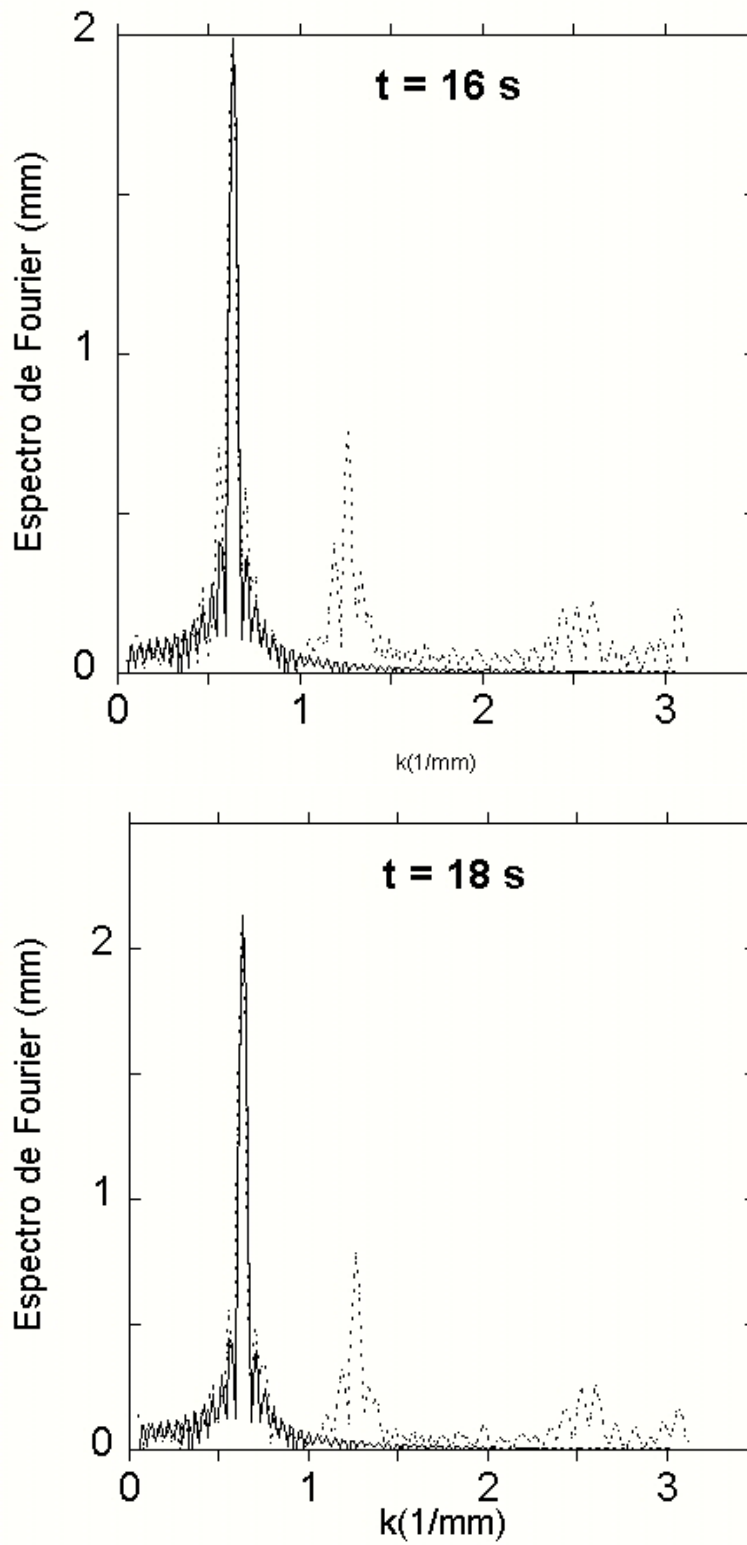


Figura 6.5: Sequência das transformadas de Fourier para as imagens mostradas na Fig.6.4. As linhas pontilhadas representam a transformada dos dados experimentais e a linha inteira sem ponto representa a transformada de um harmônico simples.

6.4 Evolução da Amplitude do Modo Dominante

Percebemos em nossas análises que, mesmo no início da instabilidade, o crescimento não se dá com uma exponencial pura, e assim usamos a equação de Landau-Ginzburg $\frac{\partial A_k}{\partial t} = \omega(k)A_k - \sigma(k)A_k^3$, para ajustar o crescimento da amplitude do modo dominante. Esse modo, que é dado pelo vetor de onda, k_{max} , correspondente ao módulo da amplitude máxima, \bar{A}_{max} , como já citado na seção anterior, tem um papel importante na taxa de crescimento, como veremos na seção seguinte. A figura 6.6, nos dá um exemplo de um ajuste feito para o experimento com distância do cilindro à cuba de vidro, b_o , igual a $400\mu m$ e velocidade do cilindro igual a $41.7mm/s$.

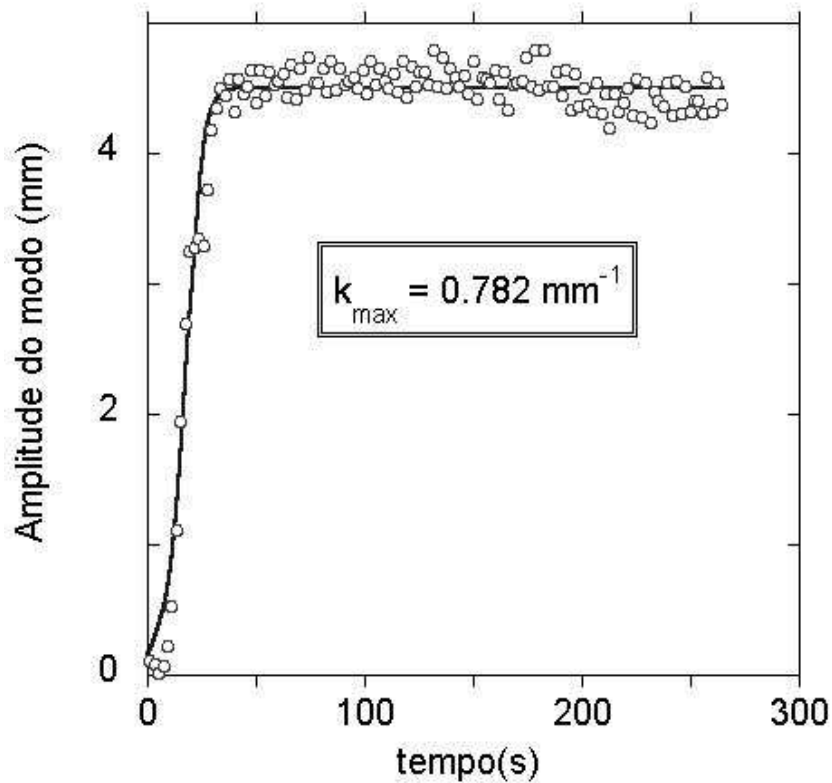


Figura 6.6: Ajuste dos pontos experimentais usando a equação de amplitude de Landau (Eq.3.21), onde obtivemos $w = 0.154s^{-1}$ e $\sigma = 4.3 \times 10^{-6} (mm \cdot s)^{-1}$ para $V = 41.7mm/s$ e $b_o = 400\mu m$

Podemos observar que à partir da saturação do crescimento da amplitude da interface, surgem oscilações na amplitude que não são previstas pela equação de Landau. O termo não linear nessa equação limita o crescimento da curva, porém, não se ajusta à instabilidade secundária nessa fase da evolução do sistema.

6.5 Crescimento da Instabilidade

No Capítulo 3, mostramos como a análise linear e a teoria de bifurcação podem nos auxiliar no entendimento de sistemas no não-equilíbrio. Em particular, queremos obter a taxa de crescimento de uma instabilidade usando as equações básicas que governam o sistema, mesmo que essas tenham que ser simplificadas. No Capítulo 4, deduzimos uma expressão para a taxa de crescimento da instabilidade em nosso sistema que é dado pela equação 4.55. Nela, além dos parâmetros experimentais que estão envolvidos no nosso sistema como viscosidade, tensão superficial e velocidade do cilindro, temos que conhecer o valor do vetor de onda do modo mais instável do sistema. A determinação desse vetor de onda se torna um problema. Poderíamos usar o vetor k_{max} do modo dominante, que o nosso programa nos fornece e que é obtido através da amplitude máxima, \bar{A}_{max} do espectro de Fourier mas, percebemos que esse modo dominante não é sempre o mais instável no início do crescimento. Então, observamos que para velocidades acima da crítica, mas ainda perto dela, nos instantes iniciais quando o sistema bifurca, vários modos crescem mais que o modo k_{max} da amplitude \bar{A}_{max} . Já para velocidades bem mais altas, o modo dominante surgia já nesses primeiros instantes. Como a teoria da análise linear, da qual obtemos aquela expressão para ω , nos dá informações muito perto da instabilidade, é necessário que o vetor de onda seja aquele presente na desestabilização do sistema.

Assim, procedemos da seguinte maneira para obter esse vetor de onda k . Como o nosso programa libera um arquivo com a evolução temporal dos modos com maior amplitude para cada imagem, fizemos os gráficos dessas evoluções para cada imagem e selecionamos o vetor de onda no início do crescimento. Em alguns casos, quando havia mais de um modo, fizemos a média desses.

Ajustamos os dados experimentais assim obtidos com a equação 4.55 da taxa

de crescimento, ω , que é mostrada novamente a seguir:

$$w = \frac{1}{[1 - F(Ca)]} \left\{ -\frac{Q}{b^2(x_m)} \left[\frac{db}{dx} \right]_{x_m} + \frac{b^2(x_m)}{12\mu q_k} \left[\frac{\partial q_k}{\partial x} \right]_{x_m} \left(\left[\frac{dp^0}{dx} \right]_{x_m} - \frac{2T}{b^2(x_m)} \left[\frac{db}{dx} \right]_{x_m} - Tk^2 \right) \right\} \quad (6.3)$$

obtemos as curvas que mostramos nas figuras 6.7 e 6.8:

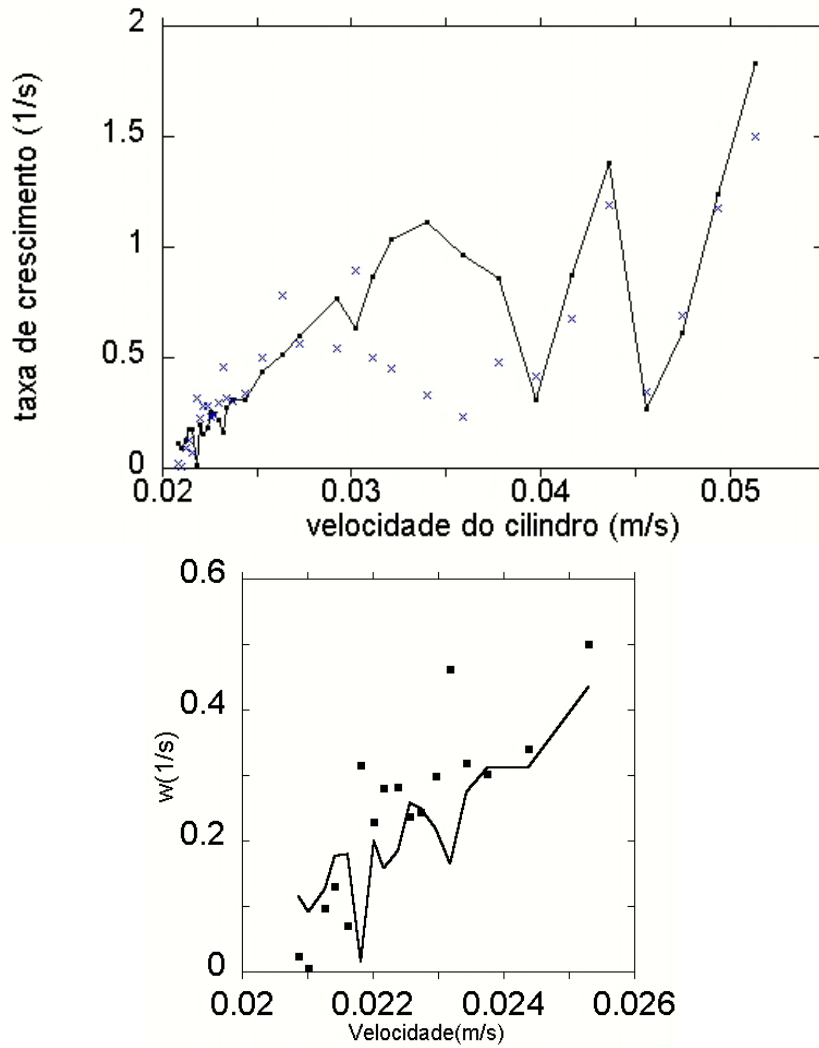


Figura 6.7: Representação da taxa de crescimento em função da velocidade do cilindro para $b_o = 400\mu m$. A linha representa a curva teórica dada pela Eq.6.3 e os pontos representam os dados experimentais. O gráfico menor detalha os pontos próximos a bifurcação.

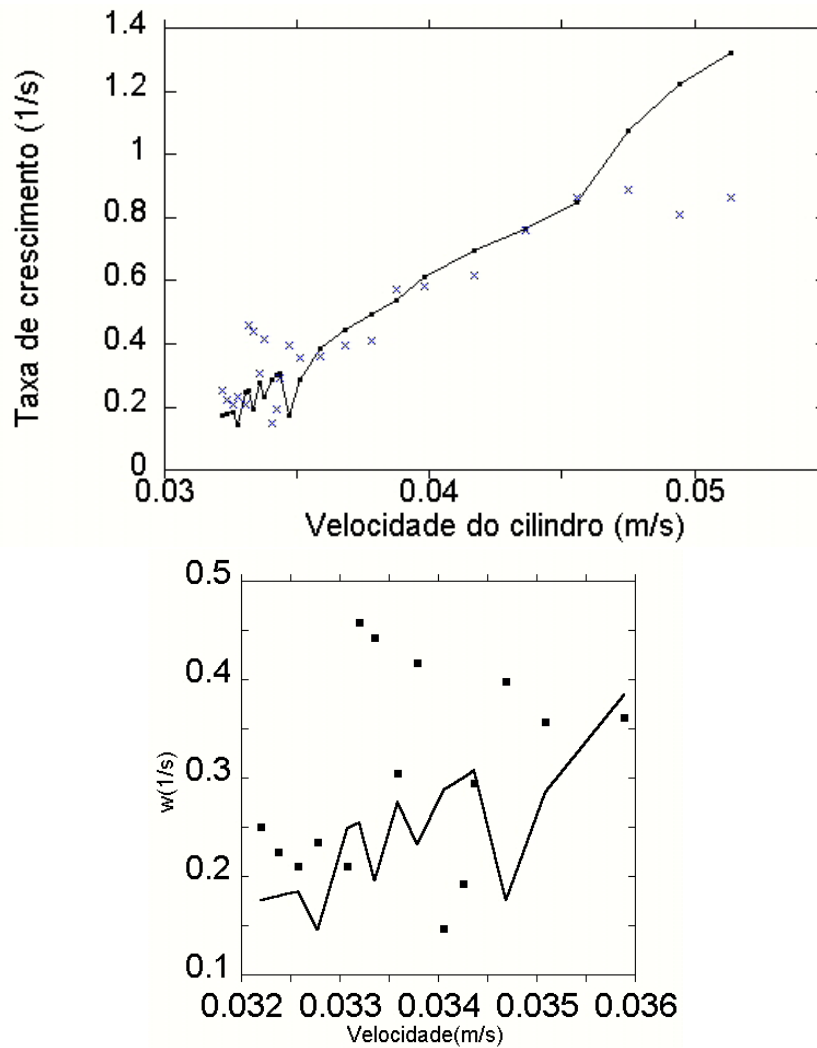


Figura 6.8: Representação da taxa de crescimento em função da velocidade do cilindro para $b_o = 800\mu m$. A linha representa a curva teórica dada pela Eq.6.3 e os pontos representam os dados experimentais. O gráfico menor detalha os pontos próximos a bifurcação.

Observa-se que os dados experimentais ajustam-se bem, na média, ao previsto pela curva teórica para velocidades próximas à bifurcação e que, surpreendentemente, mesmo para velocidades altas, onde a equação para ω , em princípio não é válida, há uma boa concordância com os dados experimentais.

Como a equação para a taxa de crescimento, depende da função $F(Ca)$ que

possui três parâmetros ajustáveis, usamos para esses parâmetros, os mesmos valores usados no ajuste da posição média da interface. Desta forma, os ajustes mostrados nas figuras 6.7 e 6.8 não possuem nenhum parâmetro livre. Isso mostra uma excelente consistência qualitativa dos resultados experimentais com o modelo teórico utilizado. Quantitativamente, observamos para velocidades próximas à bifurcação uma oscilação nos dados experimentais para ω . Aparentemente, essa oscilação se deve a flutuações observadas no vetor de onda e que não estão previstas no modelo de campo médio utilizado no tratamento da termodinâmica de não-equilíbrio. Assim sendo, a Eq.4.55, ajusta-se em média aos dados experimentais próximos à bifurcação(ver detalhe nas figuras 6.7 e 6.8). Logo, considerando que não foram utilizados parâmetros livres, podemos dizer que no limite de validade de uma teoria de campo médio, o acordo dos nossos dados experimentais com o modelo teórico utilizado é bastante consistente. Em velocidades mais altas, os dados experimentais demonstram claramente a validade do modelo teórico, ainda que qualitativamente. Podemos então concluir que o modelo teórico usado com a modificação nele introduzida, que consiste em obter os valores para os parâmetros da função $F(Ca)$ adequados ao tipo de fluxo existente em nosso sistema, descreve adequadamente o experimento realizado, podendo assim ser utilizado em estudos experimentais mais profundos e mais detalhados no futuro.

Capítulo 7

Conclusão

Verificamos que o tipo de bifurcação presente em nosso sistema é supercrítica. A amplitude da solução cresce suavemente a partir de zero quando o parâmetro de controle se afasta de seu ponto de bifurcação.

A seleção do padrão não ocorre nos instantes iniciais para regimes de velocidades próximas à bifurcação. Nessas condições vários modos instáveis coexistem. Esse modos não necessariamente prevalecem quando o padrão está definido. Em altas velocidades, aparentemente, a seleção do padrão ocorre nos instantes iniciais de sua evolução .

Nossos resultados mostram uma boa consistência com as previsões teóricas. Isso demonstra a viabilidade do modelo teórico utilizado, sujeito à modificação que introduzimos na função empírica que iguala os fluxos no cilindro.

Como perspectivas, esse trabalho deixa aberto a possibilidade de realizarmos os seguintes estudos:

- Estudo de precursores da instabilidade.
- Caracterização da quebra da analiticidade do recuo da interface na bifurcação.
- Seleção de modos próximos à bifurcação.
- Seleção de modos no regime não-linear.
- Estudos de instabilidades secundárias

Referências Bibliográficas

- [1] Ilya Prigogine. *Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes*. John Wiley, New York, 1967.
- [2] J. D. Tritton. *Physical Fluid Mechanics*. Oxford Science Publications, 2 edition, 1988.
- [3] Grégoire Nicolis and Ilya Prigogine. *Exploring Complexity*. Freeman, New York, NY, 1989.
- [4] A. B. Ezersky M. I. Rabinovich and P. D. Weidman. *The Dynamics of Patterns*. World Scientific, 2000.
- [5] Orlando Abreu Gomes. Estudo da dinâmica nemático-isotrópica plana e celular no cristal líquido 8cb. tese de doutorado, UFMG, 1999.
- [6] H. Thomé V. Hakim, M. Rabaud and Y. Couder. Directional growth in viscous fingering. *Proceedings of a NATO Advanced Research Workshop: New Trends in Nonlinear Dynamics and Pattern Forming Phenomena: The Geometry of Nonequilibrium*, (237), 1988.
- [7] G. Nicolis and I. Prigogine. *Self-Organization in Nonequilibrium Systems*. Wiley, New York, 1977.
- [8] Nelson Flieder Ferrara e Carmen P. Cintra do Prado. *Caos, uma introdução*. Editora Edgard Blucher Ltda, São Paulo- S.P., 1994.
- [9] P. Glansdorff et all. *Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations*. Wiley, New York, 1971.

- [10] P. Coulet and G. Iooss. Instabilities of one-dimensional cellular patterns. *Phys. Rev. Lett.*, 64:866–869, 1990.
- [11] M. Rabaud S. Michalland and Y. Couder. Instabilities of the upstream meniscus in directional viscous fingering. *J. Fluid Mech.*, 312:125–148, 1996.
- [12] T. Podgorski C. Counillon, L. Daudet and L. Limat. Dynamics of a liquid column array under periodic boundary conditions. *Phys. Rev. Lett.*, 80(10):2117–2120, march 1998.
- [13] L. Fourtune H. Z. Cummins and M. Rabaud. Successive bifurcations in directional viscous fingering. *Phys. Rev. E*, 47(3):1727–1738, march 1993.
- [14] G. I. Taylor. Cavitation of a viscous fluid in narrow passages. *J. Fluid Mech.*, 16:595–619, 1963.
- [15] P. G. Saffman and Sir G. Taylor. The penetration of a fluid into a porous medium or hele-shaw cell containing a more viscous liquid. *Proc. Roy. Soc.*, A(245):312–329, 1958.
- [16] Ubirajara Agero Batista. Formação de padrões na interface ar-óleo. dissertação de mestrado, UFMG, fevereiro 1998.
- [17] A. M. Turing. The chemical basis of morphogenesis. *Proc. Roy. Soc.*, 37:B237, 1952.
- [18] M. Christina M. Bonato. Assimetrias e destinos: no mundo dos microrganismos. www.biologianaweb.com.
- [19] S. R. de Groot and P. Manzur. *Non-Equilibrium Thermodynamics*. Dover Publications, New York, 1983.
- [20] G. Zocchi P. Tabeling and A. Libchaber. An experimental study of the saffman-taylor instability. *J. Fluid Mech.*, 177:67–82, 1987.
- [21] L.O. Ladeira e O.N. Mesquita J.M.A Figueiredo, M.B.L. Santos. Transient dynamics of a cellular front. instability during directional solidification. *Phys. Rev. Lett.*, 71(26), 1993.