

Felipe Galvão Rafael Magalhães

*Estudo da Formação e Seleção de Padrões
na Equação de Swift-Hohenberg*

Belo Horizonte

2010

Felipe Galvão Rafael Magalhães

*Estudo da Formação e Seleção de Padrões
na Equação de Swift-Hohenberg*

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador:
Prof. Dr. Ronald Dickman

UFMG

Belo Horizonte

2010

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Aprovada por:

Prof. Dr. Sr.
Coordenador da Biblioteca

Prof. Dr. Sr.
Coordenador do Programa de
Pós-Graduação em Física

Prof. Dr. Sr.
Chefe do Departamento de Física

Resumo

Nós estudamos numericamente a seleção do padrão na equação de Swift-Hohenberg com condição de contorno periódica. Duas abordagens foram utilizadas para a análise da evolução do padrão: a contagem de defeitos em função do tempo e a determinação do modo dominante no espaço de Fourier escolhido pelo sistema, a partir de diferentes condições iniciais. Pudemos comprovar que o intervalo de estabilidade do padrão é limitado por uma instabilidade secundária e que o decaimento do número de defeitos segue uma dependência temporal em lei de potência, não sendo causado por aniquilação de pares. Buscamos, ainda, o controle do padrão através de um esquema de realimentação de um modo diferente do mais instável.

Palavras-chave: convecção, padrões, instabilidade hidrodinâmica

Abstract

We study numerically the pattern selection process in the Swift-Hohenberg equation with periodic boundary conditions. Two approaches were used for analyzing the emergence of the pattern: counting defects as a function of time and the determination of the dominant mode in Fourier space selected by the system, starting from diverse initial conditions. We find that the region of stability for patterns is limited by a secondary instability (the Eckhaus instability). The number of defects decays as a power-law with time. Although pairwise annihilation of defects should in principle generate power-law decay, this mechanism does not appear to apply in the present case. We seek, as well, to control the pattern through a feedback scheme, to selectively stabilize a mode different from the one with the highest growth rate.

Keywords: convection, patterns, hydrodynamic instability

A meu pai,

Agradecimentos

Agradeço à minha família (pais, irmão e demais) pela motivação nos momentos difíceis e apoio incondicional. Também agradeço à Carol pela presença fundamental e constante, mesmo quando separados por milhares de quilômetros.

Agradeço ao Dickman pelo exemplo de cientista, pelas conversas esclarecedoras e pelo direcionamento ao longo dessa pesquisa. Aos professores, agradeço pelos ensinamentos e pela paciência, virtude que se destaca no professor Mário Sérgio, a quem sou especialmente grato.

Aos amigos do Sete Verde (dentre os quais deve-se destacar o Mangos, pela amigável convivência diária desde o cumprimento matinal até o noturno duelo eletrônico), agradeço pelos momentos de descontração e inúmeras discussões de cunho pseudo-filosófico e relevância indiscutível, seja na sala do café, na sala de estudos, na lista de emails ou lá em casa mesmo. A esses, também, e aos demais colegas de curso, sou grato por compartilharem comigo o conhecimento e as dúvidas ao longo de minha formação. Agradeço aos amigos de Nepré, em particular do NoBonus e da “Turma”, por manterem os momentos mais agráveis do passado ainda presentes.

Lista de Figuras

1	Problema de Rayleigh-Bénard (repouso)	p. 12
2	Problema de Rayleigh-Bénard (convecção)	p. 12
3	Estabilidade dos Rolos de Convecção	p. 21
4	Instabilidade de Eckhaus	p. 38
5	Método de Euler	p. 43
6	Método Runge-Kutta	p. 44
7	Evolução da configuração por integração numérica da equação de Swift-Hohenberg.	p. 49
8	Esquema de Rolos	p. 49
9	Limiar de defeitos	p. 50
10	Decaimento de defeitos	p. 50
11	Decaimento de defeitos com limiar fixo	p. 51
12	Modulações no Perfil	p. 51
13	Expoente γ	p. 52
14	Contagem de Defeitos para Diferentes ϵ	p. 53
15	Dinâmica da Posição de Defeitos	p. 53
16	Espectro de Potências Típico	p. 54
17	Espectro de Potências para Modo Estável	p. 55
18	Espectro de Potências para Modo Estável	p. 56
19	Seleção do Padrão	p. 56
20	Seleção do Padrão (detalhe)	p. 57
21	Região de Estabilidade	p. 57

Conteúdo

1	Introdução	p. 10
2	Convecção e Instabilidade	p. 11
2.1	Surgimento da Instabilidade de Rayleigh-Bénard	p. 11
	Discussão Qualitativa: A Física do Processo	p. 11
	Discussão Semi-quantitativa: Análise Dimensional	p. 12
	Análise de Instabilidade: Modelo Simplificado	p. 14
2.2	Equações de Movimento e Região de Estabilidade	p. 17
3	Padrões	p. 22
3.1	Tratamento Linear e Razão de Aspecto	p. 22
3.2	A Equação de Swift-Hohenberg	p. 25
3.3	Soluções Estacionárias	p. 26
3.4	Formalismo de Envelope	p. 31
	Dedução da Equação de Envelope	p. 31
	Solução Estacionária Modulada	p. 35
	Instabilidade de Eckhaus: Uma Instabilidade Secundária	p. 36
4	Métodos Numéricos	p. 39
4.1	Integração Espectral	p. 39
4.2	Método de Euler	p. 42
4.3	Método Runge-Kutta	p. 43
4.4	Ruído Branco Aditivo	p. 45

5 Resultados	p. 48
5.1 Decaimento dos Defeitos	p. 49
5.2 Seleção dos Modos	p. 53
6 Considerações finais	p. 58
Referências	p. 59

1 *Introdução*

Instabilidades surgem quando um parâmetro de controle passa por um valor crítico tal que o estado, até então estável, passa a ser instável, e o sistema deve encontrar um novo regime estacionário. Esse tipo de processo é bastante comum no campo de hidrodinâmica, sendo o principal exemplo a instabilidade de Rayleigh-Bénard. Nesse caso, o regime estacionário é o conhecido fenômeno de convecção¹. Para as condições especiais dessa instabilidade, o regime é caracterizado pela formação de rolos de convecção, onde o fluido apresenta um movimento circular entre placas horizontais que mantêm uma diferença de temperatura entre si. Tal gradiente de temperatura deve ser suficientemente grande para provocar a mudança de estabilidade do estado em repouso, sendo então um dos principais fatores na definição de nosso, já mencionado, parâmetro de controle. Porém, para definir um gradiente “grande o suficiente” precisamos compará-lo aos demais processos, dissipações que tendem a estabilizar o sistema. É nesse regime de rolos que podemos falar da dinâmica de um padrão, onde dois rolos consecutivos (com circulação contrária) definirão uma célula da estrutura do padrão. A busca por um estado com células de tamanhos iguais equivale, então, a busca de um padrão ideal. Mas temos ainda que esse estado estacionário encontrado pelo sistema pode não ser estável a flutuações. Assim podemos ter instabilidades secundárias que deverão delimitar a região de estabilidade para o estado estacionário decorrente da instabilidade primária.

Neste trabalho apresentaremos a análise teórica do surgimento e dinâmica do processo de instabilidade de Rayleigh-Bénard (capítulo 2) e de uma equação que modela seu comportamento, no que concerne a formação do padrão (capítulo 3). Tal equação modelo é a equação de Swift-Hohenberg que será estudada numericamente ao final deste texto, nos capítulos 4 e 5, onde estudamos os métodos utilizados e apresentamos os resultados das simulações, respectivamente. Os resultados e conclusões são discutidos no capítulo final.

¹Usaremos neste texto instabilidade e convecção de Rayleigh-Bénard como sinônimos.

2 *Convecção e Instabilidade*

A convecção é uma das instabilidades mais presentes na natureza e de maior interesse didático, dado seu intuitivo processo físico. É na base de sua representação mais tradicional, a convecção de Rayleigh-Bénard (ver referências em [2, 3]), que trataremos aqui do surgimento da instabilidade e apresentaremos as condições para estabilidade do fluxo estacionário na forma de rolos de convecção.

2.1 Surgimento da Instabilidade de Rayleigh-Bénard

Discussão Qualitativa: A Física do Processo

Na montagem de Rayleigh-Bénard temos o fluido confinado entre uma superfície plana horizontal inferior submetida a uma temperatura T_b , e uma superfície superior paralela à primeira que encontra-se à temperatura T_t , tal que $\Delta T = T_b - T_t > 0$. As superfícies são separadas por uma distância h , como mostra a figura 1. Dada uma diferença de temperatura ΔT não muito grande, de forma que o fluido ainda estará em repouso, temos a estratificação da temperatura no fluido e, conseqüentemente, da densidade do mesmo. Assim, o fluido mais denso encontra-se acima do menos denso devido a temperatura maior na placa inferior, e respeitando a Lei de Fourier para condução de calor, em um sistema com comprimento horizontal infinito o perfil de temperatura será $T(z) = T_b - \beta z$, onde z é a coordenada vertical de posição e $\beta = \Delta T/h$ é o gradiente de temperatura. Parece-nos bastante intuitivo que tal sistema está num estado instável, uma vez que a energia potencial pode ser diminuída com a troca de posição do fluido denso com o fluido menos denso, abaixo. Partindo disso, desenvolveremos durante esta seção uma análise das condições para que a instabilidade comece, e sua evolução é, basicamente, o assunto de todo este trabalho.

Tomemos um elemento de fluido menos denso que começou um movimento vertical devido a alguma flutuação. Ele sentirá uma diferença de densidade do fluido ao seu redor

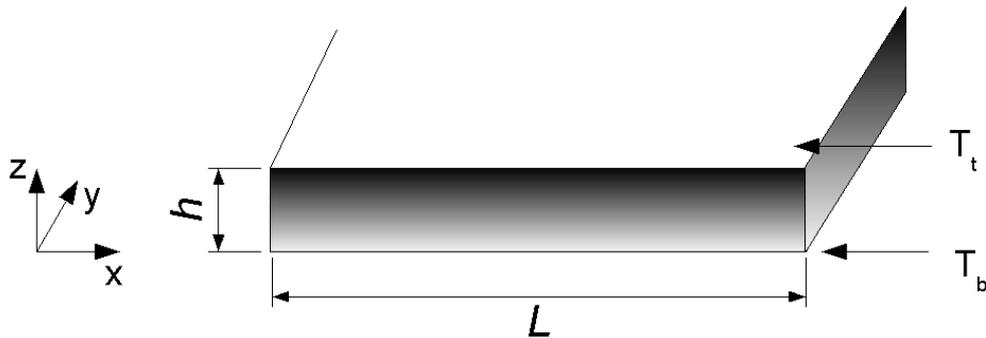


Figura 1: *Problema de Rayleigh-Bénard (repouso): Estratificação da temperatura e densidade para baixos divergentes de temperatura.*

e, portanto, um empuxo. Ou seja, a perturbação será amplificada. Entretanto, existem fatores dissipativos envolvidos que tendem a estabilizar o processo: a viscosidade do fluido se opondo ao empuxo e a condução térmica diminuído a diferença de temperatura, e portanto de densidade, entre a flutuação e a da região que a cerca. Sendo assim, somente para um gradiente de temperatura suficientemente grande, o sistema se tornará instável. Uma vez que a instabilidade começa, a dissipação leva o fluido a um fluxo estacionário na forma de rolos. Para um sistema com largura infinita, os rolos são paralelos e uniformes. Uma célula unitária será definida como dois rolos, já que rolos consecutivos tem circulações contrárias. O comprimento da célula é o comprimento de onda $\lambda_c = 2\pi/k_c$, como mostra a figura 2.

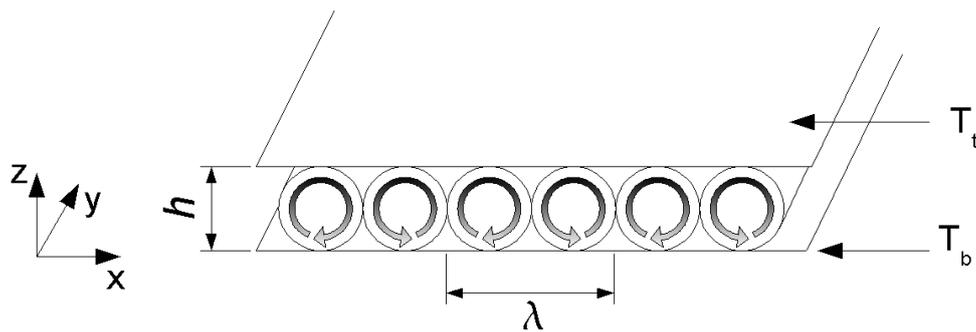


Figura 2: *Problema de Rayleigh-Bénard (convecção): Rolos estacionários são formados pela instabilidade.*

Discussão Semi-quantitativa: Análise Dimensional

Apesar dos argumentos mencionados anteriormente, precisamos de uma afirmação mais concreta que “um gradiente suficientemente grande”. Nesse sentido, uma discussão

dimensional é suficiente para fornecer-nos um parâmetro que possa medir quão grande é o gradiente de temperatura em relação aos outros processos relevantes: a viscosidade e a difusão de calor. Esse parâmetro é o número de *Rayleigh* (Ra ou, simplesmente, r), que será nosso parâmetro de controle.

O gradiente de temperatura, por meio da estratificação da densidade, gera um empuxo sobre um elemento de fluido próximo a placa inferior. Esse empuxo nos leva ao tempo característico gasto para que este elemento de fluido chegue até a placa superior, pelas relações que se seguem:

$$\begin{aligned} \frac{F}{V} = f &= \frac{m}{V} a \\ &\sim \rho \frac{h}{\tau_B^2} \\ \Delta\rho g &\sim \rho \frac{h}{\tau_B^2} \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde usamos a força por volume resultante $f = \Delta\rho g$, dada pela diferença entre o empuxo e a força peso.

Tomemos, ainda, o coeficiente de expansão térmica, α , dado por:

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dT} \\ \Rightarrow \quad \Delta\rho &= \rho(h) - \rho(0) \cong \alpha\rho\Delta T \end{aligned}$$

Substituindo isso na equação 2.1, temos:

$$\begin{aligned} g\alpha\rho\Delta T &\sim \rho \frac{h}{\tau_B^2} \\ \tau_B^2 &\sim \frac{h}{g\alpha\Delta T} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Os fenômenos dissipativos, condução de calor e a viscosidade, são dados por equações de difusão, da forma:

$$\begin{aligned} \partial_t T &= k\nabla^2 T \\ \partial_t \Omega &= \nu\nabla^2 \Omega \end{aligned}$$

onde k é a difusividade térmica e ν a viscosidade cinética. Por análise dimensional similar a feita acima, podemos escrever:

$$\tau_\theta \sim h^2/k$$

$$\tau_v \sim h^2/\nu$$

Temos, então, que se $\tau_B^2 \gg \tau_\theta \tau_v$ a instabilidade não terá tempo de crescer, antes que a viscosidade e a condução de calor uniformizem a velocidade e a temperatura, respectivamente. Definimos, então, o *parâmetro de Rayleigh* (r ou Ra):

$$\frac{\tau_\theta \tau_v}{\tau_B^2} = \frac{\alpha g \Delta T h^3}{k \nu} \equiv Ra = r \quad (2.3)$$

A instabilidade surgirá para um número de Rayleigh superior a Ra_c , independentemente do fluido em questão. A partir de Ra_c os processos dissipativos não têm tempo de “frear” uma flutuação antes que ela seja amplificada. A dissipação leva o fluxo a uma saturação, sendo o estado final do fluido um fluxo estacionário.

Outro parâmetro de interesse no processo é o número de *Prandtl*, Pr . Ele é dado pela razão entre a viscosidade e a difusividade térmica, definindo qual desses processos dissipativos domina. Podemos, então, escrever:

$$\frac{\tau_\theta}{\tau_v} = \frac{\nu}{k} \equiv Pr$$

Análise de Instabilidade: Modelo Simplificado

Inspirados pela discussão anterior, buscamos, nesta análise, caracterizar a instabilidade analisando uma flutuação na temperatura numa parcela do fluido e o consequente movimento vertical desta. Outras simplificações serão usadas durante a discussão e resultados mais precisos serão alcançados na próxima seção, entretanto esta análise é interessante por apresentar o processo de maneira intuitiva.

Tomemos o fluido em repouso com variação linear da temperatura, como citado no início deste capítulo:

$$T(z) = T_0 \equiv T_b - \beta z$$

onde $\beta = \Delta T/d$. A densidade varia da forma:

$$\rho_0(z) = \rho [T_0(z)] = (1 + \alpha \beta z) \rho_b$$

O índice b é relativo a placa inferior (“bottom”), e o índice 0 indica o fluido em repouso.

Consideremos que uma flutuação na temperatura tenha surgido no fluido, tal que:

$$T(z) = T_0(z) + \theta(x)$$

Aqui incluímos a principal simplificação: θ independente de z . Apesar de evitar contas mais complicadas isso representa uma situação irreal, sendo as conclusões desta análise inicial bastante limitadas. Além disso, isso nos leva a um sistema *unidimensional*, no sentido de que os campos de interesse (a velocidade \vec{u} e a flutuação da temperatura θ dependem apenas de x . A justificativa física para tal simplificação é que apenas a diferença de densidade entre elementos de fluido na mesma altura influenciam no empuxo, assim um modelo com dependências espaciais no plano horizontal deveria ser suficiente.

Uma parcela do fluido sente a força peso e a pressão do fluido ao redor. Em equilíbrio temos a força resultante igual a zero:

$$\frac{\vec{F}}{V} = \vec{f} = 0 = -\nabla p - \rho g \hat{z}$$

então, na coordenada vertical:

$$-\partial_z p = \rho_0(z)g$$

Na presença de uma perturbação na temperatura θ , a densidade passa a seguir uma nova função em z , $\rho(z)$. Dessa forma a força por volume já não está mais em equilíbrio:

$$\begin{aligned} -\partial_z p - \rho g &= [\rho_0(z) - \rho(z)]g = g[\rho_b(1 + \alpha\beta z) - \rho_b(1 + \alpha\beta z - \alpha\theta)] \\ &= \rho_b \alpha g \theta \end{aligned}$$

assim, a equação de evolução para a componente vertical da velocidade é dada por:

$$\partial_t u_z = \nu \partial_x^2 u_z + \alpha g \theta \quad (2.4)$$

O segundo termo do lado direito da igualdade advém da viscosidade, dependendo da segunda derivada no espaço como citado anteriormente. Desprezamos a dependência vertical da flutuação no outro termo que representa o empuxo.

Temos ainda a equação de calor para temperatura:

$$\partial_t T + (\vec{u} \cdot \nabla)T = \kappa \partial_x^2 T$$

mas podemos facilmente comprovar que: $\partial_t T = \partial_t \theta$; $(\vec{u} \cdot \nabla)T = u_z \partial_z T_0 = -\beta u_z$; $\partial_x^2 T = \partial_x^2 \theta$. Portanto,

$$\partial_t \theta - \beta u_z = \kappa \partial_x^2 \theta$$

reescrevendo,

$$\partial_t \theta = \kappa \partial_x^2 \theta + \beta u_z \quad (2.5)$$

É interessante notar aqui, que teremos a amplificação da flutuação para $\beta \neq 0$, uma vez que as equações 2.4 e 2.5 serão acopladas. Entretanto, como veremos posteriormente, o divergente deverá ser positivo e maior que um certo valor para que a instabilidade surja. Esse erro é fruto da simplificação que utilizamos.

Podemos analisar estas equações por perturbações da forma de modos de Fourier [4] se supomos um sistema horizontalmente ilimitado. Ou seja:

$$u_z = U(t) \cos kx, \quad \theta = \Theta(t) \cos kx$$

Se supomos crescimento exponencial de $U(t)$ e $\Theta(t)$, ou seja, $U(t) = U e^{st}$ e $\Theta(t) = \Theta e^{st}$, onde U e Θ são constantes. Assim as equações 2.4 e 2.5 ficam:

$$(s + \nu k^2)U - \alpha g \Theta = 0$$

$$(s + \kappa k^2)\Theta - \beta U = 0$$

ou, reescrevendo esse sistema algébrico em forma matricial:

$$\begin{pmatrix} s + \nu k^2 & -\alpha g \\ -\beta & s + \kappa k^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ \Theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

logo, para que exista uma solução não-trivial, o determinante deve ser nulo:

$$\begin{vmatrix} s + \nu k^2 & -\alpha g \\ -\beta & s + \kappa k^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (2.7)$$

ou equivalentemente:

$$s^2 + (\nu + \kappa)k^2 s + \kappa \nu k^4 - \alpha g \beta = 0$$

assim, a taxa de crescimento s está relacionada ao vetor de onda da perturbação e contém

o parâmetro de controle β . As raízes da equação serão:

$$\begin{aligned} s = s_{\pm} &\equiv -\frac{1}{2}(\nu + \kappa)k^2 \pm \sqrt{\Delta} \\ \Delta &\equiv (\nu - \kappa)^2 k^4 + 4\alpha g \beta \\ s_+ + s_- &\equiv \Sigma = -(\nu + \kappa)k^2 \\ s_+ s_- &\equiv \Pi = \kappa \nu k^4 - \alpha g \beta \end{aligned}$$

Não existem soluções instáveis oscilatórias, ou seja, com raízes complexas ($\Delta < 0 \Rightarrow \beta < 0$), pois uma vez que a parte real Σ continuará negativo, a perturbação será amortecida.

Os autovalores serão reais para $\beta > 0$ e, necessariamente, $s_- < 0$. Portanto, a instabilidade ocorre para $s_+ > 0$, ou seja, $\Pi < 0$, e estabilidade neutra para $s_+ = 0$, ou seja

$$\alpha g \beta = \kappa \nu k^4$$

Nesta análise simplificada, os modos com

$$k < \left(\frac{\alpha g \beta}{\kappa \nu} \right)^{1/4}$$

são sempre instáveis. Este resultado (errado, em geral) é modificado uma vez que levamos em conta o amortecimento devido a viscosidade na presença de cisalhamento horizontal ($\partial_z u_x$). Entretanto, este modelo representa bem a situação real para $k \gg \pi/h$. Isto porque, para um pequeno comprimento de onda, a célula de convecção será estreita, de forma que as dissipações associadas ao cisalhamento vertical e ao gradiente de temperatura horizontal dominarão.

2.2 Equações de Movimento e Região de Estabilidade

Nesta seção apresentaremos as equações que regem a convecção de Rayleigh-Bénard. Obviamente, o ponto de partida são as equações de Navier-Stokes para o campo \vec{u} (a velocidade do fluido) e de calor. Essas são dadas, respectivamente, por:

$$\rho \partial_t \vec{u} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = \rho \vec{X} - \nabla p + \eta \nabla^2 \vec{u} \quad (2.8)$$

$$\rho \partial_t(c_V T) + \rho \vec{u} \cdot \nabla(c_V T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \Phi - p \nabla \cdot \vec{u} \quad (2.9)$$

sendo, c_V o calor específico a volume constante, k a condutividade calorífica, \vec{X} a força externa por massa sobre o fluido e Φ a taxa de dissipação por volume, que é da forma:

$$\Phi = 2\eta \sigma_{ij} \sigma_{ij} \quad \text{onde} \quad \sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_i u_j + \partial_j u_i)$$

Trataremos um fluido incompressível, tal que:

$$\nabla \cdot \vec{u} = \partial_j u_j = 0$$

onde usamos que índices repetidos são somados. Assim, o último termo na equação 2.9 será nulo.

Quando ainda em repouso a densidade é dada pela equação:

$$\rho = \rho_0 [1 - \alpha(T - T_0)]$$

aqui, o índice em ρ_0 e T_0 refere-se a posição $z = 0$.

Neste ponto, é conveniente introduzirmos a aproximação de Boussinesq [3]. Para fluidos geralmente utilizados em laboratório, ou mesmo para aqueles comumente presentes na natureza, é válido afirmar que para uma pequena variação de temperatura, as conseqüentes variações de η , c_v , k , α e da densidade são ordens de grandeza menores, podendo ser desprezadas. Entretanto, a variação da densidade é mantida, apenas, no termo do empuxo: $\rho X_i = \rho_0(1 - \alpha \Delta T)g$.

Portanto, a equação de Navier-Stokes pode ser escrita, na aproximação de Boussinesq, como:

$$\partial_t u_i + u_j \partial_j u_i = -\frac{1}{\rho_0} \partial_i p - \left(1 + \frac{\delta \rho}{\rho_0}\right) g \delta_{i,3} + \nu \nabla^2 u_i \quad (2.10)$$

com $\frac{\delta \rho}{\rho_0} = -\alpha(T - T_0)$

Trataremos a equação de calor com c_v e k constantes. Podemos, ainda, desprezar o termo Φ em comparação ao termo de condução de calor. Isso vale porque a velocidade é da ordem $[\alpha g \Delta T d]^{1/2}$, então $\Phi \sim \eta(u/d)^2 \sim \eta \alpha g \Delta T / d$ enquanto o termo de condução de calor é de ordem $k \Delta T / d^2$. A razão entre a fonte Φ e o termo de condução de calor é, então, de ordem $\eta \alpha g d / k \sim 10^{-7}$ ou 10^{-5} para $d \sim 1$ cm, em fluidos típicos (água, mercúrio).

A equação de calor será:

$$\partial_t T + u_j \partial_j T = \kappa \nabla^2 T \quad (2.11)$$

onde $\kappa = k/\rho_0 c_v$ é a difusividade térmica.

Existe uma solução estacionária simples para as equações 2.10 e 2.14:

$$u_j \equiv 0 \text{ e } T = T_0 - \beta z \beta = \Delta T/d \quad (2.12)$$

Nesta situação a pressão segue:

$$\partial_z p = -\rho g$$

com o perfil linear de temperatura:

$$\rho = \rho_0[1 + \alpha\beta z] = \rho_0[1 + \alpha(T_0 - T)]$$

e, portanto:

$$p = p_0 - g\rho_0(z + 1/2\alpha\beta z^2)$$

este é o estado inicial estacionário do fluido.

Como mencionado anteriormente, para números de Rayleigh maiores que r_c essa solução será instável. Isso pode ser verificado por uma análise perturbativa linear, cujos passos principais são apresentados resumidamente abaixo.

Podemos escrever as equações de movimento linearizadas da forma:

$$\partial_t u_i = -\frac{1}{\rho_0} \partial_i(\delta p) - \theta g \delta_{i,3} + \nu \nabla^2 u_i \quad (2.13)$$

$$\partial_t \theta = u_j \beta + \kappa \nabla^2 \theta \quad (2.14)$$

onde u_i é agora uma perturbação à solução trivial, e θ é a perturbação da temperatura, sendo esta dada por $T' = T_0 - \beta z + \theta$. Após alguma álgebra é possível encontrar as equações de movimento para a componente z das perturbações, da forma:

$$\begin{aligned} \partial_t \zeta &= \nu \nabla^2 \zeta \\ \partial_t \nabla^2 w &= g\alpha(\partial_x^2 + \partial_y^2)\theta + \nu \nabla^4 w \end{aligned}$$

onde $w \equiv u_z$ e $\zeta \equiv \Omega_z = (\nabla \times \vec{u})_z$. Assim, a equação de calor é escrita como:

$$\partial_t \theta = \beta w + \kappa \nabla^2 \theta$$

Para fronteiras rígidas e temperaturas fixas nas placas, temos as condições de $\theta = w = u_i = 0$ para $z = 0, d$ e $i = x, y, z$. Além disso, por consequência temos que $\nabla \cdot \vec{u} = 0 \Rightarrow \partial_z w = 0$ nas fronteiras.

Mas,

$$\zeta = \Omega_z = \partial_x u_y + \partial_y u_x$$

portanto $\zeta = 0$ nas fronteiras.

A análise de estabilidade se dá através da suposição de perturbações da forma:

$$\{w, \theta, \zeta\} = \{W(z), \Theta, Z(z)\} \exp[i(k_x x + k_y y) + st] \quad (2.15)$$

Não iremos adiante nesta análise, nos limitando a apresentar as consequências mais importantes. Entretanto, podemos notar que uma perturbação desta forma crescerá no tempo para valores positivos de s . Ou definindo um parâmetro adimensional, $\sigma \equiv sh^2/\nu$, que deve ser igualmente positivo para que surja a instabilidade¹. É esta condição que nos leva ao valor de r_c .

Temos que para $r < r_c$, σ é negativo para qualquer k , mas em r_c existe um único valor $|k| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = k_c$ tal que $\sigma(k_c) = 0$. Esse vetor de onda crítico é da ordem do inverso da distância das placas, ou seja, $k_c \sim 1/h$. De fato, em $r = r_c$ temos estabilidade neutra².

Para valores de $r > r_c$, perturbações com $k \neq k_c$ podem se tornar instáveis. Duas situações são possíveis, $k < k_c$ e $k > k_c$. No primeiro caso, os rolos terão uma forma mais achatada, sendo a altura limitada pelas placas e o comprimento de onda maior que no caso ideal (k_c). O número de Rayleigh crítico em função de k , $r_c(k)$, nesse caso, será proporcional a k^{-2} . Já no segundo caso, os rolos são finos, com excesso de movimento vertical. Isso causa um aumento na contribuição do cisalhamento vertical e no gradiente de temperatura horizontal, provocando uma dependência $r_c(k) \propto k^4$. Assim, a região de instabilidade é definida pela linha pontilhada na figura 3 e, nas proximidades da transição, s é dado por:

$$\tau_0 s = \epsilon - \xi_0^2 (k - k_c)^2$$

Sabemos, então, que, para sistemas na região instável ($r > r_c(k)$), uma flutuação pode crescer exponencialmente, esse é o estágio linear. Porém, o sistema pode alcançar um movimento estacionário sendo o crescimento inicial saturado por dissipações. Uma solução estacionária é, então, alcançada na forma de rolos de convecção. Entretanto,

¹ σ é comumente chamado de taxa de crescimento da perturbação

² Não confundir k , módulo do vetor de onda que será usado a partir deste ponto, com k , a condutividade calorífica usado anteriormente

a estabilidade destas soluções não é garantida, sendo necessário avaliar a evolução de perturbações infinitesimais, podendo surgir instabilidades secundárias. A região para a qual os rolos são estáveis é definida como “balão de Busse” ([5], [6]), em homenagem a F. Busse que indentificou muitas dessas instabilidades secundárias. Esse região de instabilidade é representado na figura 3 para um sistema horizontalmente infinito.

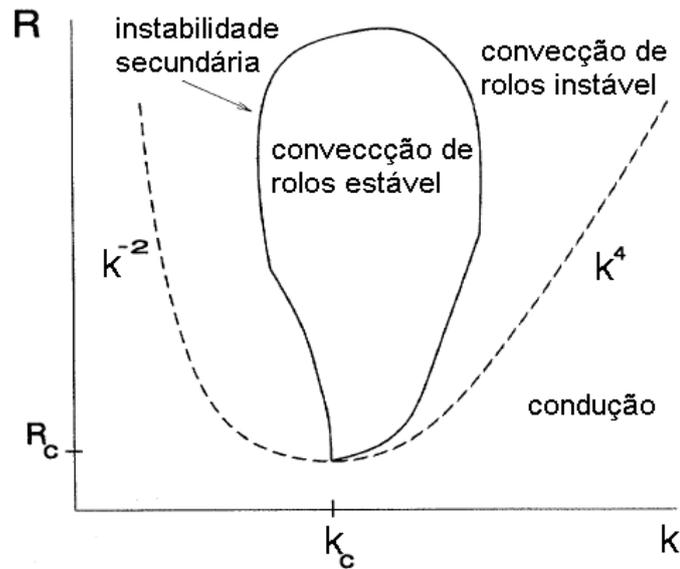


Figura 3: *Estabilidade dos Rolos de Convecção: Diagrama esquemático para convecção de Rayleigh-Bénard mostrando número de Rayleigh r por vetor de onda q . A linha sólida delimita a região de soluções não-lineares periódicas estáveis. Figura retirada de [5].*

Esta discussão da estabilidade do “padrão” de rolos será estendida e aprofundada no capítulo seguinte. Apresentaremos uma equação que servirá de modelo para este estudo, e é a partir dela que todo nosso trabalho numérico foi desenvolvido como veremos no capítulo 5.

3 *Padrões*

No estudo de padrões, muitas vezes lidamos com sistemas cuja estrutura espacial não é fixa no tempo. Nesse caso, a abordagem de sistemas dinâmicos dissipativos não é mais útil, sendo a análise mais sutil. Este é o caso de sistemas “fracamente confinados”, que trataremos, onde o número de modos interagindo é regido por efeitos de confinamento pela “razão de aspecto”, ao invés do número de processos físicos independentes, em contraposição aos sistemas dinâmicos dissipativos.

Primeiramente, discutiremos o comportamento

3.1 Tratamento Linear e Razão de Aspecto

Em sistemas que apresentam padrões espaciais não podemos desprezar o papel da fronteira fazendo-a tender a infinito. Isso porque as dimensões do padrão, ou seja, o comprimento de onda da modulação, não pode ser infinitesimalmente menor que o tamanho do sistema. Caso contrário, o próprio padrão seria imperceptível. O tamanho do sistema, então, deve ser considerado relativo ao comprimento de onda mais instável ($\lambda_c = 2\pi/k_c$). A relação L/λ_c é que define um sistema “fracamente confinado” como o que estamos interessados. Para tanto, o sistema deve ter $L \gg \lambda_c$, de forma que as fronteiras são pouco importantes e outras explicações são esperadas para o surgimento e a forma do padrão. Podemos classificar o tamanho do sistema mais quantitativamente com base na discussão que se segue.

Assumimos um sistema com fator de crescimento $\sigma(k, r) \in \mathbb{R}$, ou seja, a instabilidade é não oscilatória. Lembramos que r_c é definido como o mínimo da condição de estabilidade neutra, $\sigma(k, r) = 0$ em função de k . A instabilidade é chamada celular se $k_c \neq 0$. A condição de estabilidade neutra para uma perturbação com vetor de onda k , é dada por:

$$\epsilon = \xi_0^2(k - k_c)^2 \quad (3.1)$$

onde, $\epsilon = \frac{r-r_c}{r}$ e ξ_0 é o comprimento de coerência. Como pode ser verificado para convecção, em geral, $\xi_0 \sim 1/k_c$.

O número de graus de liberdade do sistema pode ser estimado de maneira ingênua calculando-se como o número de células elementares, supondo-as independentes. Para um sistema de tamanho L e com células de largura $\lambda_c/2 = \pi/k_c$ (ou seja, um comprimento de onda corresponde a duas células), o número de células será:

$$\Gamma = \frac{Lk_c}{\pi} \quad (3.2)$$

Aqui, Γ é a razão de aspecto intrínseca do sistema, uma vez que vale, apenas, para a instabilidade em questão, em k_c . Podemos, ainda, definir:

$$\Gamma = \frac{L}{h} \quad (3.3)$$

sendo que h é o tamanho do sistema na direção do processo de instabilidade, por exemplo, na convecção de Rayleigh-Bénard será a distância vertical entre as placas. Além disso, podemos relacionar h com k_c como sendo $h \sim 1/k_c$, já que h é da ordem do tamanho de uma célula elementar, e portanto, da ordem de λ_c , como mostrado na figura 2. Equação 3.3 pode então ser derivada da Equação 3.2 e define a razão de aspecto extrínseca que leva esse nome por depender apenas da geometria do sistema.

Esta forma simples, entretanto, superestima o número real de graus de liberdade quando próximo a transição. Isso se deve a correlação imposta pela coerência macroscópica. Para que isso seja entendido, tome a taxa de crescimento linear σ do modo k , dada por:

$$\tau_0\sigma = \epsilon - \xi_0^2(k - k_c)^2 \quad (3.4)$$

onde τ_0 é o tempo característico de relaxação de um modo instável típico. Tome o caso “unidimensional” (uma variável horizontal) com condições de contorno periódicas a uma distância L . Serão permitidos apenas vetores de onda múltiplos de $\delta k = 2\pi/L$. Pela Equação 3.4, a largura do intervalo de vetores de onda instáveis $[k_c - \Delta, k_c + \Delta]$ pode ser

encontrada, dado que σ deve ser positivo para que o modo seja instável.

$$\begin{aligned}
\sigma &> 0 \\
\epsilon - \xi_0^2(k - k_c)^2 &> 0 \\
\xi_0^2(k - k_c)^2 &< \epsilon \\
|k - k_c| &< \sqrt{\frac{\epsilon}{\xi_0^2}} = \frac{\sqrt{\epsilon}}{\xi_0} \\
\therefore \Delta &= \frac{\sqrt{\epsilon}}{\xi_0}
\end{aligned} \tag{3.5}$$

E o número de modos excitáveis Δn , será:

$$\Delta n = 2 \frac{(2\Delta)}{\delta k} = 2 \frac{L}{\pi \xi_0} \sqrt{\epsilon} = 2\Gamma \sqrt{\epsilon} \tag{3.6}$$

onde o primeiro fator 2 leva em conta os dois modos, com k positivo e negativo, e usamos $\xi_0 \sim 1/k_c \sim h$. Assim no estágio linear, isso é, próximo a transição os graus de liberdade são reduzidos por um fator de $\sqrt{\epsilon}$ em relação a estimativa puramente geométrica.

Podemos interpretar uma solução de pacote de onda, com vários estados excitados, como uma modulação da solução periódica de vetor de onda k_c . Voltando para o espaço físico, vemos que a escala de comprimento típica da modulação é $\mathcal{O}(1/\sqrt{\epsilon})$.

A escala de comprimento diverge na transição, tornando o modo mais instável coerente sobre todo o sistema. Isso é análogo ao resultado de campo médio para fenômenos críticos, $\xi \sim |T - T_c|^{-1/2}$, onde ξ é o comprimento de correlação e T a temperatura. Após a transição, mais modos são excitados, e o comprimento de coerência é reduzido a:

$$\xi = \frac{\xi_0}{\sqrt{\epsilon}} \tag{3.7}$$

A relação entre os comprimentos ξ , L , e λ_c , define o regime de não-linearidade do sistema:

- Se $\xi \gg L$, o problema deve ser resolvido com o tamanho finito do sistema levado em conta. Sendo, então, ϵ pequeno teremos um regime de poucos graus de liberdade.
- $L > \xi \gg \lambda_c$, o regime é fracamente não-linear
- $L \gg \xi > \lambda_c$, o regime é fortemente não-linear

Para os casos em que $L > \xi$ (dois últimos), a ideia de padrões periódicos modulados

por um “envelope” passa a fazer sentido. Esta ideia será discutida analiticamente mais adiante neste capítulo.

3.2 A Equação de Swift-Hohenberg

A análise não linear das equações completas que descrevem a convecção é muito complicada. Para que seja feito algum avanço no entendimento dos processos que acontecem longe do equilíbrio, é comum utilizar-se de equações modelos. Em especial na modelagem de sistemas fracamente confinados, as dependências mais relevantes são as horizontais. Assim, podemos considerar modelos com uma ou duas dessas dimensões com as propriedades mais importantes do sistema sendo levadas em conta. Esse tipo de modelagem (com dimensões espaciais reduzidas) traz ainda vantagens computacionais (menos tempo gasto e dados armazenados), mas principalmente, torna a visualização muito mais fácil.

A forma desses modelos advém das equações completas, seja por algum tipo de dedução matemática, ou mesmo por argumentos qualitativos a respeito da correspondência entre suas propriedades. Assim motivados, apresentaremos, aqui, a equação de Swift-Hohenberg, que pode ser, de fato, deduzida das equações de movimento com aproximação de Boussinesq para convecção. Entretanto, nos limitaremos a introduzi-la e comprovar a sua compatibilidade com as equações originais no contexto da formação do padrão de rolos. Organizamos tais propriedades a seguir:

1. em $r = r_c$ surge uma instabilidade não oscilatória, com vetor de onda k_c finito;
2. para $\epsilon = \frac{r-r_c}{r_c} > 0$, a amplitude global da convecção é proporcional a $\epsilon^{1/2}$ (não linearidade cúbica) e,
3. a faixa de modos instáveis é da forma $(k_c - \delta k, k_c + \delta k)$, com $\delta k \propto \epsilon^{1/2}$; a taxa de crescimento tem a forma:

$$\sigma(k) = A\epsilon - B(k - k_c)^2 ;$$

4. o sistema tem simetria translacional e rotacional no plano $x - y$.

Essas condições juntas nos levam à equação de Swift-Hohenberg:

$$\tau_0 \partial_t u = (\epsilon - \xi^4 (\nabla^2 + k_c^2)^2) u - gu^3 \quad (3.8)$$

ou de forma adimensionalizada:

$$\partial_t u(\vec{x}, t) = \epsilon u - (\nabla^2 + k_c^2)u - u^3$$

onde $\vec{x} \equiv (x, y)$. A adimensionalização se dá tal que as unidades de tempo e velocidades são escolhidas para eliminar os coeficientes que são, por sua vez, dependentes de ρ, κ, α , etc. Da forma, $t' \rightarrow t/\tau_0, \vec{x}' \rightarrow \vec{x}/\xi$ e $u' \rightarrow g^{1/2}u$.

Assim, a segunda propriedade é verificada diretamente, pois para uma solução estacionária com $k \sim k_c$ podemos escrever $0 = \epsilon|u| - |u|^3$, com soluções $|u| = 0$ e $|u| = \sqrt{\epsilon}$. Mas, como esperamos uma solução não trivial para $\epsilon > 0$, então somente a segunda solução é de interesse, que atesta exatamente o que queríamos demonstrar.

Podemos comprovar facilmente as propriedades restantes, supondo $u(\vec{x}, t) = e^{\sigma t} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ e linearizando a equação. Obteremos:

$$\sigma = \epsilon - (k^2 - k_c^2)^2$$

então, $\sigma \geq 0$ é possível apenas para $\epsilon \geq 0$, e, para que $\epsilon > 0$, $\delta k = k - k_c$ deve estar no intervalo $(-\sqrt{\epsilon}/2, \sqrt{\epsilon}/2)$. O fato da taxa de crescimento depender apenas do módulo de k já é suficiente para provar sua simetria rotacional.

A equação de Swift-Hohenberg traz uma grande simplificação ao problema de formação de padrões na convecção. Entretanto, ela não é suficiente para que o estudo fora de equilíbrio seja feito analiticamente, dada sua não linearidade. Sendo assim, será necessário ainda um estudo numérico, que faremos na base dos métodos apresentados no capítulo que se segue. Nossos resultados para esse estudo podem ser vistos no capítulo resultados. Ao longo do restante do presente capítulo, buscaremos soluções estacionárias e as condições de sua estabilidade.

3.3 Soluções Estacionárias

Nesta seção, buscaremos soluções estacionárias para equação de Swift-Hohenberg, apresentada na seção anterior. Esta solução será a base da dedução da equação de envelope e da análise perturbativa que fecham este capítulo.

Em geral, uma equação de evolução não linear pode ser escrita da forma:

$$\frac{du}{dt} = F_r(u) = \mathcal{L}_r(u) + \mathcal{N}(u) \quad (3.9)$$

onde $\mathcal{N}(u)$ é o termo não linear. Buscaremos nesta seção a solução para algum ponto no espaço de parâmetros acima daquele no qual o primeiro modo instável muda sua estabilidade (taxa de crescimento nula). Para tal ponto r_c , o problema linearizado $\mathcal{L}_r u = 0$ tem uma solução não trivial, $\mathcal{L}_c u_c = 0$.

Isso caracteriza um problema de *perturbação singular* [7]. A perturbação singular diferencia-se da regular por suas soluções diferenciarem-se fortemente daquelas não perturbadas. Ou seja, tomando o parâmetro ε , que representa a intensidade da perturbação, e fazendo-o cada vez menor na solução singular não tenderemos a solução obtida sem a perturbação desde o início, se é que a última solução existe para o caso.

Nosso problema pode ser entendido como uma busca termo a termo da expansão de Taylor de uma função implícita relacionando a amplitude do estado bifurcado, u , com o parâmetro de controle, r . Introduzindo um parâmetro “formal” ε , podemos fazer esta expansão explícita¹:

$$\begin{aligned} u &= \varepsilon u_1(x) + \varepsilon^2 u_2(x) + \dots \\ \epsilon &= \varepsilon r_1 + \varepsilon^2 r_2 + \dots \end{aligned} \tag{3.10}$$

Trataremos o caso da equação de Swift-Hohenberg:

$$\tau_0 \partial_t u = (\epsilon - \xi^4 (\nabla^2 + k_c^2)^2) u - g u^3 \tag{3.11}$$

onde procuramos a solução ao redor do ponto crítico, $k = k_c$ e $\epsilon(k_c) = 0$.

Definimos, por uma questão de organização, os operadores:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_r &= (\epsilon - \xi^4 (\nabla^2 + k_c^2)^2) \\ \mathcal{N}(u) &= -g u^3 \\ \mathcal{L}_c &= -\xi^4 (\nabla^2 + k_c^2)^2 \\ \therefore \mathcal{L}_r &= \epsilon + \mathcal{L}_c \end{aligned}$$

¹ ε é o parâmetro formal inserido na análise perturbativa. Não confundir com $\epsilon = \frac{r-r_c}{r}$, parâmetro que mede a distância à transição

Buscamos soluções para $\partial_t u = 0$, ou seja:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_r u + \mathcal{N}(u) &= 0 \\
&= \mathcal{L}_c[\varepsilon u_1(x) + \varepsilon^2 u_2(x) + \dots] \\
&\quad + [\varepsilon r_1 + \varepsilon^2 r_2 + \dots][\varepsilon u_1(x) + \varepsilon^2 u_2(x) + \dots] \\
&\quad - g[\varepsilon u_1(x) + \varepsilon^2 u_2(x) + \dots]^3 \\
&= \varepsilon[\mathcal{L}_c u_1] \\
&\quad + \varepsilon^2[\mathcal{L}_c u_2 + r_1 u_1] \\
&\quad + \varepsilon^3[\mathcal{L}_c u_3 + r_2 u_1 + r_1 u_2 - g u_1^3] \\
&\quad + \dots
\end{aligned}$$

Os termos de cada ordem em ε devem se anular independentemente, assim até terceira ordem:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_c u_1 &= 0 \\
\mathcal{L}_c u_2 &= -r_1 u_1 \\
\mathcal{L}_c u_3 &= -r_2 u_1 - r_1 u_2 + g u_1^3
\end{aligned} \tag{3.12}$$

ou, de forma geral:

$$\mathcal{L}_c u_n = f_n \tag{3.13}$$

A equação em primeira ordem em ε é homogênea. Sendo assim, existe uma solução não trivial $u_1 \propto u_c$.

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_c u_1 &= 0 \\
(\partial_x^2 + k_c^2) u_1 &= 0 \\
\partial_x^4 u_1 + 2k_c^2 \partial_x^2 u_1 + k_c^4 u_1 &= 0 \\
\therefore u_1 &= U e^{ik_c x} + \bar{U} e^{-ik_c x} + x [V e^{ik_c x} + \bar{V} e^{-ik_c x}]
\end{aligned} \tag{3.14}$$

podemos fazer $V = \bar{V} = 0$, para condição de contorno periódicas.

Podemos escolher fase e normalização tais que:

$$u_1 = \text{sen}(k_c x) \tag{3.15}$$

Para os casos da equação 3.13 com $n \geq 2$ temos equações não homogêneas e seu cálculo depende dos termos de ordens inferiores. Uma vez que existe uma solução não trivial para

o problema homogêneo, não existe o operador inverso de \mathcal{L}_c . A chamada condição de compatibilidade garante que existirá uma solução para o problema não homogêneo se, e somente se, a não homogeneidade for ortogonal ao conjunto de soluções homogêneas². As quantidades r_n introduzidas pela expansão do parâmetro de controle são definidas pela condição de que os termos u_n sejam linearmente independentes.

Tomando o produto escalar $\langle A|B\rangle = \frac{1}{\lambda_c} \int_0^{\lambda_c} A^* B dx$, podemos definir o operador \mathcal{L}_c^\dagger adjunto a \mathcal{L}_c por:

$$\langle W|\mathcal{L}_c u\rangle = \langle u|\mathcal{L}_c^\dagger W\rangle^*$$

Assim, a condição de compatibilidade pode ser escrita como:

$$\langle \tilde{u}|f_n\rangle = 0$$

com \tilde{u} definido por $\mathcal{L}_c^\dagger \tilde{u} = 0$. Isso pode ser verificado:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{u}|f_n\rangle &= 0 \\ &= \langle \tilde{u}|\mathcal{L}_c u_n\rangle \\ &= \langle u_n|\mathcal{L}_c^\dagger \tilde{u}\rangle^* \\ &= 0 \end{aligned}$$

Em segunda ordem, não existem correções não lineares, portanto a solução será proporcional a u_1 . Podemos tomar, então:

$$u_2 = 0 \quad \text{e} \quad r_1 = 0 \tag{3.16}$$

Em ordem ε^3 , temos:

$$\mathcal{L}_c u_3 = f_3 = -r_2 u_1 + g u_1^3 \tag{3.17}$$

e, usando a solução para u_1 :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_c u_3 &= -r_2 \text{sen}(k_c x) + g \text{sen}^3(k_c x) \\ &= \frac{g}{4} \left[\left(3 - \frac{4r_2}{g} \right) \text{sen}(k_c x) - \text{sen}(3k_c x) \right] \end{aligned}$$

onde usamos a identidade $\text{sen}^3 x = \frac{1}{4}(-\text{sen}3x + 3\text{sen}x)$.

²Este é o Teorema de Fredholm, ver apêndice A2 em [2]

Podemos encontrar r_2 pela condição de compatibilidade:

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{u} | f_3 \rangle &= 0 \\
&= \frac{1}{\lambda_c} \int_0^{\lambda_c} u_1 f_3 dx \\
&= \frac{1}{\lambda_c} \int_0^{\lambda_c} \text{sen}(k_c x) \cdot \frac{g}{4} \left[\left(3 - \frac{4r_2}{g} \right) \text{sen}(k_c x) - \text{sen}(3k_c x) \right] \\
&= \frac{1}{\lambda_c} \frac{g}{4} \left[\left(3 - \frac{4r_2}{g} \right) \int_0^{\lambda_c} \text{sen}^2(k_c x) dx - \int_0^{\lambda_c} \text{sen}(k_c x) \text{sen}(3k_c x) dx \right] \\
&= \frac{1}{\lambda_c} \frac{g}{4} \left[\left(3 - \frac{4r_2}{g} \right) \left(\frac{x}{2} - \frac{\text{sen}(2k_c x)}{4k_c} \right) - \left(\frac{\text{sen}^3(k_c x) \cos(k_c x)}{k_c} \right) \right]_0^{\lambda_c} \\
&= \frac{1}{\lambda_c} \frac{g}{4} \left(3 - \frac{4r_2}{g} \right) \left(\frac{\lambda_c}{2} \right)
\end{aligned}$$

assim,

$$\begin{aligned}
\left(3 - \frac{4r_2}{g} \right) &= 0 \\
\therefore r_2 &= \frac{3}{4}g
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Temos, então:

$$(-\xi^4(\nabla^2 + k_c^2)^2) u_3 = -\frac{g}{4}\text{sen}(3k_c x) \tag{3.19}$$

supondo $u_3 = U_3 \text{sen}(3k_c x)$:

$$\begin{aligned}
-\xi^4(\nabla^2 + k_c^2)^2 U_3 \text{sen}(3k_c x) &= -\frac{g}{4}\text{sen}(3k_c x) \\
-\xi^4((-3k_c)^2 + k_c^2)^2 U_3 \text{sen}(3k_c x) &= -\frac{g}{4}\text{sen}(3k_c x) \\
\xi^4(-8k_c^2)^2 U_3 &= \frac{g}{4} \\
\therefore U_3 &= \frac{1}{256} \frac{g}{\xi^4 k_c^4}
\end{aligned} \tag{3.20}$$

A solução até terceira ordem pode ser escrita como:

$$u = \varepsilon \text{sen}(k_c x) + \varepsilon^3 \left(\frac{1}{256} \right) \left(\frac{g}{\xi^4 k_c^4} \right) \text{sen}(3k_c x) \tag{3.21}$$

mas sabemos que

$$\epsilon = \varepsilon^2 \left(\frac{3}{4}g \right) \tag{3.22}$$

$$\therefore \varepsilon = \sqrt{\frac{4}{3} \cdot \frac{\epsilon}{g}} \tag{3.23}$$

e podemos reescrever a solução:

$$u = \sqrt{\frac{4}{3} \cdot \frac{\epsilon}{g}} \left(\text{sen}(k_c x) + \frac{1}{192} \cdot \frac{\epsilon}{\xi^4 k_c^4} \text{sen}(3k_c x) \right) \quad (3.24)$$

Para ϵ suficientemente pequeno, podemos escrever:

$$u \propto \sqrt{\epsilon} u_c$$

e a bifurcação é *supercrítica* para $\epsilon > 0$.

3.4 Formalismo de Envelope

Estados simples, caracterizados por apenas um único modo no espaço de Fourier, como as soluções estacionárias que encontramos na seção anterior, não são observados normalmente na natureza, sendo sua importância bastante restrita. Estados naturais são melhor representados por uma superposição de vetores de onda, ou seja, um pacote de onda³. Esses vetores de onda estão no intervalo dos chamados modos instáveis, e esse é centrado no vetor de onda mais instável k_c . A seleção desses modos se dá já no estágio inicial, ainda linear. A solução será, então, modulada, como um batimento no contexto de ondas sonoras, uma vez que, dentro da faixa instável, o comprimento de onda dos modos são muito próximos. Assim, essas “estruturas moduladas” serão aqui descritas na base de *envelopes*, funções que variam lentamente no espaço e tempo, e modulam a solução estacionária para o modo mais instável ($k = k_c$, máximo do fator de crescimento linear).

Dedução da Equação de Envelope

Faremos uma expansão semelhante à da seção anterior, mas desta vez para encontrar a equação de envelope. Aqui introduziremos diferentes escalas para a evolução do espaço e tempo para modulação. Essa é a base do método de múltiplas escalas [8].

Partimos de uma solução com vetor de onda k na direção x , da forma $u(x) = \frac{1}{2} (A(x, t) \exp(ik_c x) + \text{c.c.})$. A função $A(x, t)$, obviamente, representa a modulação. Para levar em conta que sua variação é lenta no espaço e tempo, introduzimos novas variáveis:

$$u(x) = \frac{1}{2} (A(X, T) \exp(ik_c x) + \text{c.c.}) \quad (3.25)$$

³Lembramos que princípio de superposição não é válido neste problema, dada sua não linearidade

tal que,

$$\partial_t \rightarrow \partial_T \quad \text{e} \quad \partial_x \rightarrow \partial_x + \partial_X$$

Procuramos, como antes, soluções pela expansão:

$$u = \epsilon u_1 + \epsilon^2 u_2 + \dots,$$

seguindo a análise usual [2], tomamos ϵ como na solução estacionária:

$$\epsilon = \epsilon^2$$

Será necessário expandir os operadores diferenciais de maneira consistente, ou seja, de forma que a ordem de grandeza das derivadas de diferentes escalas atuando na amplitude sejam compatíveis. Assim, tomemos novamente a equação de Swift-Hohenberg:

$$\tau_0 \partial_t u = \epsilon u - \xi^4 (\partial_x^2 + k_c^2)^2 u - g u^3$$

e, assumindo $k = k_c + \delta k$ e uma dependência da forma e^{st} no tempo, em primeira ordem de δk , temos:

$$\begin{aligned} \tau_0 s &= \epsilon - \xi^4 (-(k_c + \delta k)^2 + k_c^2)^2 \\ &\simeq \epsilon - \xi_0^2 \delta k^2 \end{aligned} \tag{3.26}$$

com $\xi_0^2 = 4\xi^4 k_c^2$.

Usamos as relações $\partial_X \rightarrow i\delta k$ e $\partial_T \rightarrow s$, para deduzirmos a condição de consistência entre as derivadas que atuam no envelope:

$$\partial_T A \sim \epsilon A \sim \partial_x^2 A$$

É tradicional usar um parâmetro formal comum, ϵ , e fazer a mudança de variáveis explícita, da forma:

$$\tilde{T} = \epsilon^2 T \quad \text{e} \quad \tilde{X} = \epsilon X$$

e, assim,

$$\partial_t \rightarrow \epsilon^2 \partial_{\tilde{T}} \quad \text{e} \quad \partial_x \rightarrow \partial_x + \epsilon \partial_{\tilde{X}}$$

Mais uma vez, a equação será escrita como:

$$\partial_t u = \mathcal{L}u + \mathcal{N}(u)$$

onde, agora:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_r &= \epsilon - \xi^4 (\partial_x^2 + k_c^2)^2 \\
&= \epsilon^2 - \xi^4 ((\partial_x + \epsilon \partial_{\tilde{X}})^2 + k_c^2)^2 \\
&= \epsilon^2 - \xi^4 ((\partial_x^2 + k_c^2) + 2\epsilon \partial_x \partial_{\tilde{X}} + \epsilon^2 \partial_{\tilde{X}}^2)^2 \\
&= \mathcal{L}_c + \epsilon \mathcal{L}_1 + \epsilon^2 \mathcal{L}_2 + \epsilon^3 \mathcal{L}_3 + \epsilon^4 \mathcal{L}_4
\end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_c &= -\xi^4 (\partial_x^2 + k_c^2)^2 \\
\mathcal{L}_1 &= -4\xi^4 (\partial_x^2 + k_c^2) \partial_x \partial_{\tilde{X}} \\
\mathcal{L}_2 &= 1 - 4\xi^4 \partial_x^2 \partial_{\tilde{X}}^2 + 2\xi^4 (\partial_x^2 + k_c^2) \partial_{\tilde{X}}^2 \\
\mathcal{L}_3 &= -4\xi^4 \partial_x \partial_{\tilde{X}}^3 \\
\mathcal{L}_4 &= -\xi^4 \partial_{\tilde{X}}^4
\end{aligned}$$

Assim, inserindo todas as expansões:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_r u + \mathcal{N}(u) - \partial_t u &= 0 \\
&= \epsilon [\mathcal{L}_c u_1] \\
&\quad + \epsilon^2 [\mathcal{L}_c u_2 + \mathcal{L}_1 u_1] \\
&\quad + \epsilon^3 [\mathcal{L}_c u_3 + \mathcal{L}_2 u_1 + \mathcal{L}_1 u_2 - g u_1^3 - \tau_0 \partial_{\tilde{T}} u_1] \\
&\quad + \dots
\end{aligned}$$

Como anteriormente, em primeira ordem, obtemos que u_1 é a solução do problema homogêneo, e podemos escrever:

$$u_1(x) = u_{11}(x) = \frac{1}{2} (A_{11} \exp i k_c x + \text{c.c.})$$

O termo A_{11} é a contribuição de menor ordem à $A(\tilde{X}, \tilde{T})$. O segundo índice refere-se a ordem do harmônico ao qual a amplitude se relaciona, e o primeiro, como antes, a ordem da expansão.

Em segunda ordem, temos:

$$\mathcal{L}_c u_2 = -\mathcal{L}_1 u_1$$

mas podemos comprovar facilmente que o lado direito é identicamente nulo, dado que

$$(\partial_x^2 + k_c^2)e^{\pm ik_c x} = e^{\pm ik_c x}(k_c^2 - k_c^2) \equiv 0.$$

Então, temos a mesma solução de u_1 :

$$u_2(x) = u_{21}(x) = \frac{1}{2} (A_{21}e^{ik_c x} + \text{c.c.})$$

Para ordem ε^3 , temos:

$$\mathcal{L}_c u_3 = -\mathcal{L}_2 u_1 + g u_1^3 + \tau_0 \partial_{\tilde{T}} u_1$$

onde já usamos $\mathcal{L}_1 u_2 = 0$. Pela condição de compatibilidade, introduzida anteriormente, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{u} | f_3 \rangle &= 0 \\ &= -\langle \tilde{u} | \mathcal{L}_2 u_1 \rangle + g \langle \tilde{u} | u_1^3 \rangle + \langle \tilde{u} | \tau_0 \partial_{\tilde{T}} u_1 \rangle \end{aligned}$$

O primeiro termo:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_2 u_1 &= [1 - 4\xi^4 \partial_x^2 \partial_{\tilde{X}}^2 + 2\xi^4 (\partial_x^2 + k_c^2) \partial_{\tilde{X}}^2] u_1 \\ &= A(\tilde{X}, \tilde{T}) e^{-ik_c x} - 4\xi^4 (-k_c^2) [\partial_{\tilde{X}}^2 A(\tilde{X}, \tilde{T})] e^{-ik_c x} + \\ &\quad + 2\xi^4 (k_c^2 - k_c^2) [\partial_{\tilde{X}}^2 A(\tilde{X}, \tilde{T})] e^{-ik_c x} + \text{c.c.} \\ &= A(\tilde{X}, \tilde{T}) e^{-ik_c x} + 4\xi^4 k_c^2 [\partial_{\tilde{X}}^2 A(\tilde{X}, \tilde{T})] e^{-ik_c x} + \text{c.c.} \\ \therefore \langle \tilde{u} | \mathcal{L}_2 u_1 \rangle &= A(\tilde{X}, \tilde{T}) + 4\xi^4 k_c^2 [\partial_{\tilde{X}}^2 A(\tilde{X}, \tilde{T})] \end{aligned}$$

O segundo é:

$$\begin{aligned} u_1^3 &= \frac{1}{8} (A_{11} e^{ik_c x} + \text{c.c.})^3 \\ &= \frac{1}{8} |A_{11}|^2 (A_{11} e^{3ik_c x} + A_{11} e^{-ik_c x} + \text{c.c.}) \\ \therefore \langle \tilde{u} | u_1^3 \rangle &= |A_{11}|^2 (\langle \tilde{u} | (A_{11} e^{3ik_c x} + \text{c.c.}) \rangle + \langle \tilde{u} | (A_{11} e^{-ik_c x} + \text{c.c.}) \rangle) \\ &= |A_{11}|^2 (0 + A_{11}) \\ &= |A_{11}|^2 A_{11} \end{aligned}$$

O terceiro termo é trivial, uma vez que o operador atua somente na amplitude. Juntando todos eles, temos:

$$\langle \tilde{u} | f_3 \rangle = 0 = -A(\tilde{X}, \tilde{T}) - 4\xi^4 k_c^2 [\partial_{\tilde{X}}^2 A(\tilde{X}, \tilde{T})] + g |A_{11}|^2 A_{11} + \tau_0 \partial_{\tilde{T}} A_{11} \quad (3.27)$$

reescrevemos,

$$\tau_0 \partial_{\tilde{T}} A_{11} = A_{11} + \xi_0^2 \partial_{\tilde{X}}^2 A_{11} - g |A_{11}|^2 A_{11} \quad (3.28)$$

Esta é a equação de envelope que rege a evolução de uma modulação do estado estacionário com vetor de onda crítico. Sua aplicação mais importante é a análise de uma instabilidade secundária, como veremos mais adiante.

Solução Estacionária Modulada

Retomando as variáveis originais pelas relações $\tilde{T} = \varepsilon^2 T \rightarrow \varepsilon^2 t$, $\tilde{X} = \varepsilon X \rightarrow \varepsilon x$ e $\varepsilon = \varepsilon^2$, reescrevemos a equação de envelope da forma:

$$\tau_0 \partial_t A = \varepsilon A + \xi_0^2 \partial_x^2 A - g_{eff} |A|^2 A \quad (3.29)$$

A solução não linear pode ter dois tipos de modulação: variações na intensidade (módulo) e de fase. De fato, essas modulações estão acopladas na equação 3.29, mas a distinção é bastante útil. Podemos explicitar a evolução de cada tipo de modulação inserindo $A = |A|e^{i\phi}$ na equação. Para tanto, avaliamos as derivadas:

$$\begin{aligned} \partial_{t,x} (|A|e^{i\phi}) &= (\partial_{t,x} |A|) e^{i\phi} + |A|e^{i\phi} (i \partial_{t,x} \phi) \\ \partial_x^2 (|A|e^{i\phi}) = \partial_x [\partial_x (|A|e^{i\phi})] &= (\partial_x^2 |A|) e^{i\phi} + 2 (\partial_x |A|) e^{i\phi} (i \partial_x \phi) + |A|e^{i\phi} [i \partial_x^2 \phi - (\partial_x \phi)^2] \end{aligned}$$

Substituindo na equação e após separar as partes real e imaginária, teremos:

$$\tau_0 \partial_t |A| = [\varepsilon - \xi_0^2 (\partial_x \phi)^2] |A| + \xi_0^2 \partial_x^2 |A| - g_{eff} |A|^3 \quad (3.30)$$

$$\partial_t \phi = \frac{\xi_0^2}{\tau_0} \left(\partial_x^2 \phi + 2 \frac{\partial_x |A|}{|A|} \partial_x \phi \right) \quad (3.31)$$

É interessante ressaltar que na equação 3.30 as principais contribuições para evolução do módulo de uma perturbação de longo comprimento de onda serão independentes da modulação espacial, ou seja, existem mesmo para $\partial_x \equiv 0$. O termo $\varepsilon |A|$, para pequenas amplitudes, será mais relevante para a escala de tempo do que as variações espaciais do módulo. Já a evolução da fase é majoritariamente difusiva. Sua taxa de evolução é muito lenta para longos comprimentos de onda e a difusividade é dada por $\frac{\xi_0^2}{\tau_0}$. Podemos tratar tal situação, modulação com longo comprimento de onda, a partir do formalismo de envelope, apresentado anteriormente nesta seção.

Assumindo módulo constante e $\phi = \delta kx + \phi_0$, temos uma solução estacionária para 3.31. Além disso, equação 3.30 dará:

$$0 = (\epsilon - \xi_0^2 \delta k^2) |A| - g_{eff} |A|^3$$

assim,

$$|A| = \sqrt{\frac{\epsilon - \xi_0^2 \delta k^2}{g_{eff}}}$$

já que a solução trivial não nos interessa. Assim, para que exista uma solução real, $\epsilon - \xi_0^2 \delta k^2$ deve ser positivo, ou seja:

$$|\delta k| < \frac{\sqrt{\epsilon}}{\xi_0} \quad (3.32)$$

Essa condição define o intervalo de vetores de onda dos modos instáveis. Temos, então, uma solução periódica com $k = k_c + \delta k$, como é possível comprovar inserindo $A(x, t) = |A| e^{i(\delta kx + \phi_0)}$ na solução completa, dada pela equação 3.25:

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{1}{2} (|A| e^{i(\delta x + \phi_0)} e^{ik_c x} + \text{c.c.}) \\ &= \frac{1}{2} (|A| e^{i\phi_0} e^{i(\delta k + k_c)x} + \text{c.c.}) \end{aligned}$$

Podemos usar a mudança de variáveis $x' = x/\xi_0$, $t' = t/\tau_0$ e $A' = \sqrt{g_{ef}} A$, para adimensionalizar a equação, que fica:

$$\partial_t A' = \epsilon A' + \partial_x^2 A' - |A'|^2 A'$$

Mais ainda, para um δk fixo, fazemos: $A' = \tilde{A}(x, t) e^{i\delta k x}$, assim podemos reescrever a equação novamente:

$$\partial_t \tilde{A} = (\epsilon - \delta k^2) \tilde{A} + 2i\delta k \partial_x \tilde{A} + \partial_x^2 \tilde{A} - |\tilde{A}|^2 \tilde{A} \quad (3.33)$$

e soluções estacionárias são dadas por $\tilde{A}_0 = \sqrt{\epsilon - \delta k^2}$, exceto por uma escolha de fase ϕ_0 .

Instabilidade de Eckhaus: Uma Instabilidade Secundária

Analisaremos, aqui, a estabilidade da solução para equação 3.33, dada por \tilde{A}_0 como vimos acima. Isso será feito por uma análise linear da evolução de uma perturbação $a = v + iw$ a ser adicionada à solução estacionária. Primeiramente, avaliaremos o termo

não linear inserindo $\tilde{A} = \tilde{A}_0 + a$:

$$\begin{aligned} |\tilde{A}|^2 \tilde{A} &= [(\sqrt{\epsilon - \delta k^2} + v)^2 + w^2](\sqrt{\epsilon - \delta k^2} + v + iw) \\ &= [(\epsilon - \delta k^2) + 2v\sqrt{\epsilon - \delta k^2} + v^2 + w^2](\sqrt{\epsilon - \delta k^2} + v + iw) \\ &= \sqrt{\epsilon - \delta k^2}(\epsilon - \delta k^2) + 3v(\epsilon - \delta k^2) + iw(\epsilon - \delta k^2) + \mathcal{O}[a^2] \end{aligned}$$

Substituindo a solução perturbada, \tilde{A} , na equação, tomando primeira ordem em a , e separando as partes real e imaginária, teremos:

$$\begin{aligned} \partial_t v &= [-2(\epsilon - \delta k^2) + \partial_x^2]v - 2\delta k \partial_x w \\ \partial_t w &= 2\delta k \partial_x v + \partial_x^2 w \end{aligned}$$

Para tal análise introduzimos os modos normais:

$$\begin{aligned} v &= V \exp(st) \cos(qx) \\ w &= W \exp(st) \sin(qx) \end{aligned}$$

De forma que as equações acima nos levarão ao sistema algébrico:

$$\begin{aligned} [s + 2(\epsilon - \delta k^2) + q^2]V - 2\delta k q W &= 0 \\ -2\delta k q V + (s + q^2)W &= 0 \end{aligned}$$

Pela condição de uma solução não trivial, ou seja, determinante nulo, obtemos a relação de dispersão:

$$0 = s^2 + 2[(\epsilon - \delta k^2) + q^2]s + [2(\epsilon - 3\delta k^2) + q^2]q^2$$

Tal polinômio tem raízes:

$$s_{(\pm)} = -[(\epsilon - \delta k^2) + q^2] \pm \sqrt{(\epsilon - \delta k^2)^2 + 4\delta k^2 q^2}$$

Obviamente, soluções s_- são negativas, portanto decaem exponencialmente e são estáveis. Dessa forma, uma instabilidade secundária surgirá, apenas se s_+ for positivo, ou seja, o produto das raízes deve ser negativo:

$$\begin{aligned} s_+ s_- &= [(\epsilon - \delta k^2) + q^2]^2 - [(\epsilon - \delta k^2)^2 + 4\delta k^2 q^2] \leq 0 \\ &2(\epsilon - \delta k^2)q^2 + q^4 - 4\delta k^2 q^2 \leq 0 \end{aligned}$$

O que leva à condição:

$$q^2 \leq 2(3\delta k^2 - \epsilon)$$

assim, devemos ter:

$$|\delta k| \geq \sqrt{\frac{\epsilon}{3}} \quad (3.34)$$

que define o domínio da *instabilidade de Eckhaus* [9, 10, 11, 12]. No contexto de padrões em listras, essa instabilidade secundária pode ser entendida como a tendência do sistema de levar o sistema ao modo mais instável através da junção de duas listras em uma (ou pela divisão de um a listra em duas), como pode ser visto na figura 4. Veremos que nossos resultados numéricos são compatíveis com a condição obtida.

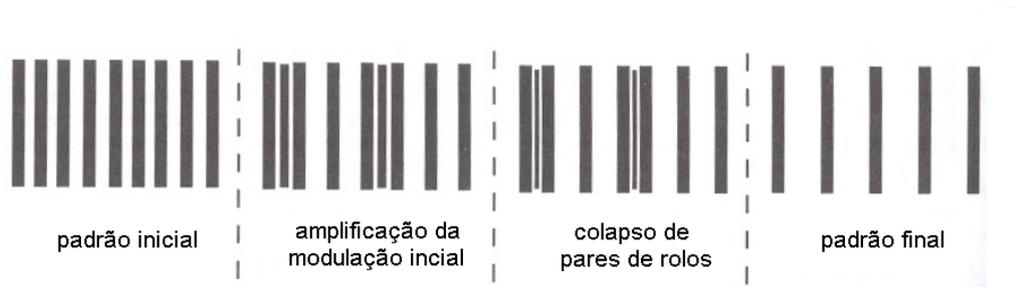


Figura 4: *Instabilidade de Eckhaus: Dinâmica de uma modulação do comprimento de onda para rolos no domínio da instabilidade de Eckhaus. Figura adaptada de [2]*

4 *Métodos Numéricos*

Apresentamos neste capítulo os métodos utilizados para simulação da evolução do sistema, a partir da equação diferencial parcial não-linear de Swift-Hohenberg. No sentido de diminuir o custo computacional com suficiente precisão numérica utilizamos a integração espectral que resume nosso problema a um sistema de equações diferenciais ordinárias, que será o assunto da seção 4.1. Outra grande vantagem é a disponibilidade imediata do espectro de Fourier que será utilizado para avaliar inúmeras propriedades do sistema. Durante nossas pesquisas utilizamos dois diferentes métodos numéricos de integração de equações diferenciais ordinárias, o método de Euler e o de Runge-Kutta, a serem discutidos em detalhes nas seções 4.2 e 4.3, respectivamente. Além disso, apresentamos ao fim deste capítulo, na seção 4.4, uma breve discussão da adição de um ruído branco ao sistema e como isso é incluído na integração espectral por método de Euler.

4.1 *Integração Espectral*

Na integração da equação de Swift-Hohenberg [ESH], além da não-linearidade, temos o desafio de computar derivadas espaciais numa equação de evolução temporal. Em um sistema com condições de contorno periódicas, este problema pode ser mais facilmente resolvido através de uma integração no espaço de Fourier, a chamada integração espectral.

Tomemos a ESH básica:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = [\epsilon - (k_c^2 - \nabla^2)^2]u - u^3 \quad (4.1)$$

A transformada de Fourier do campo u é definida por:

$$\tilde{u}(k, t) = \mathcal{F}[u] = \int_0^L dx e^{-ikx} u(x, t) \quad (4.2)$$

No caso, temos condição de contorno periódica $u(x + L, t) = u(x, t)$. Assim, na

transformada de Fourier:

$$\begin{aligned}
 e^{ik(x+L)} &= e^{ikx} \\
 \Rightarrow e^{ikL} &= 1 \\
 k = k_n &= \frac{2\pi}{L}n \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \int_0^L dx e^{i(k_n - k_{n'})x} &= \int_0^L dx \exp\left[\frac{2\pi i}{L}(n - n')x\right] \\
 &= \frac{2\pi i}{L} \int_0^{2\pi} dy e^{i(n - n')y} \\
 &= L\delta_{n', -n}
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

de forma que a transformada inversa é:

$$\mathcal{F}^{-1}[\tilde{u}] = u(x, t) = A \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-ik_n x} \tilde{u}(k_n, t) \tag{4.4}$$

onde A é o fator de normalização, que pode ser encontrado a partir das definições da transformada direta e inversa, e da equação 4.3:

$$\begin{aligned}
 \tilde{u}(k_n, t) &\equiv \int_0^L dx u(x, t) e^{-ik_n x} \\
 &= \int_0^L dx \left[A \sum_{n'=-\infty}^{\infty} e^{-ik_{n'} x} \tilde{u}(k_{n'}, t) \right] e^{-ik_n x} \\
 &= A \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \tilde{u}(k_{n'}, t) \int_0^L dx e^{i(k_n - k_{n'})x} \\
 &= A \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \tilde{u}(k_{n'}, t) [L\delta_{n, n'}] \\
 &= AL\tilde{u}(k_n, t) \\
 \Rightarrow A &= L^{-1}
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Assim:

$$u(x, t) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-ik_n x} \tilde{u}(k_n, t) \tag{4.6}$$

A evolução temporal da transformada de Fourier para nosso sistema será então:

$$\frac{\partial \tilde{u}(k, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}[u] = \frac{\partial}{\partial t} \int_0^L dx e^{-ikx} u(x, t) = \int_0^L dx e^{-ikx} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t}$$

inserindo a equação 4.1:

$$\frac{\partial \tilde{u}(k, t)}{\partial t} = \int_0^L dx e^{-ikx} \left\{ [\epsilon - (k_c^2 + \nabla^2)^2] u(x, t) - [u(x, t)]^3 \right\} \quad (4.7)$$

O termo não-linear é mais facilmente avaliado por transformadas sucessivas durante o cálculo da evolução, como ficará mais claro à frente para a discussão do método numérico. Entretanto, o termo linear pode ser desenvolvido, o que é na verdade nosso maior interesse nesta análise:

$$\begin{aligned} \int_0^L dx e^{-ikx} [\epsilon - (k_c^2 + \nabla^2)^2] u(x, t) &= \int_0^L dx e^{-ikx} [\epsilon - (k_c^2 + \nabla^2)^2] \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-ik_n x} \tilde{u}(k_n, t) \\ &= \frac{1}{L} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \int dx e^{-ik_n x} \tilde{u}(k_{n'}, t) [\epsilon - (k_c^2 + \nabla^2)^2] e^{ik_{n'} x} \\ &= \frac{1}{L} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \int dx e^{-i(k_n - k_{n'})x} \tilde{u}(k_{n'}, t) [\epsilon - (k_c^2 + (ik_{n'})^2)^2] \\ &= \frac{1}{L} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} [\epsilon - (k_c^2 - k'^2)^2] \tilde{u}(k_{n'}, t) \left(\int dx e^{-i(k - k')x} \right) \\ &= \frac{1}{L} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} [\epsilon - (k_c^2 - k'^2)^2] \tilde{u}(k_{n'}, t) L \delta_{n, n'} \\ &= [\epsilon - (k_c^2 - k_n^2)^2] \tilde{u}(k_n, t) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Assim, podemos reescrever a equação 4.7:

$$\frac{\partial \tilde{u}(k_n, t)}{\partial t} = [\epsilon - (k_c^2 - k_n^2)^2] \tilde{u}(k_n, t) - \int_0^L dx e^{-ik_n x} [u(x, t)]^3 \quad (4.9)$$

O grande trunfo do método espectral está na equação 4.9, pois o operador diferencial ∇ é um simples escalar, ik_n , no espaço de Fourier, o que nos traz grande eficiência computacional.

Além disso, temos a discretização da variável espacial x , tal que $x_j = j\Delta x$ com $0 \leq j \leq L$, vale lembrar que estamos trabalhando com variáveis adimensionais e escolhemos $\Delta x = 1$. É conveniente, ainda, separar as partes real e imaginária $\tilde{u} = v + iw$. Assim, com tudo isso em mente, temos que:

$$\begin{aligned} v_n(t) &= \frac{2}{L} \sum_{j=1}^L u_j(t) \cos\left(\frac{2\pi j n}{L}\right), \\ w_n(t) &= \frac{2}{L} \sum_{j=1}^L u_j(t) \sin\left(\frac{2\pi j n}{L}\right), \end{aligned} \quad n = 1, \dots, L \quad (4.10)$$

e a dinâmica para amplitude v_n será dada por:

$$\frac{\partial v_n(t)}{\partial t} = [\epsilon - (k_c^2 - k_n^2)^2]v_n - N_n, \quad (k_n = 2\pi n/L) \quad (4.11)$$

com, $N_n = \sum_j u_j^3 \cos(2\pi j n/L)$. Será necessário avaliar a transformada inversa para a obtenção de u_j . A evolução da amplitude w_n é completamente análoga, apenas com a diferença do termo não-linear ser da forma $N'_n = \sum_j u_j^3 \sin(2\pi j n/L)$.

4.2 Método de Euler

Entre os métodos numéricos de integração de equações diferenciais ordinárias o método de Euler é o mais simples. Entretanto, não é muito confiável, uma vez que o passo de integração deve ser muito pequeno para que se mantenha uma boa precisão. É, em geral, utilizado como uma primeira sondagem de um sistema, com um refinamento dos dados sendo feito posteriormente por outro método mais sofisticado.

Sua fórmula pode ser obtida por uma expansão em série de Taylor ao redor do passo de tempo anterior, truncada em primeira ordem de Δt , o passo de tempo. Seja $t = t_0 + \Delta t$, onde t é o tempo para o qual queremos avaliar a função, e t_0 é o tempo inicial para o qual temos o valor da função. Então, usando a equação 4.11 teremos:

$$\begin{aligned} v_n(t) &= v_n(t - \Delta t) + \dot{v}_n(t - \Delta t)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ v_n(t) &= v_n(t_0) + \dot{v}_n(t_0)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ v_n(t) &= v_n(t_0) + \{[\epsilon - (k_c^2 - k_n^2)^2]v_n(t_0) - N_n(t_0)\}\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned}$$

Aqui usamos $\dot{v}_n(t) \equiv \frac{\partial v_n(t)}{\partial t}$. Reescrevendo, e desprezando os termos de segunda ordem em Δt :

$$v_{n,m+1} = g'(k_n)v_{n,m} - \Delta t N_{n,m} \quad (4.12)$$

onde, $g'(k_n) = 1 + \Delta t[(\epsilon - (k_c^2 - k_n^2)^2)]$, e o segundo subíndice indica o tempo pela relação: $t = m\Delta t$.

O método pode, ainda, ser entendido geometricamente pela figura 4.2. Onde, o valor seguinte da função é dado pela altura da reta traçada a partir do ponto dado, com inclinação dada pela derivada neste ponto, após um passo de tempo.

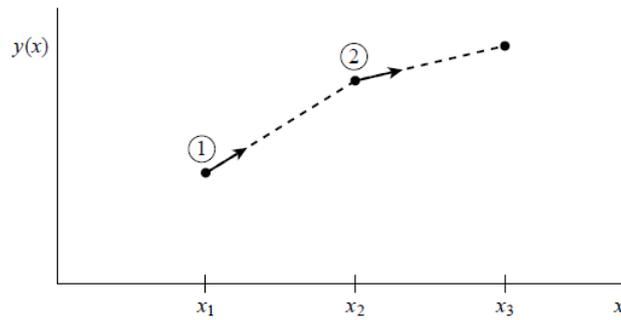


Figura 5: *Método de Euler: Argumentos geométricos. Figura retirada de [13]*

O algoritmo utilizado para integração espectral por método de Euler é, então, resumidamente: partindo das condições iniciais $u(m = 0)$ as amplitudes de Fourier v_n e w_n são obtidas pela transformada dada pela equação 4.10. A equação 4.12 deve ser, então, calculada para todo n , assim como a equação análoga para w_n . Tendo isso em mãos podemos calcular $u(m = 1)$, usando a transformada inversa. Esse processo pode ser repetido para se obter $u(m)$ para qualquer m subsequente.

O truncamento na expansão dá a ordem da correção do método, $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Esse erro está a apenas uma ordem de grandeza do passo de tempo, o que caracteriza um método de *primeira ordem*. Como veremos, apesar de não muito eficiente em casos gerais, este método teve resultados equivalentes aos obtidos pelo outro método a ser introduzido na seção a seguir. Por isso, utilizamos o método de Euler em algumas implementações desta pesquisa.

4.3 Método Runge-Kutta

O método mais utilizado para integração numérica de equações diferenciais ordinárias é o chamado método Runge-Kutta de quarta ordem. O fator mais importante advindo do método Runge-Kutta, independente da ordem, é a avaliação da derivada em pontos intermediários, e não somente no ponto inicial como no método de Euler, como ficará mais evidente adiante. Isso implica num ganho considerável de precisão sem grande aumento de custo computacional.

Assim, será necessário avaliar pontos intermediários para obtenção do valor da função no próximo passo de tempo, além do ponto inicial. Esses são dados pelas fórmulas:

$$\begin{aligned}
k_1 &= \Delta t \dot{v}_{n,m}(t_m, v_{n,m}) \\
k_2 &= \Delta t \dot{v}_{n,m}(t_m + \Delta t/2, v_{n,m} + k_1/2) \\
k_3 &= \Delta t \dot{v}_{n,m}(t_m + \Delta t/2, v_{n,m} + k_2/2) \\
k_4 &= \Delta t \dot{v}_{n,m}(t_m + \Delta t, v_{n,m} + k_3)
\end{aligned} \tag{4.13}$$

e o novo valor da função é obtido por:

$$v_{n,m+1} = v_{n,m} + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} + \mathcal{O}(\Delta t^5) \tag{4.14}$$

A comprovação da ordem da correção pode ser feita comparando a fórmula a uma expansão de Taylor, da mesma forma que fizemos para o método de Euler. Porém utiliza-se relações que para evitar a necessidade computar as derivadas de maior ordem, o que leva as avaliações intermediárias da primeira derivada. Omitiremos tal desenvolvimento aqui por ser um assunto já bastante discutido na literatura.

Mais uma vez, uma representação geométrica pode ser apresentada. No caso de Runge-Kutta, o valor da função no passo seguinte depende da avaliação da derivada não somente no ponto inicial, mas, também, em pontos intermediários:

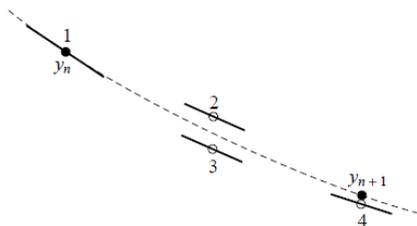


Figura 6: *Método Runge-Kutta*

A implementação para a integração espectral é bastante similar a do método de Euler, entretanto o termo não linear merece certa atenção. Isso porque, será necessário computar a transformada de Fourier inversa a cada passo de Runge-Kutta, ou seja, quatro vezes por passo de tempo, para cada amplitude de Fourier (v_n e w_n). Assim como no caso do método de Euler, as amplitudes devem ser avaliadas para todo n para cada passo de tempo para que seja calculada a configuração no espaço físico mediante outra transformada de Fourier.

O método Runge-Kutta aparentemente traz apenas complicações em relação ao de Euler, o que intuitivamente traria um maior custo computacional e perda de eficiência. Entretanto, a sofisticação do método propicia uma grande diminuição do erro por passo,

permitindo um passo de tempo muito maior e conseqüentemente tornando sua performance muito mais eficiente que o método de Euler para uma determinada precisão que se escolha. Esse método é utilizado na maior parte das simulações a serem apresentadas neste trabalho.

4.4 Ruído Branco Aditivo

O sistema como descrito até agora apresenta uma simplificação relevante, a ausência de influências externas. Para que isso seja contabilizado em simulações numéricas de sistemas sujeitos a flutuações térmicas, é bastante usual [14] a adição de um ruído branco gaussiano $\xi(t)$ definido por média e covariância dadas por:

$$\begin{aligned}\langle \xi(t) \rangle &= 0 \\ \langle \xi(t)\xi(s) \rangle &= \text{cov}(\xi(t), \xi(s)) = \Gamma\delta(t - s)\end{aligned}\tag{4.15}$$

Tal ruído segue, ainda, a distribuição gaussiana de probabilidade:

$$\mathcal{P}(\xi(t)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Gamma}} \exp\left(\frac{-\xi^2}{2\Gamma}\right)\tag{4.16}$$

ou seja, para cada t teremos probabilidade $\mathcal{P}(\xi)$ de encontrar um ξ para nossa variável aleatória.

Será interessante explorarmos propriedades de um ruído dado pela integral:

$$I = \int_t^{t+\Delta t} \xi(s)ds\tag{4.17}$$

Esse, também, é um ruído gaussiano. Assim já que $\langle I \rangle = 0$:

$$\begin{aligned}
\text{var}(I) &= \langle I^2 \rangle \\
&= \int_t^{t+\Delta t} ds \int_t^{t+\Delta t} ds' \langle \xi(s)\xi(s') \rangle \\
&= \int_t^{t+\Delta t} ds \int_t^{t+\Delta t} ds' \Gamma \delta(s-s') \\
&= \Gamma \int_t^{t+\Delta t} ds \\
&= \Gamma \Delta t \\
&= \Gamma \Delta t \text{ var}(X) \\
\text{var}(I) &= \text{var}(\sqrt{\Gamma \Delta t} X) \\
\therefore I &\stackrel{dist}{=} \sqrt{\Gamma \Delta t} X
\end{aligned} \tag{4.18}$$

onde X é uma variável aleatória gaussiana de variância unitária, ou seja, $\langle X(t)X(s) \rangle = \delta(t-s)$. Temos na equação 4.18 uma igualdade de distribuições, pois tratamos de variáveis aleatórias.

Voltamos a equação de Swift-Hohenberg e adicionamos o ruído $\xi(x, t)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = [\epsilon - (k_c^2 - \nabla^2)^2]u - u^3 + \xi(x, t) \tag{4.19}$$

com covariância da forma:

$$\langle \xi(x, t)\xi(y, s) \rangle = \Gamma \delta(t-s) \delta(x-y) \tag{4.20}$$

Aplicando a transformada de Fourier:

$$\frac{\partial \tilde{u}(k, t)}{\partial t} = \int_0^L dx e^{-ikx} \left\{ [\epsilon - (k_c^2 + \nabla^2)^2] u(x, t) - [u(x, t)]^3 \right\} + \int_0^L dx e^{-ikx} \xi(x, t) \tag{4.21}$$

Então, podemos definir uma nova variável aleatória:

$$\int_0^L dx e^{-ikx} \xi(x, t) = \tilde{\xi}(k, t) = \eta(k, t) + i\zeta(k, t)$$

e como discutido anteriormente $\tilde{\xi}(k, t)$ é gaussiana. Também o é, $\eta(k, t)$ e $\zeta(k, t)$. Podemos calcular a variância:

$$\begin{aligned}
\langle \eta(k, t) \eta(k', t') \rangle &= \frac{1}{L} \left\langle \int_0^L dx \cos kx \xi(x, t) \int_0^L dy \cos k'y \xi(y, t') \right\rangle \\
&= \frac{1}{L} \delta(t - t') \int_0^L dx \int_0^L dy \cos kx \cos k'y \langle \xi(x, t) \xi(y, t') \rangle \\
&= \frac{\Gamma}{L} \delta(t - t') \int_0^L dx \int_0^L dy \cos kx \cos k'y \delta(x - y) \\
&= \frac{\Gamma}{L} \delta(t - t') \int_0^L dx \int_0^L dy \cos kx \cos k'x \\
&= \frac{\Gamma}{2} \delta(t - t') \delta_{k, k'}
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Assim,

$$\text{var}(\eta) = \frac{1}{2} \Gamma = \frac{1}{2} \text{var}(\xi(x, t))$$

Evolução de $v(k, t)$:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = [\text{termo linear}] + [\text{termo não-linear}] + \eta(k, t)$$

$\eta(k, t)$ definido para os k permitidos para condição de contorno periódica, é gaussiano com $\text{var}(\eta) = \Gamma'$.

No método de Euler fica:

$$v(k, t + \Delta t) = v(k, t) + \Delta t ([\text{termo linear}] + [\text{termo não-linear}]) + I_\eta(k) \tag{4.23}$$

onde $I_\eta(k)$ é uma variável gaussiana com variância $\Gamma' \Delta t$:

$$I_\eta(k) = \sqrt{\Gamma' \Delta t} X = \sqrt{\Gamma \Delta t / 2} X$$

Portanto utilizamos um gerador de variáveis aleatórias gaussianas unitárias como apresentado em [13], multiplicamos por $\sqrt{\Gamma \Delta t / 2}$ e inserimos como na equação 4.23, além, obviamente, da forma análoga aplicada a amplitude w_n .

5 *Resultados*

Apresentaremos neste capítulo resultados de simulações numéricas¹ da equação de Swift-Hohenberg unidimensional com variáveis adimensionalizadas, dada pela equação 4.1. Utilizamos a integração espectral por método Runge-Kutta de quarta ordem e método de Euler, como vistos no capítulo anterior, para avaliar a evolução do sistema com condições de contorno periódicas. Partimos de um dentre os tipos de condições iniciais: configuração espacial aleatória² ou um único modo no espaço de Fourier³.

Na primeira seção, apresentamos uma caracterização da evolução do padrão por uma contagem de defeitos de módulo, onde obtivemos uma dependência temporal para o decaimento por lei de potência. A condição inicial de modo único foi estudada, como veremos na segunda seção, através da análise de seu espectro de potências. Em particular, a seleção (ou não) do modo de crescimento mais rápido após longo tempo é investigada nessas simulações. Foi possível determinar as regiões de estabilidade do padrão no espaço dos vetores de onda a partir de um valor do parâmetro de controle, ϵ .

Para uma primeira caracterização da formação do padrão de um sistema, parece-nos interessante verificar a evolução de sua configuração no tempo “visualmente”. Assim, podemos ver na figura 7 como o sistema evoluiu de uma condição inicial aleatória até um padrão com módulo e comprimento de onda razoavelmente bem definidos.

Neste modelo um rolo compreende a distância de um máximo e o mínimo seguinte (ou, com rotação contrária, do mínimo ao máximo seguinte), como podemos ver esquematicamente na figura 8. Nessa figura podemos ver também, a existência de uma “quebra” no padrão. Buscaremos neste capítulo estudar como acontecem os fenômenos neste processo de cura de defeitos e no estabelecimento do padrão final.

¹ Para maior fluidez na leitura do texto organizamos algumas referências aqui, [15, 16, 17, 18]

² A configuração aleatória foi obtida tomando u dado por números aleatórios uniformes no intervalo $(-v, v)$, onde $v = 0, 1$, a cada ponto do espaço.

³ A configuração com modo único no espaço de Fourier foi dada por $u(x) = 0, 1 \cos(\frac{2\pi m}{L}x)$, onde m é o modo escolhido. Tal que, $k_m = \frac{2\pi m}{L}$ é o vetor de onda associado a esse modo.

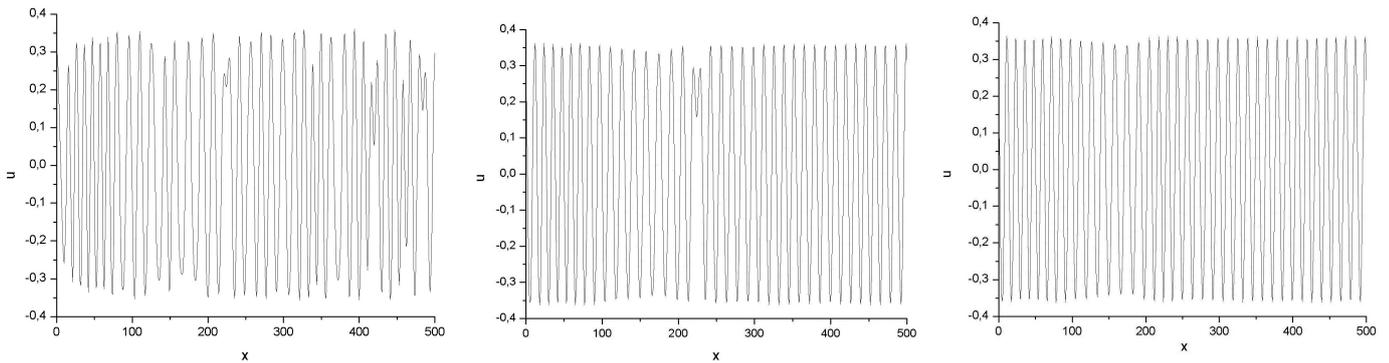


Figura 7: *Evolução da configuração. Condição inicial aleatória, $k_c = 0,5$; $\epsilon = 0,1$; $L = 500$. Tempos: $t = 50$ (esquerda); $t = 500$ (centro); $t = 750$ (direita).*

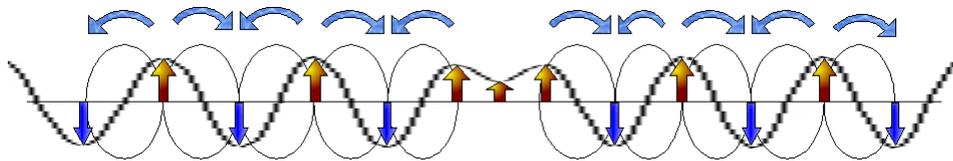


Figura 8: *Esquema de Rolos: Utilizamos a parte central do perfil em tempo $t = 500$ da figura 7 para mostrar a forma dos rolos. Setas verticais indicam a velocidade vertical do fluido, e setas curvas indicam o sentido de rotação dos rolos.*

5.1 Decaimento dos Defeitos

Neste ponto, é interessante introduzir um quantificador para a evolução do sistema até o padrão com módulo aproximadamente constante. Isso foi feito definindo defeitos numa base visual. Assim, definimos que um máximo local em u^2 abaixo de um certo fator (90% na maioria dos casos) da média dos 20% maiores picos será contado como um defeito. A configuração é elevada ao quadrado, simplesmente, para contabilizar, também, os picos negativos. Mostramos abaixo uma situação típica, figura 9, para a mesma amostra da figura 7.

Pudemos, então, utilizando tal definição de defeitos, estudar a dinâmica do sistema de maneira quantitativa. Para tanto, simulamos nosso sistema para 50 ensaios com condições iniciais aleatórias diferentes, sendo os parâmetros fixos em $k_c = 0,5$, $\epsilon = 0,1$ e $L = 500$. Obtivemos que a média do número de defeitos, N_d , tende a zero por uma lei de potências, $N_d \sim t^{-\gamma}$, como visto na figura 10.

O fato de a altura do limiar acompanhar o módulo do próprio padrão ao utilizarmos a média naquele instante foi comprovado ser irrelevante, não alterando o comportamento, como vemos na figura 11.

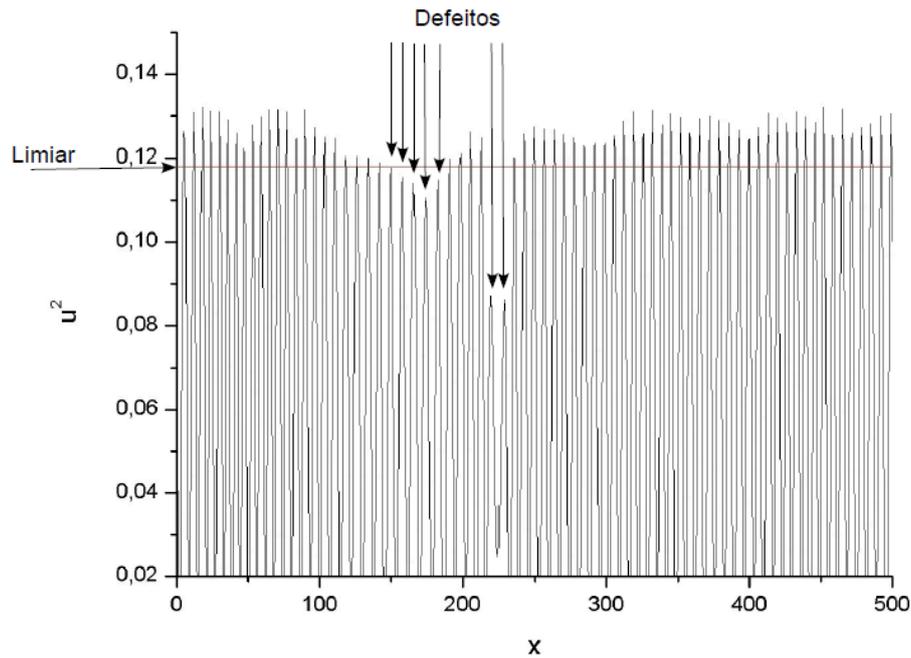


Figura 9: *Limiar de defeitos: u^2 em $t = 500$; picos abaixo do limiar são contados como defeitos, como indicado pelas setas.*

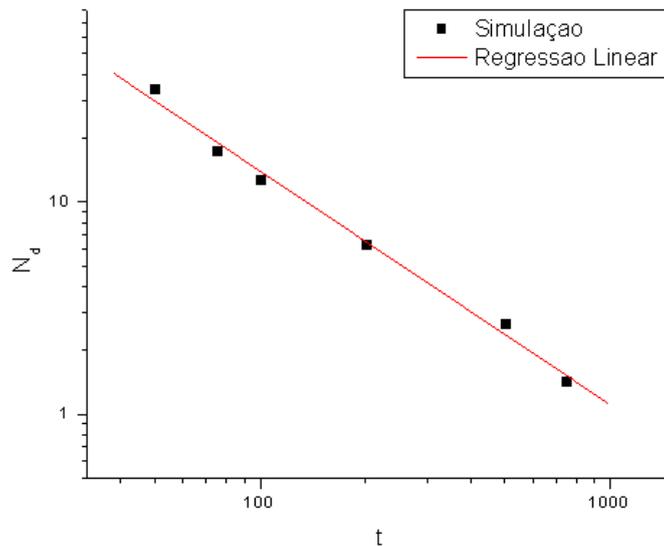


Figura 10: *(left) Decaimento de defeitos: Lei de potências para o número médio de defeitos com o tempo. Média sobre 50 realizações. Parâmetros: $k_c = 0,5$, $\epsilon = 0,1$, $L = 500$. A inclinação da linha de regressão é $\beta = -\gamma = -1,10(\pm 0,05)$.*

Nós estudamos, ainda, a evolução do número de defeitos do padrão para dois tamanhos do sistema e alguns valores para o vetor de onda crítico. Para grandes valores do vetor de onda crítico k_c , o número de defeitos decai a zero, porém modulações são mais fortes e utilizamos um limiar de 80% dos 20% maiores máximos, figura 12. Enquanto que, para valores menores, para $k_c \leq 0,4$ nos casos estudados, o número de defeitos parece ter um

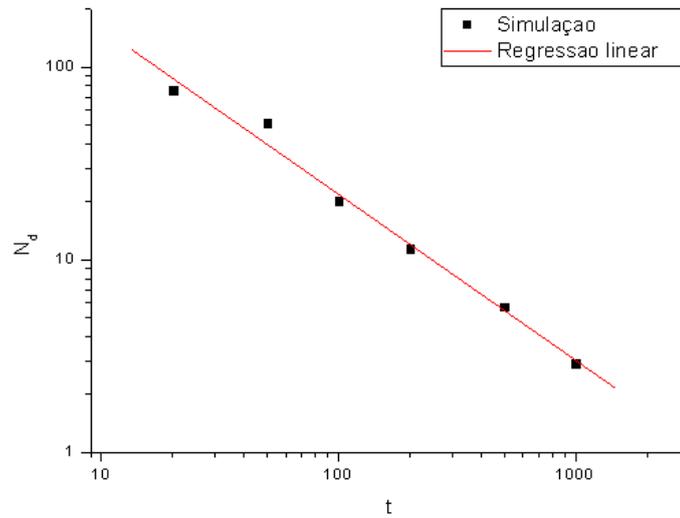


Figura 11: *Decaimento de defeitos com limiar fixo no valor $u_{lim} = 0,1216 = 0,128 \times 0,95$, ou seja, 95% da altura média dos picos no tempo final. $k_c = 0,5$, $\epsilon = 0,1$, $L = 500$. A inclinação da linha de regressão é $\beta = -\gamma = -0,86(\pm 0,05)$.*

valor limite não nulo, mesmo para tempos muito longos.

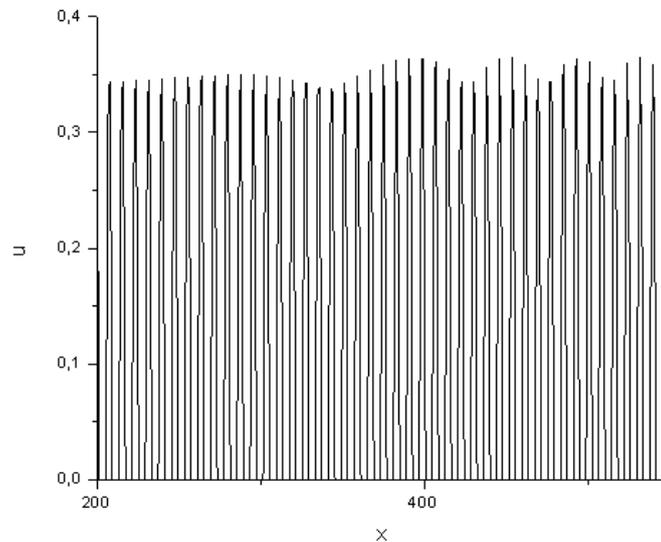


Figura 12: *Modulações no Perfil: $k_c = 0,8$, $L = 1000$ e $t = 3000$*

Sendo N_∞ o mencionado valor limite para o número de defeitos (valores organizados na tabela ??), nós usamos $\Delta N = N_d - N_\infty$ para obter, pela relação $\Delta N \propto t^{-\gamma}$, o expoente γ para diferentes valores de k_c e dois valores para o tamanho do sistema, L . Notamos que γ parece ser linearmente proporcional ao vetor de onda crítico, isso pode ser visto na figura 13.

Computamos então o expoente γ em função de k_c para os sistemas estudados, ($L = 500; 1000$). Obtivemos uma dependência linear com ótima concordância, como visto na

Tabela 1:

k_c	N_∞	
	$L = 500$	$L = 1000$
0,3	19 (± 1)	32 (± 2)
0,4	9,8 ($\pm 0,6$)	18 (± 1)

Número de defeitos limite, N_∞ (valores aproximados). $\epsilon = 0,1$. Simulações até $t =$

figura 13.

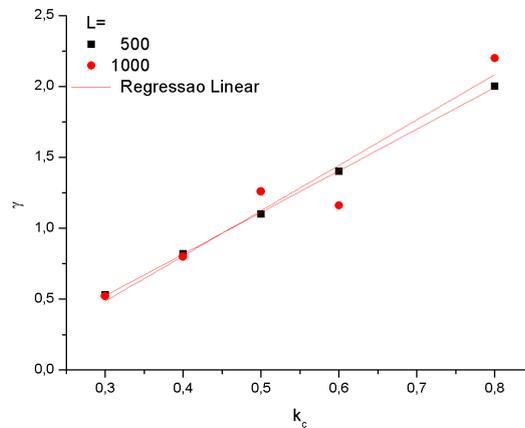


Figura 13: *Expoente γ : Regressão linear da dependência com k_c . Inclinação das linhas são $\beta_{500} = 2,94(\pm 0,02)$; $\beta_{1000} = 3,2(\pm 0,5)$ para $L = 500$ e $L = 1000$, respectivamente.*

Testamos, ainda, o método aplicado a diferentes valores do parâmetro ϵ , sendo obtido um comportamento equivalente, como mostra a figura 14. Sendo que para o valor $\epsilon = 0,2$ um número de defeitos finito era mantido mesmo após longo tempo.

Esses resultados são contrários ao esperado num processo de aniquilação de pares, onde teríamos um decaimento em lei de potência com um fator $\gamma_A = 1/2$ [19, 20].

De fato, podemos comprovar que os defeitos não são curados por um processo de aniquilação, analisando sua dinâmica no espaço como pode ser visto na figura 15.

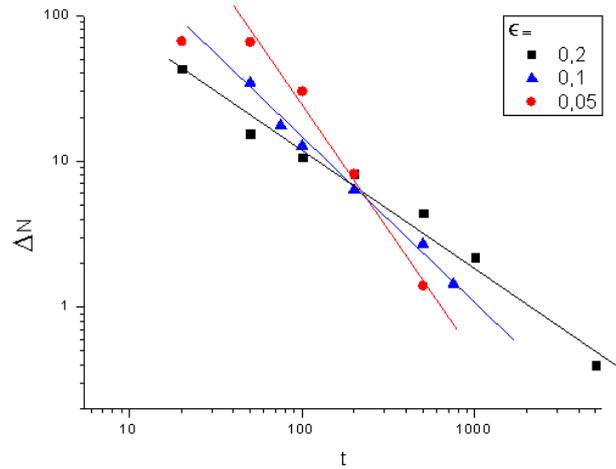


Figura 14: *Contagem de Defeitos para Diferentes ϵ : As linhas são apenas guias para os olhos. Para $\epsilon = 0,2$ o sistema apresenta N_∞ não nulo.*

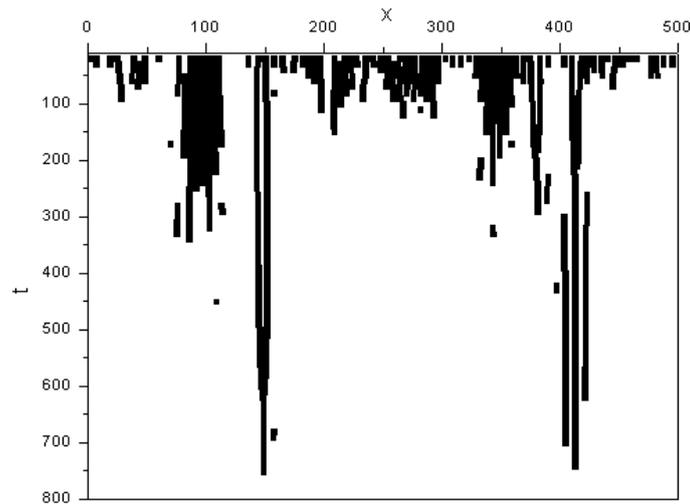


Figura 15: *Dinâmica da Posição de Defeitos: $k_c = 0.5$; $\epsilon = 0.1$; $L = 500$.*

5.2 Seleção dos Modos

Pela integração espectral, temos a disponibilidade imediata do espectro de potências⁴. Um exemplo da evolução dos modos de um sistema com condições iniciais aleatórias pode ser visto na figura 16. Podemos notar que existe a seleção de poucos modos (um pico bastante fino) de forma que o padrão no espaço físico tem uma periodicidade razoavelmente bem definida. Analisaremos, ao decorrer da simulação, ou após um longo período de observação, qual é o modo dominante do sistema, ou seja, o de maior amplitude no

⁴O espectro de potências é dado pelo módulo das amplitudes do cosseno e seno do espectro de Fourier. Ou seja, $P_m = \sqrt{v_m^2 + w_m^2}$, onde v_m e w_m seguem a notação do capítulo 4, definidos pela equação 4.10

espectro de potências. Denotaremos este modo por seu vetor de onda, k_{max} .

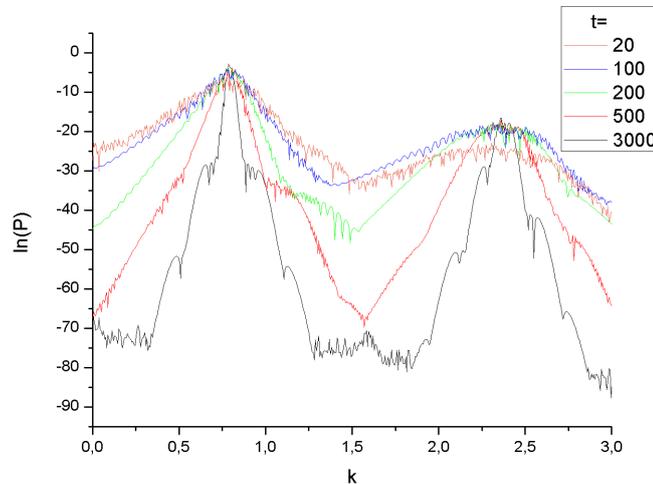


Figura 16: *Espectro de Potências Típico: configuração inicial aleatória, $k_c = 0,8; \epsilon = 0,1; L = 1000$.*

Pela discussão da seção 3.3, sabemos que o sistema tem soluções estacionárias que, em primeira ordem, são representadas por um único modo no espectro de potências. Para uma solução destas, é esperado que a dinâmica da equação de Swift-Hohenberg não modifique seu espectro de potências. Assim, tomando uma condição inicial de um modo único, dada por $u_m = (0,1) \cos(k_n \cdot m)$ com $k_n = \frac{2\pi n}{L}$ sendo o modo escolhido, simulamos tal dinâmica e obtemos tipicamente um gráfico com o da figura 17. Notamos que, de fato, este modo é estável, entretanto o espectro ao final não é tão puro quanto no início do processo. Isso se deve a erros numéricos (truncamento de número reais, discretização do espaço e tempo, entre outros), que causam o surgimento de novos modos, e equivalentemente, de modulações no padrão inicial. Temos, ainda, o crescimento de modos que são harmônicos ímpares do modo inicial. A presença desses modos é prevista pela análise perturbativa da seção 3.3. É possível perceber ainda, o surgimento de bandas ao redor dos picos (inclusive harmônicos). Porém sua importância é mínima, uma vez que sua amplitude é, aproximadamente, dez vezes menor que a dos picos.

Pela análise da seção 3.3, esperamos que exista, em um sistema sem flutuações, um intervalo de vetores de onda de soluções estacionárias. Esse intervalo é composto por modos com uma taxa de evolução, s , positiva. Partindo da equação 3.3, tomando $k_i = k_c + \delta k$, o vetor de onda inicial, então, para variáveis adimensionalizadas, temos a condição: $\delta k_{-L} \geq \delta k \geq \delta k_{+L}$, onde $\delta k_{\pm L} \equiv \pm \sqrt{\epsilon}$. Entretanto, alguns modos estacionários são instáveis a modulações, o que impede que sejam mantidos pelo sistema. Isso é cau-

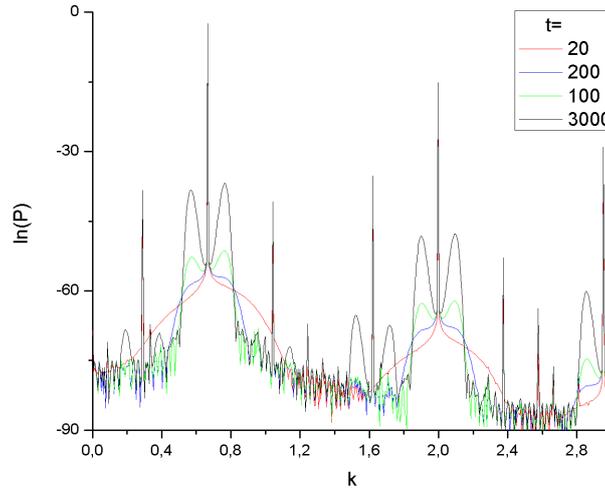


Figura 17: *Espectro de Potências para Modo Estável: configuração inicial de um modo com $k_i = 0,540$. $k_c = 0,8$; $\epsilon = 0,1$; $L = 1000$.*

sado pela instabilidade de Eckhaus, e, como discutido no fim da seção 3.4, a região de estabilidade terá fronteiras dadas por:

$$|\delta k_{\pm E}| \equiv \pm \sqrt{\frac{\epsilon}{3}} = \frac{\delta k_{\pm L}}{\sqrt{3}} \quad (5.1)$$

Foi comprovado por nossas simulações que mesmo para a equação de Swift-Hohenberg sem adição de ruído, a instabilidade de Eckhaus participa do processo de seleção do modo final. Isso pode ser visto na figura 18, onde a partir de flutuações numéricas, modos da região instável surgem e têm sua amplitude amplificada. Teremos, então, um processo de colapso (ou criação) de rolos até o sistema se estabilize com um novo comprimento de onda dominante. Isso pode ser visto nas figuras 19 e 20.

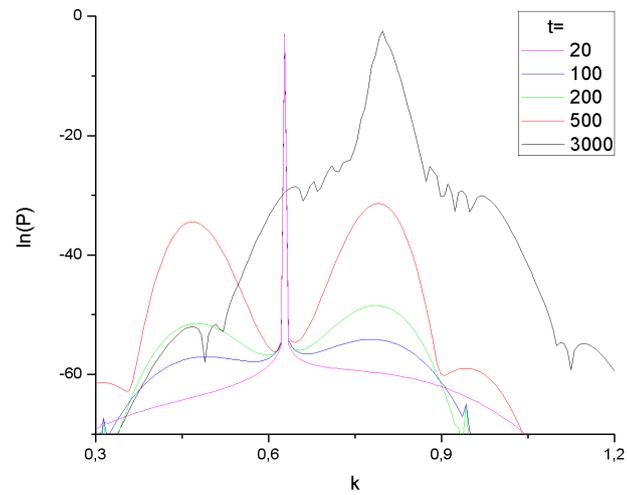


Figura 18: *Espectro de Potências para Modo Estável: configuração inicial de um modo com $k_i = 0,540$. $k_c = 0,8$; $\epsilon = 0,1$; $L = 1000$.*

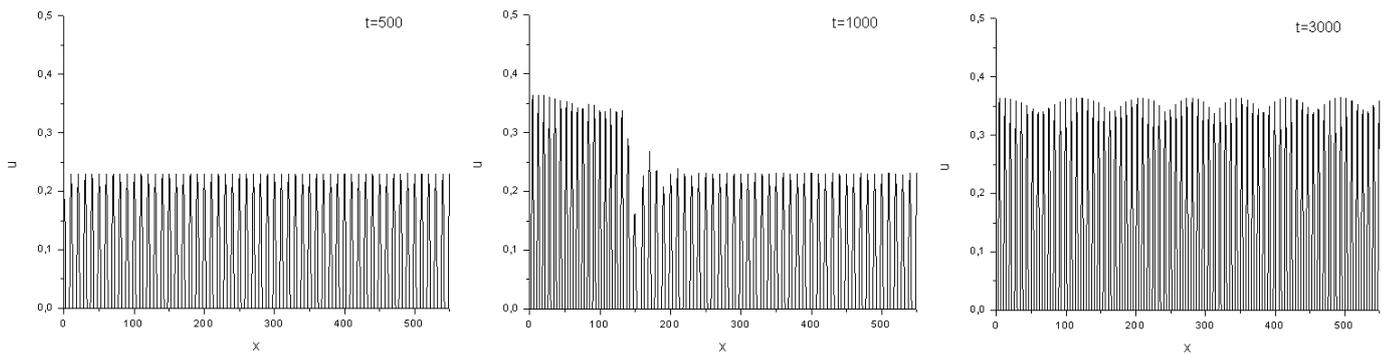


Figura 19: *Seleção do Padrão: perfil em diferentes tempos para condição inicial de modo único no espectro de Fourier, mostrando a mudança do modo dominante. $k_i = 0,628$; $k_c = 0,8$; $\epsilon = 0,1$; $L = 1000$.*

Pudemos, então, testar o domínio da instabilidade de Eckhaus plotando o modo final com o modo inicial, como visto na figura 21.

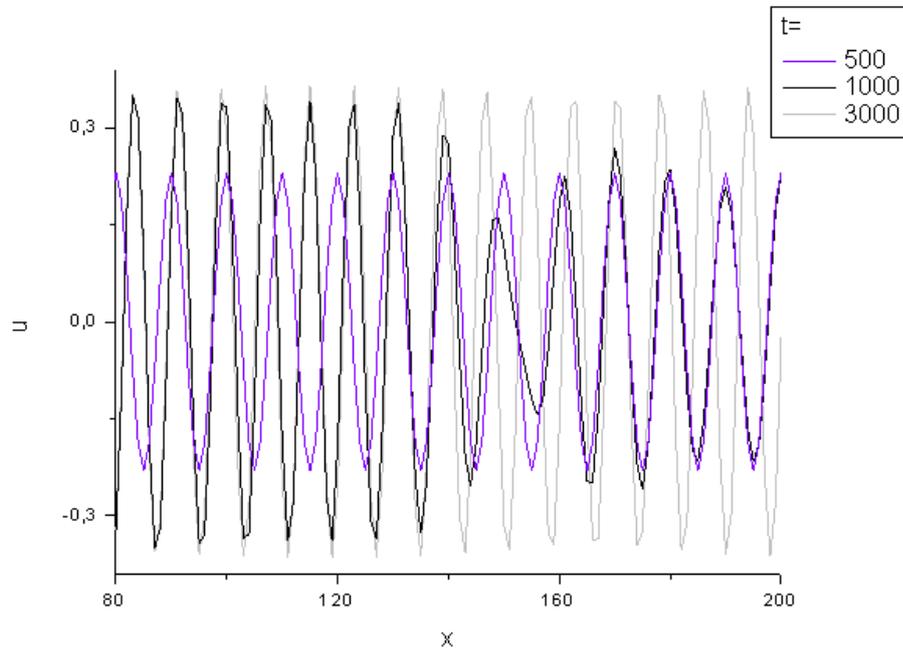


Figura 20: *Seleção do Padrão (detalhe): mesmas condições da figura 19. Note que em tempo 1000 a parte esquerda do perfil coincide com o “novo” comprimento de onda e a parte direita com o “antigo”.*

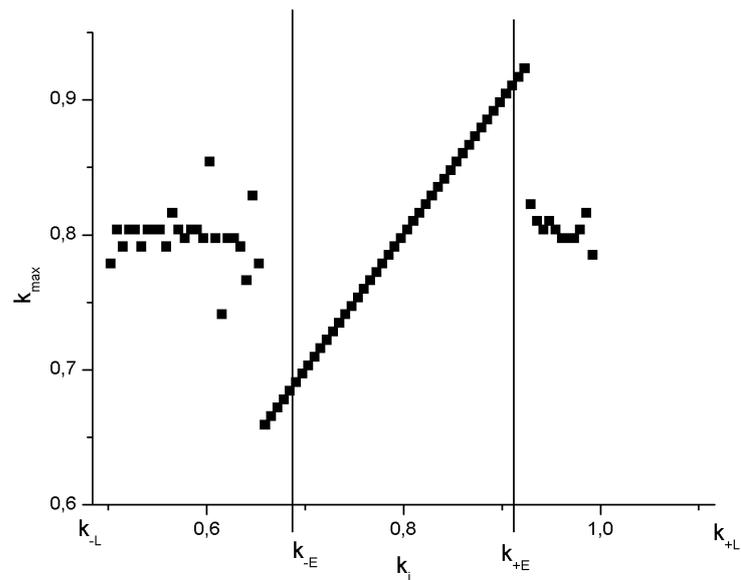


Figura 21: *Região de Estabilidade: k_{max} versus k_i para $k_c = 0.8$; $\epsilon = 0.1$; $L = 1000$. $k_{-L} \cong 0,4837$, $k_{-E} \cong 0,6174$, $k_{+E} \cong 0,9825$ e $k_{+L} \cong 1,1162$*

6 *Considerações finais*

Neste trabalho, estudamos a dinâmica da formação de padrões em rolos na equação de Swift-Hohenberg. A partir de uma revisão da literatura e análises teóricas pudemos traçar parte do comportamento do sistema, sendo este confirmado por simulações numéricas. Isso, no contexto de seleção do padrão ficou evidente na figura 21, onde confirmamos a delimitação da região de modos estáveis pela instabilidade secundária de Eckhaus com perfeita concordância. É importante ressaltar, entretanto, que essa instabilidade secundária surge na simulações mesmo na ausência de estocasticidade, de forma que podemos concluir que as flutuações advindas de erros numéricos são suficientes para que tais modos sejam abandonados durante a dinâmica. Temos, ainda, um estudo bastante interessante baseado na contagem de defeitos, a parte da definição destes defeitos baseada em variações de módulo ao longo do sistema. Obtivemos que a taxa de decaimento, γ , nos casos estudados, é maior que o que se espera para um processo de aniquilação de pares. Mais ainda, esta taxa γ tem uma dependência linear com o vetor de onda mais instável, como pudemos ver na figura 13.

Com este estudo, lançamos as bases para um entendimento da dinâmica do padrão, a partir de uma equação modelo motivada pela instabilidade hidrodinâmica da convecção. Nosso intuito maior é, ainda, estudar a possibilidade do controle do sistema, utilizando de um esquema de realimentação dos modos de Fourier quando certa condição é verificada¹. Isso é de fato feito em [21], tanto experimentalmente quanto em simulações para um sistema de reações químicas. Queremos, com isso, motivar tentativas experimentais de controlar a dinâmica da convecção, com inúmeras aplicações possíveis, em especial, em experimentos onde esta instabilidade é o pano de fundo para o processo de interesse.

¹ Este estudo já foi iniciado, tendo sido atrasado por dificuldades técnicas. Portanto não foi possível apresentar aqui qualquer resultado.

Referências

- [1] J. Swift and P. C. Hohenberg. Hydrodynamic fluctuations at the convective instability. *Phys. Rev. A*, 15(1):319–328, Jan 1977.
- [2] P. Manneville. *Dissipative structures and weak turbulence*. Academic Press, 1990.
- [3] S. Chandrasekhar. *Hydrodynamic and hydromagnetic stability*. Dover Pubns, 1981.
- [4] W.E. Boyce, R.C. DiPrima, and H. Macedo. *Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno*. Guanabara Koogan, 1994.
- [5] M. C. Cross and P. C. Hohenberg. Pattern formation outside of equilibrium. *Rev. Mod. Phys.*, 65(3):851, Jul 1993.
- [6] FH Busse. Non-linear properties of thermal convection. *Reports on Progress in Physics*, 41:1929–1967, 1978.
- [7] C.M. Bender and S.A. Orszag. *Advanced mathematical methods for scientists and engineers: Asymptotic methods and perturbation theory*. Springer Verlag, 1999.
- [8] P. Manneville. *Instabilities, chaos and turbulence: an introduction to nonlinear dynamics and complex systems*. World Scientific Publishing Company, 2004.
- [9] W. Eckhaus. *Studies in non-linear stability theory*. Springer-Verlag New York, 1965.
- [10] L. Kramer and W. Zimmermann. On the Eckhaus instability for spatially periodic patterns. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 16(2):221–232, 1985.
- [11] L. Kramer, HR Schober, and W. Zimmermann. Pattern competition and the decay of unstable patterns in quasi-one-dimensional systems. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 31(2):212–226, 1988.
- [12] M. Lowe and JP Gollub. Pattern selection near the onset of convection: the Eckhaus instability. *Physical review letters*, 55(23):2575–2578, 1985.
- [13] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery. *Numerical recipes in Fortran; the art of scientific computing*. Cambridge University Press New York, NY, USA, 1993.
- [14] J. García-Ojalvo and J.M. Sancho. *Noise in spatially extended systems*. Springer Verlag, 1999.
- [15] J. Viñals, E. Hernández-García, M. San Miguel, and R. Toral. Numerical study of the dynamical aspects of pattern selection in the stochastic Swift-Hohenberg equation in one dimension. *Physical Review A*, 44(2):1123–1133, 1991.

- [16] J. Viñals, H.W. Xi, and JD Gunton. Numerical study of the influence of forcing terms and fluctuations near onset on the roll pattern in Rayleigh-Bénard convection in a simple fluid. *Physical Review A*, 46(2):918–927, 1992.
- [17] E. Hernández-García, M. San Miguel, R. Toral, et al. Noise and pattern selection in the one-dimensional Swift-Hohenberg equation. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 61(1-4):159–165, 1992.
- [18] J. García-Ojalvo, A. Hernández-Machado, and J.M. Sancho. Effects of external noise on the Swift-Hohenberg equation. *Physical review letters*, 71(10):1542–1545, 1993.
- [19] DC Torney and HM McConnell. Diffusion-limited reaction rate theory for two-dimensional systems. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, pages 147–170, 1983.
- [20] D. Ben-Avraham and S. Havlin. *Diffusion and reactions in fractals and disordered systems*. Cambridge Univ Pr, 2000.
- [21] C. Beta, M.G. Moula, A.S. Mikhailov, H.H. Rotermund, and G. Ertl. Excitable CO oxidation on Pt (110) under nonuniform coupling. *Physical review letters*, 93(18):188302, 2004.