

MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS PARA LA APROXIMACIÓN DE UN MODELO DE CRISTALES LÍQUIDOS NEMÁTICOS

F. GUILLÉN-GONZÁLEZ, J.V. GUTIÉRREZ-SANTACREU

Dpto. Ecuaciones Diferenciales y Análisis Numérico
Dpto. Matemática Aplicada I
Universidad de Sevilla

guillen@us.es, juanvi@us.es

Resumen

En esta charla analizamos la aproximación numérica con elementos finitos en espacio y diferencias finitas en tiempo de un modelo de cristales líquidos nemáticos (de tipo Eriksen-Leslie) y de un modelo penalizado de tipo Ginzburg-Landau. Después de describir los principales antecedentes del tema, se propone un esquema lineal totalmente acoplado y condicionalmente estable. La convergente (respecto de los parámetros de discretización y del parámetro de penalización) hacia una solución débil del problema de Eriksen-Leslie queda como problema abierto.

Palabras clave: *Cristales líquidos, Navier-Stokes, estabilidad, convergencia, elementos finitos*

Clasificación por materias AMS: *35Q35 65M12 65M60*

1 Introducción

Supongamos $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un dominio acotado y de frontera Γ poliédrica tal que el problema de Stokes tenga regularidad $\mathbf{H}^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$ en velocidad y presión. Denotamos $Q = \Omega \times (0, T)$ y $\Sigma = \Gamma \times (0, T)$, donde $[0, T]$ es el intervalo temporal de observación, para $T > 0$. Las incógnitas son: $\mathbf{u} : Q \rightarrow \mathbb{R}^3$, el campo de velocidades, $p : Q \rightarrow \mathbb{R}$, la presión del fluido, y $\mathbf{d} : Q \rightarrow \mathbb{R}^3$, el vector orientación de las macromoléculas de cristales líquidos, verificando el problema en derivadas parciales (de tipo Eriksen-Leslie):

$$\left\{ \begin{array}{ll} |\mathbf{d}| = 1, & \partial_t \mathbf{d} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{d} - \gamma \Delta \mathbf{d} - \gamma |\nabla \mathbf{d}|^2 \mathbf{d} = \mathbf{0} & \text{en } Q, \\ \partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p + \lambda \nabla \cdot ((\nabla \mathbf{d})^t \nabla \mathbf{d}) = \mathbf{0} & \text{en } Q, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 & \text{en } Q, \\ \mathbf{u} = 0, \quad \mathbf{d} = \mathbf{l} & \text{en } \Sigma, \\ \mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}_0, \quad \mathbf{d}|_{t=0} = \mathbf{d}_0 & \text{en } \Omega, \end{array} \right. \quad (1)$$

donde $\mathbf{u}_0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ y $\mathbf{d}_0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ son los datos iniciales, $\mathbf{l} : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ es el dato de Dirichlet para \mathbf{d} , $\nu > 0$ es una constante dependiente de la viscosidad del fluido, $\lambda > 0$ es una constante de elasticidad y $\gamma > 0$ es una constante del tiempo de relajación. $(\nabla \mathbf{d})^t$ denota la matriz traspuesta de $\nabla \mathbf{d} = (\partial_j d_i)_{i,j}$.

Para este trabajo se supone el dato de Dirichlet para \mathbf{d} independiente del tiempo y la condición de compatibilidad $\mathbf{d}_0|_{\partial\Omega} = \mathbf{l}$. En principio los argumentos que desarrollaremos no son válidos para el caso dependiente del tiempo.

Este modelo se estudia a través del modelo penalizado, de tipo Ginzburg-Landau, que se obtiene de (1) relajando la restricción $|\mathbf{d}| = 1$ por $|\mathbf{d}| \leq 1$, y en el sistema para \mathbf{d} cambiando el término más no lineal $|\nabla \mathbf{d}|^2 \mathbf{d}$ (que es el multiplicador de Lagrange asociado a la restricción $|\mathbf{d}| = 1$) por el término de penalización $\mathbf{f}_\varepsilon(\mathbf{d}) = \varepsilon^{-2}(|\mathbf{d}|^2 - 1)\mathbf{d}$, asociado al parámetro $\varepsilon > 0$, llegando al sistema

$$\begin{cases} |\mathbf{d}| \leq 1, & \partial_t \mathbf{d} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{d} + \gamma(\mathbf{f}_\varepsilon(\mathbf{d}) - \Delta \mathbf{d}) = \mathbf{0} & \text{en } Q, \\ \partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p + \lambda \nabla \cdot ((\nabla \mathbf{d})^t \nabla \mathbf{d}) = \mathbf{0} & \text{en } Q, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 & \text{en } Q, \end{cases} \quad (2)$$

junto con las condiciones iniciales y de contorno de (1). Obsérvese que $\mathbf{f}_\varepsilon(\mathbf{d}) = \nabla_{\mathbf{d}}(F_\varepsilon(\mathbf{d}))$ para cada $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^3$ con F_ε la función potencial:

$$F_\varepsilon(\mathbf{d}) = \frac{1}{4\varepsilon^2}(|\mathbf{d}|^2 - 1)^2.$$

El problema (2) tiene la siguiente igualdad de energía (usada por *F. H. Liu* y *C. Liu* en [7] para obtener solución débil de (2)), imponiendo que $|\mathbf{d}_0| = 1$ en Q y $|\mathbf{l}| = 1$ sobre Σ :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \|\mathbf{u}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|\nabla \mathbf{d}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \lambda \int_{\Omega} F_\varepsilon(\mathbf{d}) dx \right) \\ + \nu \|\nabla \mathbf{u}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \lambda \gamma \|\mathbf{f}_\varepsilon(\mathbf{d}) - \Delta \mathbf{d}\|_{L^2(\Omega)}^2 = 0, \end{cases} \quad (3)$$

que se obtiene eligiendo $\lambda(\mathbf{f}_\varepsilon(\mathbf{d}) - \Delta \mathbf{d})$ y \mathbf{u} como funciones test en (2)_a y (2)_b, respectivamente. Esta expresión refleja la relación entre la energía cinética $\frac{1}{2} \|\mathbf{u}\|_{L^2(\Omega)}^2$ y la elástica $\frac{\lambda}{2} \|\nabla \mathbf{d}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \lambda \int_{\Omega} F_\varepsilon(\mathbf{d})$ e indica que la energía total del sistema decrece con el tiempo. Luego, una solución débil para (1) tendrá la regularidad

$$\mathbf{d} \in L^\infty(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega)), \quad \mathbf{u} \in L^\infty(0, T; \mathbf{L}^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; \mathbf{H}^1(\Omega)). \quad (4)$$

2 Antecedentes

Los primeros autores que tratan desde el punto de vista numérico el modelo (2) fueron C. Liu y N. J. Walkington en [6]. Proponen un método mixto para aproximar el sistema de momentos usando un par de elementos finitos globalmente C^0 que verifican la condición de estabilidad de tipo Babuska-Brezzi, y una aproximación de elementos finitos globalmente C^1 para el vector

de orientación. Pero resulta que la implementación de los elementos finitos globalmente C^1 es muy complicada.

En un trabajo posterior [9], estos mismos autores construyen un esquema mixto para el vector de orientación para evitar los elementos finitos de tipo C^1 . Ello lo logran introduciendo una nueva variable $\mathbf{w} = \nabla \mathbf{d}$, la cual incrementa el número de grados de libertad a calcular en cada etapa de tiempo.

Además, hay que decir que ambos esquemas son no lineales lo cual hacen aún más costoso el cálculo de la solución aproximada. Estos esquemas son analizados usando técnicas de estimaciones de error; suponiendo una solución suficientemente regular del problema continuo (2).

En [4], V. Girault y F. Guillén-González introducen un esquema (lineal) con una variable auxiliar $\mathbf{w} = -\Delta \mathbf{d}$ para el problema penalizado (2). Dicho esquema resulta ser incondicionalmente estable, respecto de los parámetros de discretización, y convergente hacia (2); obteniéndose además estimaciones de error óptimas y convergencia de métodos iterativos para desacoplar (\mathbf{u}, p) de (\mathbf{w}, \mathbf{d}) en cada etapa de tiempo ya que éste resulta totalmente acoplado. Este esquema reduce los grados de libertad a calcular respecto a los esquemas anteriores de [6] y [9] para (2) lo que implica un coste computacional menor, además de ser un esquema lineal.

En [8], P. Lin y C. Liu presentan dos esquemas numéricos lineales que sólo usan elementos finitos globalmente C^0 y localmente P_2 para la velocidad y el vector de orientación, y elementos finitos P_1 para la presión. El primero de ellos discretiza la derivada temporal usando diferencias finitas y el segundo con el método de las características. Estos esquemas son justificados observando el decaimiento de la energía en las experiencias numéricas.

En [2], se proponen un esquema numérico para (2) y otro para (1), considerando la condición frontera para el vector de orientación de tipo Neumann. Para construir el esquema de (2) definen la variable auxiliar $\mathbf{w} = -\Delta \mathbf{d} + \mathbf{f}_\varepsilon(\mathbf{d})$ reescribiendo el tensor

$$\lambda \nabla \cdot ((\nabla \mathbf{d})^t \nabla \mathbf{d}) = \lambda \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} |\nabla \mathbf{d}|^2 + F_\varepsilon(\mathbf{d}) \right) - \lambda (\nabla \mathbf{d})^t (-\Delta \mathbf{d} + \mathbf{f}_\varepsilon(\mathbf{d})) = \nabla q - \lambda (\nabla \mathbf{d})^t \mathbf{w}, \quad (5)$$

lo que introduce una presión modificada. La discretización de la parte no lineal de \mathbf{f}_ε se realiza de forma implícita, resultando un esquema no lineal. Se prueba la estabilidad incondicional, respecto de los parámetros de discretización y penalización, y convergencia hacia una solución débil de (2). A posteriori, hacen tender a cero el parámetro de penalización obteniendo una solución débil en el sentido con valores medidas de (1), debido a que no consiguen compacidad para $\nabla \mathbf{d}$. Para (1) desarrollan un esquema no lineal cuya idea principal es la reescritura del término no lineal

$$-|\nabla \mathbf{d}|^2 \mathbf{d} - \Delta \mathbf{d} = \mathbf{d} \times (\mathbf{d} \times \Delta \mathbf{d}) \quad (\text{usando } |\mathbf{d}| = 1)$$

y una discretización temporal de punto medio para este término no lineal. Este esquema es condicionalmente estable, pero la convergencia hacia una solución débil de (1) queda como problema abierto.

Destacamos que ninguno de los esquemas anteriormente descritos para el problema (2) convergen hacia una solución débil del problema (1), si $(h, k, \varepsilon) \rightarrow 0$.

3 Esquema numérico

En este trabajo aportamos la construcción un esquema lineal para (2) que sea estable, en el sentido que se tenga una versión discreta de la igualdad de energía (3). Hasta el momento no se sabe pasar al límite en el sistema de momentos hacia una solución débil de (1) con la regularidad (4), haciendo tender ε a cero junto con los parámetros discretos en espacio y tiempo (h, k) . La principal dificultad es la compacidad de $\nabla \mathbf{d}$ en $L^2(Q)$.

Denotaremos por (\cdot, \cdot) al producto escalar en $L^2(\Omega)$.

El esquema que proponemos para aproximar las incógnitas (velocidad, presión y vector de orientación) está basado en la siguiente formulación variacional mixta del problema (2): $\forall \bar{\mathbf{u}} \in \mathbf{H}_0^1, \bar{\mathbf{w}} \in \mathbf{L}^2, \bar{q} \in L_0^2, \bar{\mathbf{d}} \in \mathbf{H}_0^1$,

$$\begin{aligned} \left(\partial_t \mathbf{u}, \bar{\mathbf{u}} \right) + \nu \left(\nabla \mathbf{u}, \nabla \bar{\mathbf{u}} \right) + \left((\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}, \bar{\mathbf{u}} \right) - \left((\nabla \mathbf{d})^t \mathbf{w}, \bar{\mathbf{u}} \right) - \left(p, \nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} \right) &= 0, \\ \left(\partial_t \mathbf{d}, \bar{\mathbf{w}} \right) + \left((\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{d}, \bar{\mathbf{w}} \right) + \gamma \left(\mathbf{f}_\varepsilon(\mathbf{d}), \bar{\mathbf{w}} \right) + \gamma \left(\mathbf{w}, \bar{\mathbf{w}} \right) &= 0, \\ \left(\nabla \cdot \mathbf{u}, \bar{q} \right) &= 0, \\ \left(\nabla \mathbf{d}, \nabla \bar{\mathbf{d}} \right) - \left(\mathbf{w}, \bar{\mathbf{d}} \right) &= 0, \end{aligned}$$

donde hemos usado previamente la igualdad (5) e introducido la variable auxiliar $\mathbf{w} = -\Delta \mathbf{d} + \mathbf{f}_\varepsilon(\mathbf{d})$.

Suponemos por simplicidad, una partición uniforme de $[0, T]$ siendo $t_n = nk$, donde $k = T/N$ es el paso de tiempo con $N \in \mathbb{N}$. En cada etapa de tiempo, la velocidad, la presión y el vector de orientación $(\mathbf{u}, p, \mathbf{d})$ son aproximados en espacios de elementos finitos de funciones globalmente continuas $(\mathbf{X}_h, Q_h, \mathbf{D}_h) \subset (\mathbf{H}_0^1(\Omega), L_0^2(\Omega), \mathbf{H}^1(\Omega))$ y el laplaciano del vector de orientación \mathbf{w} es aproximado en un espacio de elementos finitos $\mathbf{W}_h \subset \mathbf{L}^2(\Omega)$. Los elementos finitos están asociados a una familia regular y quasi-uniforme de triangulaciones $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ de Ω tales que (\mathbf{X}_h, Q_h) verifican la condición *inf-sup* discreta y $(\mathbf{W}_h, \mathbf{D}_h)$ satisfacen $\mathbf{D}_h \subset \mathbf{W}_h$. Por ejemplo, la siguiente aproximación verifica las hipótesis anteriores:

$$P_1 + \text{bubble}/P_1 \quad \text{para } (\mathbf{X}_h, Q_h), \quad \text{y} \quad P_1/P_1 \quad \text{para } (\mathbf{W}_h, \mathbf{D}_h).$$

Además, suponemos las restricciones (de estabilidad) sobre los parámetros (k, h, ε) :

$$(S) \quad \lim_{(h,k,\varepsilon) \rightarrow 0} \frac{k}{h^2 \varepsilon^6} = 0 \quad \text{y} \quad \lim_{(h,k,\varepsilon) \rightarrow 0} \frac{h}{\varepsilon^2} = 0.$$

Entonces, el algoritmo numérico que presentamos consiste en:

Inicialización: Sea $(\mathbf{u}_h^0, \mathbf{d}_h^0) \in (\mathbf{X}_h, \mathbf{D}_h)$ determinadas aproximaciones de $(\mathbf{u}_0, \mathbf{d}_0)$, con $\mathbf{d}_h^0|_{\partial\Omega} = \mathbf{l}_h$ para \mathbf{l}_h una aproximación frontera de \mathbf{l} .

Etapa $n + 1$: Dado $(\mathbf{u}_h^n, \mathbf{d}_h^n) \in (\mathbf{X}_h, \mathbf{D}_h)$ con $\mathbf{d}_h^n|_{\partial\Omega} = \mathbf{l}_h$, encontrar $(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{w}_h^{n+1}) \in \mathbf{X}_h \times \mathbf{W}_h$ y $(p_h^{n+1}, \mathbf{d}_h^{n+1}) \in Q_h \times \mathbf{D}_h$ (con $\mathbf{d}_h^{n+1}|_{\partial\Omega} = \mathbf{l}_h$) tal que:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\mathbf{u}_h^{n+1} - \mathbf{u}_h^n}{k}, \bar{\mathbf{u}}_h \right) + c(\mathbf{u}_h^n, \mathbf{u}_h^{n+1}, \bar{\mathbf{u}}_h) + \nu(\nabla \mathbf{u}_h^{n+1}, \nabla \bar{\mathbf{u}}_h) \\ & - \lambda \left((\nabla \mathbf{d}_h^n)^t \mathbf{w}_h^{n+1}, \bar{\mathbf{u}}_h \right) - \left(p_h^{n+1}, \nabla \cdot \bar{\mathbf{u}}_h \right) = 0 \quad \forall \bar{\mathbf{u}}_h \in \mathbf{X}_h, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\left(\bar{p}_h, \nabla \cdot \mathbf{u}_h^{n+1} \right) = 0 \quad \forall \bar{p}_h \in Q_h, \quad (7)$$

$$\left(\frac{\mathbf{d}_h^{n+1} - \mathbf{d}_h^n}{k}, \bar{\mathbf{w}}_h \right) + \left((\mathbf{u}_h^{n+1} \cdot \nabla) \mathbf{d}_h^n, \bar{\mathbf{w}}_h \right) + \gamma(\mathbf{w}_h^{n+1}, \bar{\mathbf{w}}_h) = 0 \quad \forall \bar{\mathbf{w}}_h \in \mathbf{W}_h, \quad (8)$$

$$\left(\nabla \mathbf{d}_h^{n+1}, \nabla \bar{\mathbf{d}}_h \right) + \left(\mathbf{f}_\varepsilon(\mathbf{d}_h^n), \bar{\mathbf{d}}_h \right) = \left(\mathbf{w}_h^{n+1}, \bar{\mathbf{d}}_h \right) = 0 \quad \forall \bar{\mathbf{d}}_h \in \mathbf{D}_{0h} := \mathbf{D}_h \cap \mathbf{H}_0^1(\Omega), \quad (9)$$

donde hemos introducido la forma trilineal $c(\cdot, \cdot, \cdot)$ definida por

$$c(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \left((\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{v}, \mathbf{w} \right) + \frac{1}{2} \left(\nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{v}, \mathbf{w} \right) \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbf{H}_0^1(\Omega),$$

la cual muestra la propiedad de antisimetría $c(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{v}) = 0$ aunque \mathbf{u} no verifique la condición de incompresibilidad puntualmente. Notar que $\mathbf{d}_h^{n+1} - \mathbf{d}_h^n \in \mathbf{D}_{0h}$ gracias a que el dato de contorno \mathbf{l} para el vector de orientación no depende del tiempo.

4 Estabilidad condicional

En líneas generales, tomando primero $\bar{\mathbf{u}}_h = 2k \mathbf{u}_h^{n+1}$ en (6), $\bar{p}_h = p_h^{n+1}$ en (7), y luego $\bar{\mathbf{w}}_h = 2\lambda k \mathbf{w}_h^{n+1}$ en (8) conjuntamente con $\bar{\mathbf{d}}_h = \mathbf{d}_h^{n+1} - \mathbf{d}_h^n \in \mathbf{D}_{0h}$ en (9) y usando las igualdades

$$\begin{aligned} & - \left((\nabla \mathbf{d}_h^n)^t \mathbf{w}_h^{n+1}, \mathbf{u}_h^{n+1} \right) + \left(\mathbf{u}_h^{n+1} \cdot \nabla \mathbf{d}_h^n, \mathbf{w}_h^{n+1} \right) = 0, \\ & \left(\mathbf{u}_h^{n+1} \cdot \nabla \mathbf{d}_h^n, \mathbf{f}_\varepsilon(\mathbf{d}_h^n) \right) + \left(\nabla \cdot \mathbf{u}_h^{n+1}, F_\varepsilon(\mathbf{d}_h^n) \right) = 0, \end{aligned}$$

llegamos al siguiente resultado (ver [5] para los detalles). Denotamos por $|\cdot|$ a la norma en $L^2(\Omega)$.

Lema 1 (Desigualdad de energía discreta) *Supongamos que existe una constante $C_d > 0$ independiente de (h, k, ε) tal que $|\mathbf{u}_h^n|^2 + \lambda |\nabla \mathbf{d}_h^n|^2 \leq C_d$. Entonces, existen $h_0 > 0$, $k_0 > 0$ y $\varepsilon_0 > 0$ tales que para todo $h \leq h_0$, $k \leq k_0$ y $\varepsilon \leq \varepsilon_0$ satisfaciendo la hipótesis (S), la solución correspondiente $(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{d}_h^{n+1}, \mathbf{w}_h^{n+1})$ del problema discreto (6)-(9) verifica la siguiente desigualdad:*

$$\begin{aligned} & \left(|\mathbf{u}_h^{n+1}|^2 - |\mathbf{u}_h^n|^2 \right) + \nu k |\nabla \mathbf{u}_h^{n+1}|^2 + \lambda \left(|\nabla \mathbf{d}_h^{n+1}|^2 - |\nabla \mathbf{d}_h^n|^2 \right) \\ & + 2\lambda \int_{\Omega} (F_\varepsilon(\mathbf{d}_h^{n+1}) - F_\varepsilon(\mathbf{d}_h^n)) + \lambda \gamma k |\mathbf{w}_h^{n+1}|^2 \leq 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Por un proceso de inducción sobre la etapa de tiempo [5] se puede acotar las aproximaciones $(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{d}_h^{n+1})$ en los espacios discretos de (4) y \mathbf{w}_h^{n+1} en $L^2(0, T; \mathbf{L}^2(\Omega))$.

5 Compacidad para \mathbf{u} y \mathbf{d} . Convergencia del sistema en \mathbf{d}

Eligiendo como función test $\bar{\mathbf{w}}_h = P_h \bar{\mathbf{w}}$ en (8), con $\mathbf{w} \in \mathbf{L}^3(\Omega)$ y P_h el proyector ortogonal en L^2 sobre \mathbf{W}_h , y usando las estimaciones del Lema 1 y la estabilidad en $L^3(\Omega)$ de P_h ([3]), obtenemos

$$k \sum_{n=0}^{N-1} \left\| \frac{\mathbf{d}_h^{n+1} - \mathbf{d}_h^n}{k} \right\|_{L^{3/2}(\Omega)}^2 \leq C.$$

Como consecuencia de esta estimación y de las estimaciones de estabilidad del Lema 1, conseguimos la compacidad de la sucesión $(\mathbf{d}_{h,k,\varepsilon})$ en $L^q(0, T; L^r(\Omega))$ con $1 \leq r < 6$ y $1 \leq q < \infty$, donde $\mathbf{d}_{h,k,\varepsilon}$ es la función continua y lineal a trozos tal que $\mathbf{d}_{h,k,\varepsilon}(t_n) = \mathbf{d}_h^n$.

Para la compacidad de la velocidad discreta $\{\mathbf{u}_h^{n+1}\}$ consideramos el espacio de velocidades de divergencia discreta cero

$$\mathbf{V}_h = \{\mathbf{v}_h \in \mathbf{X}_h : (\nabla \cdot \mathbf{v}_h, q_h) = 0 \forall q_h \in Q_h\}.$$

Primero, se llega a las siguientes estimaciones de una derivada fraccionaria para $\mathbf{u}_{h,k,\varepsilon}$ (la función constante a trozos que vale $\mathbf{u}_{h,k,\varepsilon}(t) = \mathbf{u}_h^{n+1}$ en $(t_n, t_{n+1}]$):

$$\int_0^{T-\delta} \|\mathbf{u}_{h,k,\varepsilon}(t+\delta) - \mathbf{u}_{h,k,\varepsilon}(t)\|_{\mathbf{V}'_h}^2 dt \leq C \delta^{1/2} \quad \forall \delta : 0 < \delta < T.$$

Nótese que la derivada fraccionaria en tiempo para la velocidad discreta ha sido acotada en la norma \mathbf{V}'_h la cual “se mueve” con respecto al parámetro de espacio h , por lo que no podemos aplicar los resultados de compacidad dados por *J. Simon* en [10]. La siguiente idea es encontrar una norma, que no dependa de los parámetros de discretización, donde la derivada fraccionaria en tiempo pueda ser acotada. Para ello, consideramos el espacio $\mathbf{V} = \{\mathbf{u} \in \mathbf{H}_0^1(\Omega) : \nabla \cdot \mathbf{u} = 0\}$ y la proyección ortogonal $R_h : \mathbf{V}_h \rightarrow \mathbf{V}$ tal que $(\nabla(R_h \mathbf{u}_h - \mathbf{u}_h), \nabla \mathbf{v}) = 0, \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}$. Usando este operador R_h se prueba [5] que $\|R_h \mathbf{u}_h\|_{\mathbf{V}'} \leq C(h|\nabla \cdot \mathbf{u}_h| + \|\mathbf{u}_h\|_{\mathbf{V}'_h})$ y la estimación

$$\int_0^{T-\delta} \|R_h \mathbf{u}_{h,k,\varepsilon}(t+\delta) - R_h \mathbf{u}_{h,k,\varepsilon}(t)\|_{\mathbf{V}'}^2 dt \leq C \delta^{1/2} + C h.$$

Entonces, la convergencia fuerte de una subsucesión $(R_h \mathbf{u}_{h,k,\varepsilon})$ en $L^2(L^2)$ se deduce a partir de un resultado obtenido (de compacidad por perturbación) por P. Azérad y F. Guillén-González [1].

Finalmente, gracias a la aproximación (externa) de \mathbf{V}_h a \mathbf{V} , se tiene [5] la convergencia fuerte de $(\mathbf{u}_{h,k,\varepsilon})$ en $L^2(L^2(\Omega))$. Con las convergencias obtenidas

hasta el momento es posible pasar al límite en el sistema (8)-(9) y obtener (\mathbf{u}, \mathbf{d}) verificando (1)₁.

La convergencia para el sistema de momentos discreto queda condicionada a la compacidad del $\nabla \mathbf{d}$. Sin embargo, es posible obtener una convergencia más débil tal y como se hace en [2].

6 Experiencias numéricas

La siguiente experiencia numérica muestra el comportamiento dinámico de cristales líquidos en presencia de singularidades (o puntos de defectos). Consideremos $\Omega = (-1, 1) \times (-1, 1)$, una triangulación uniforme de Ω de talla $h = \frac{1}{16}$ y un paso de tiempo $k = \frac{1}{400}$. Los parámetros son $\lambda = \nu = \gamma = 1$ y $\varepsilon = 0,05$.

Tomamos las condiciones iniciales $\mathbf{u}_0 = 0$ y $\mathbf{d}_0 = \widehat{\mathbf{d}} / \sqrt{|\widehat{\mathbf{d}}|^2 + 0,05^2}$, donde $\widehat{\mathbf{d}} = (x^2 + y^2 - 0,25, y)$. Obsérvese que el vector orientación tiene dos singularidades en el tiempo inicial en $(\pm 1/2, 0)$ (puntos en los cuales $\widehat{\mathbf{d}} = (0, 0)$) como se muestra en la Figura 1. A continuación, mostramos la evolución de las dos singularidades en $t = 0, 0.2, 0.3$ y 0.4 , respectivamente. Su aniquilación se produce en torno a $t = 0,33$.

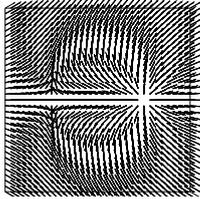


Figura 1: Vector orientación $t=0$

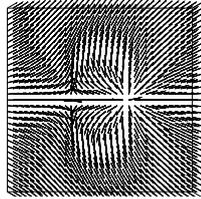


Figura 2: Vector orientación $t=0.2$

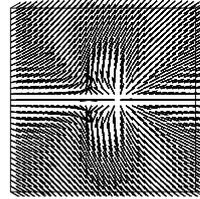


Figura 3: Vector orientación $t=0.3$

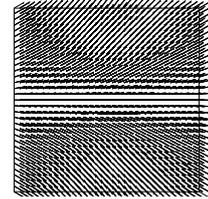


Figura 4: Vector orientación $t=0.4$

En las próximas figuras mostramos el comportamiento de la energía cinética $E_{cin} = \frac{1}{2} \|\mathbf{u}_h^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2$, la energía elástica $E_{elas} = \frac{\lambda}{2} \|\nabla \mathbf{d}_h^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2$, la energía de penalización $E_{pen} = \frac{\lambda}{2} \int_{\Omega} F_{\varepsilon}(\mathbf{d}_h^{n+1})$ y la energía total $E_{tot} = E_{kin} + E_{elas} + E_{pen}$ que decae con el tiempo tal y como ocurre para la energía continua (3). En particular, se puede observar el cambio significativo de las energías que se produce en torno al tiempo de aniquilación.

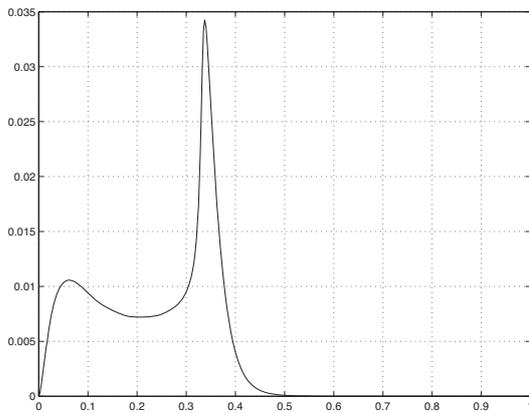


Figura 5: Energía cinética

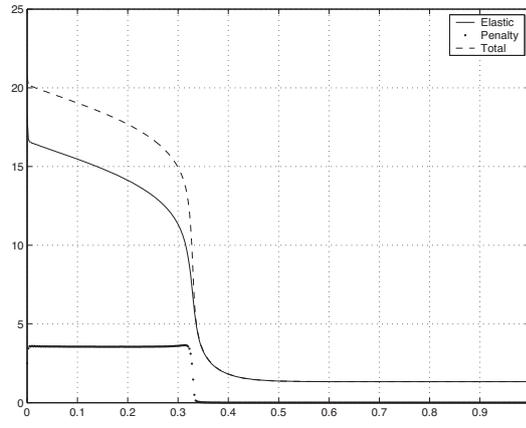


Figura 6: Energía cinética, de penalización y total

Referencias

- [1] P. Azérad, F. Guillén-González. *Mathematical justification of the hydrostatic approximation in the primitive equations of geophysical fluid dynamics*. SIAM J. Math. Anal. 33 (2001), no. 4, 847–859.
- [2] R. Becker, X. Feng, A. Prohl. *Finite element approximations of the Ericksen-Leslie model for nematic liquid crystal flow*. SIAM J. Numer. Anal. 46 (2008), no. 4, 1704–1731.
- [3] J. J. Douglas, T. Dupont, L. Wahlbin. *The stability in L^q of the L^2 -projection into finite element function spaces*. Numer. Math. 23 (1974/75), 193–197.
- [4] V. Girault, F. Guillén-González. *Mixed formulation, approximation and decoupling algorithm for a nematic liquid crystals model*. In preparation.
- [5] F. Guillén-González and J.V. Gutiérrez-Santacreu. In preparation.
- [6] C. Liu, N.J. Walkington. *Mixed methods for the approximation of liquid crystal flows*. M2AN Math. Model. Numer. Anal. 36 (2002), no. 2, 205–222.
- [7] F.H. LIN, C. LIU. *Non-parabolic dissipative systems modelling the flow of liquid crystals*. Comm. Pure Appl. Math. 48, (1995), 501-537.
- [8] P. Lin, C. Liu. *Simulations of singularity dynamics in liquid crystal flows: A C^0 finite element approach*. Journal of Computational Physics 215 (2006) 348-362.
- [9] C. Liu, N.J. Walkington. *Approximation of liquid crystal flows*. SIAM J. Numer. Anal. 37 (2000), no. 3, 725–741.
- [10] J. Simon. *Compact sets in $L^p(0, T; B)$* . Ann. Mat. Pura Appl., sér. IV, CXLVI (1987), 65–96.