XX Congreso de Ecuaciones Diferenciales y Aplicaciones
X Congreso de Matemática Aplicada
Sevilla, 24-28 septiembre 2007
(pp. 1–8)

Aproximación de un modelo de cristales líquidos nemáticos con un esquema completamente discreto y penalizado

F. Guillén-González[1], J.V. Gutiérrez-Santacreu[1]

[1] *Dpto. E.D.A.N., Universidad de Sevilla, Aptdo. 1160, E-41080 Sevilla. E-mails:* guillen@us.es, juanvi@us.es.

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

Resumen

En esta comunicación proponemos y analizamos un esquema numérico totalmente discreto con elementos finitos en espacio y diferencias finitas en tiempo para aproximar un modelo de cristales líquidos nemáticos (de tipo Eriksen-Leslie) por medio de un modelo penalizado de tipo Ginzburg-Landau. Se muestra la estabilidad y convergencia de dicho esquema hacia una solución débil del problema continuo, respecto de los parámetros de discretización y del parámetro de penalización.

1. Introdución

Supongamos $\Omega \subset \mathbf{R}^3$ un dominio acotado y de frontera $\partial\Omega$ poliédrica tal que el problema de Stokes tenga regularidad $W^{1,\infty} \times L^\infty$ 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: $\boldsymbol{u} : Q \to \mathbf{R}^3$ el campo de velocidades, $p : Q \to \mathbf{R}$ la presión del fluido y $\boldsymbol{d} : Q \to \mathbf{R}^3$ la orientación de las macromoléculas de cristales líquidos, verificando el siguiente problema en derivadas parciales:

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

donde $\boldsymbol{u}_0 : \Omega \to \mathbf{R}^3$ y $\boldsymbol{d}_0 : \Omega \to \mathbf{R}^3$ son las condiciones iniciales, $\boldsymbol{l} : \partial\Omega \to \mathbf{R}^3$ es la condición de Dirichlet para el vector de orientación $\boldsymbol{d}$, $\nu > 0$ 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. $(\nabla \boldsymbol{d})^t$ denota la matriz traspuesta de $\nabla \boldsymbol{d}$.

Decir que se supone la condición de Dirichlet para $\boldsymbol{d}$ independiente del tiempo, luego en consecuencia $\boldsymbol{d}_0\big|_{\partial\Omega} = \boldsymbol{l}$. En principio los argumentos que desarrollaremos no son válidos para el caso dependiente del tiempo.

Imponiendo que $|\boldsymbol{d}_0| = 1$ en Q y $|\boldsymbol{l}| = 1$ sobre Σ, se tiene existencia de solución global en tiempo de (1) con la siguiente regularidad:

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

Esta solución se encuentra mediante un proceso asintótico [5], a partir del modelo penalizado, de tipo Ginzburg-Landau, que se obtiene de (1) relajando la restricción $|\boldsymbol{d}| = 1$ por $|\boldsymbol{d}| \leq 1$, y en el sistema para $\boldsymbol{d}$ cambiando el término más no lineales $|\nabla \boldsymbol{d}|^2 \boldsymbol{d}$ (dependiente del multiplicador de Lagrange asociado a la restricción$|\boldsymbol{d}| = 1$) por el término de penalización $\boldsymbol{f}_\varepsilon(\boldsymbol{d}) = \varepsilon^{-2}(|\boldsymbol{d}|^2 - 1)\boldsymbol{d}$, asociado al parámetro $\varepsilon > 0$, llegando

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

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

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

Las principales dificultades para diseñar esquemas numéricos estables y convergentes para el modelo penalizado (2) son: aproximar $\boldsymbol{d}$ con elementos finitos sólo globalmente continuos aunque la regularidad de $\boldsymbol{d}$ es H^2 y obtener información de la restricción $|\boldsymbol{d}| \leq 1$ aunque el esquema numérico no verifique puntualmente dicha restricción. En [3] se introduce un esquema (lineal) con una variable auxiliar para aproximar $-\Delta\boldsymbol{d}$, que resulta ser incondicionalmente estable y convergente hacia (2), obteniéndose además estimaciones de error y convergencia de métodos iterativos para desacoplar el esquema. Ver también los trabajos previos [6, 7] para otros esquemas menos eficientes para (2).

El objetivo de este trabajo es diseñar esquemas numéricos estables y convergentes hacia (1) a través del modelo penalizado, haciendo tender $\varepsilon \to 0$ junto con los parámetros discretos en espacio y tiempo (h,k). Para ello, nos encontramos con las siguientes dificultades principales:

1. Obtener estimaciones de estabilidad independientes de ε, ya que las estimaciones de los esquemas anteriores explotan cuando $\varepsilon \to 0$.

2. Se pierde la regularidad H^2 para $\boldsymbol{d}$, que dificulta primero la compacidad L^2 para $\boldsymbol{u}$, que se usa en el paso al límite en el sistema para $\boldsymbol{d}$ y segundo la compacidad L^2 para $\nabla\boldsymbol{d}$ fundamental para pasar al limite en el sistema de momentos.

Presentaremos un esquema numérico lineal aunque completamente acoplado, condicionalmente estable bajo restricciones que involucran los tres parámetros (h,k,ε) y convergente hacia una solución débil del problema (1).

2. Esquema numérico

Denotaremos por $\Big(\cdot,\cdot\Big)$ 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) (ver [3] para más detalles):

$$\begin{aligned}
\Big(\partial_t \boldsymbol{u},\bar{\boldsymbol{u}}\Big)+\nu\Big(\nabla\boldsymbol{u},\nabla\bar{\boldsymbol{u}}\Big)+\Big((\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u},\bar{\boldsymbol{u}}\Big)-\Big((\nabla\boldsymbol{d})^t\boldsymbol{w},\bar{\boldsymbol{u}}\Big)-\Big(p,\nabla\cdot\bar{\boldsymbol{u}}\Big) &= 0, \quad \forall\bar{\boldsymbol{u}}\in\boldsymbol{H}^1_0,\\
\Big(\partial_t\boldsymbol{d},\bar{\boldsymbol{w}}\Big)+\Big((\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{d},\bar{\boldsymbol{w}}\Big)+\gamma\Big(\boldsymbol{f}_\varepsilon(\boldsymbol{d}),\bar{\boldsymbol{w}}\Big)+\gamma\Big(\boldsymbol{w},\bar{\boldsymbol{w}}\Big) &= 0, \quad \forall\bar{\boldsymbol{w}}\in\boldsymbol{L}^2,\\
\Big(\nabla\cdot\boldsymbol{u},\bar{q}\Big) &= 0, \quad \forall\bar{q}\in L^2_0,\\
\Big(\nabla\boldsymbol{d},\nabla\bar{\boldsymbol{d}}\Big)-\Big(\boldsymbol{w},\bar{\boldsymbol{d}}\Big) &= 0, \quad \forall\bar{\boldsymbol{d}}\in\boldsymbol{H}^1_0,
\end{aligned}$$

donde hemos usado previamente la igualdad

$$\nabla\cdot((\nabla\boldsymbol{d})^t\nabla\boldsymbol{d})=\frac{1}{2}\nabla(|\nabla\boldsymbol{d}|^2)+(\nabla\boldsymbol{d})^t\Delta\boldsymbol{d},$$

modificado la presión $p\sim p+\dfrac{1}{2}|\nabla\boldsymbol{d}|^2$ e introducido la variable auxiliar $\boldsymbol{w}=-\Delta\boldsymbol{d}$.

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 $(\boldsymbol{u},p,\boldsymbol{d})$ son aproximados en espacios de elementos finitos de funciones globalmente continuas $(\boldsymbol{X}_h,Q_h,\boldsymbol{D}_h)\subset(\boldsymbol{H}^1_0(\Omega),L^2_0(\Omega),\boldsymbol{H}^1(\Omega))$ y el laplaciano del vector de orientación $\boldsymbol{w}$ es aproximado en un espacio de elementos finitos de funciones discontinuas a trozos $\boldsymbol{W}_h\subset\boldsymbol{L}^2(\Omega)$. Los elementos finitos están asociados a una familia regular y quasi-uniforme de triangulaciones $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ de Ω tales que $(\boldsymbol{X}_h,Q_h)$ verifican la condición *inf-sup* discreta y $(\boldsymbol{W}_h,\boldsymbol{D}_h)$ satisfacen:

$$(\boldsymbol{X}_h\cdot\nabla)\boldsymbol{D}_h\subset\boldsymbol{W}_h \quad \text{y} \quad \boldsymbol{D}_h\subset\boldsymbol{W}_h.$$

Por ejemplo, la siguiente aproximación verifica las hipótesis anteriores:

$$P_1+\mathit{bubble}/P_1 \quad \text{para } (\boldsymbol{X}_h,Q_h),$$

$$P_1+\mathit{bubble}(\mathit{discontinuos})/P_1 \quad \text{para } (\boldsymbol{W}_h,\boldsymbol{D}_h).$$

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

$$\text{(S)} \qquad \lim_{(h,k,\varepsilon)\to 0}\frac{k}{h^2\varepsilon^6}\to 0 \quad \text{y} \quad \lim_{(h,k,\varepsilon)\to 0}\frac{h}{\varepsilon^4}\to 0.$$

Entonces, el algoritmo numérico que presentamos consiste en:

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

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

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\boldsymbol{u}^{n+1}_h-\boldsymbol{u}^n_h}{k},\bar{\boldsymbol{u}}_h\right)+\Big((\boldsymbol{u}^n_h\cdot\nabla)\boldsymbol{u}^{n+1}_h,\bar{\boldsymbol{u}}_h\Big)+\frac{1}{2}\Big(\nabla\cdot\boldsymbol{u}^n_h\,\boldsymbol{u}^{n+1}_h,\bar{\boldsymbol{u}}_h\Big)+\nu\Big(\nabla\boldsymbol{u}^{n+1},\nabla\bar{\boldsymbol{u}}_h\Big)\\
&-\lambda\Big((\nabla\boldsymbol{d}^n_h)^t\boldsymbol{w}^{n+1}_h,\bar{\boldsymbol{u}}_h\Big)+\lambda\Big(\nabla\cdot\bar{\boldsymbol{u}}_h,F_\varepsilon(\boldsymbol{d}^n_h)\Big)-\Big(\widetilde{p}^{n+1}_h,\nabla\cdot\bar{\boldsymbol{u}}_h\Big)=0, \quad \forall\,\bar{\boldsymbol{u}}_h\in\boldsymbol{X}_h,
\end{aligned} \tag{3}$$

$$\left(\bar{p}_h, \nabla\cdot \boldsymbol{u}_h^{n+1}\right) = 0, \quad \forall\, \bar{p}_h \in Q_h, \tag{4}$$

$$\left(\frac{\boldsymbol{d}_h^{n+1}-\boldsymbol{d}_h^n}{k}, \bar{\boldsymbol{w}}_h\right) + \left((\boldsymbol{u}_h^{n+1}\cdot\nabla)\boldsymbol{d}_h^n, \bar{\boldsymbol{w}}_h\right) + \gamma\left(\boldsymbol{f}_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n) + \boldsymbol{w}_h^{n+1}, \bar{\boldsymbol{w}}_h\right) = 0, \quad \forall\, \bar{\boldsymbol{w}}_h \in \boldsymbol{W}_h, \tag{5}$$

$$\left(\nabla \boldsymbol{d}_h^{n+1}, \nabla \bar{\boldsymbol{d}}_h\right) - \left(\boldsymbol{w}_h^{n+1}, \bar{\boldsymbol{d}}_h\right) = 0, \quad \forall\, \bar{\boldsymbol{d}}_h \in \boldsymbol{D}_{0h} := \boldsymbol{D}_h \cap \boldsymbol{H}_0^1(\Omega), \tag{6}$$

donde $\widetilde{p}_h^{n+1} = p_h^{n+1} + \lambda F_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n)$ es una presión modificada debido al termino estabilizador de tipo potencial $\lambda\Big(\nabla\cdot\bar{\boldsymbol{u}}_h, F_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n)\Big)$. Notar que $\boldsymbol{d}_h^{n+1} - \boldsymbol{d}_h^n \in \boldsymbol{D}_{0h}$ gracias a que el dato de contorno $\boldsymbol{l}$ para el vector de orientación no depende del tiempo.

Ya que el esquema (3)-(6) es un sistema lineal algebraico es fácil comprobar la existencia y unicidad de solución una vez que las estimaciones a priori sean obtenidas en la Sección siguiente.

3. Estabilidad condicional

En líneas generales, tomando primero $\bar{\boldsymbol{u}}_h = 2\,k\,\boldsymbol{u}_h^{n+1}$ en (3), $\bar{p}_h = p_h^{n+1}$ en (4), y luego $\bar{\boldsymbol{w}}_h = 2\,\lambda\,k\left(\boldsymbol{w}_h^{n+1} + P_h(\boldsymbol{f}_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n))\right)$ en (5) conjuntamente con $\bar{\boldsymbol{d}}_h = \boldsymbol{d}_h^{n+1} - \boldsymbol{d}_h^n \in \boldsymbol{D}_{0h}$ en (6), donde P_h es el proyector en $L^2(\Omega)$ sobre $\boldsymbol{W}_h$, y usando las igualdades

$$-\Big((\nabla \boldsymbol{d}_h^n)^t \boldsymbol{w}_h^{n+1}, \boldsymbol{u}_h^{n+1}\Big) + \Big(\boldsymbol{u}_h^{n+1}\cdot\nabla \boldsymbol{d}_h^n, \boldsymbol{w}_h^{n+1}\Big) = 0,$$

$$\Big(\boldsymbol{u}_h^{n+1}\cdot\nabla \boldsymbol{d}_h^n, \boldsymbol{f}_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n)\Big) + \Big(\nabla\cdot \boldsymbol{u}_h^{n+1}, F_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n)\Big) = 0,$$

llegamos al siguiente resultado (ver [4] para los detalles). Denotamos por $|\cdot|$ a la norma en $L^2(\Omega)$.

Lema 1 *Supongamos que existe una constante $C_d > 0$ independiente de (h, k, ε) tal que*

$$|\boldsymbol{u}_h^n|^2 + \lambda |\nabla \boldsymbol{d}_h^n|^2 \le C_d.$$

Entonces, existen $h_0 > 0$, $k_0 > 0$ y $\varepsilon_0 > 0$ tales que para todo $h \le h_0$, $k \le k_0$ y $\varepsilon \le \varepsilon_0$ satisfaciendo la hipótesis (S), la solución correspondiente $(\boldsymbol{u}_h^{n+1}, \boldsymbol{d}_h^{n+1}, \boldsymbol{w}_h^{n+1})$ del problema discreto (3)-(6) verifica la siguiente desigualdad:

$$\left\{\begin{array}{l} \Big(|\boldsymbol{u}_h^{n+1}|^2 - |\boldsymbol{u}_h^n|^2 + |\boldsymbol{u}_h^{n+1} - \boldsymbol{u}_h^n|^2\Big) + \nu k |\nabla \boldsymbol{u}_h^{n+1}|^2 \\ +\lambda\Big(|\nabla \boldsymbol{d}_h^{n+1}|^2 - |\nabla \boldsymbol{d}_h^n|^2 + |\nabla(\boldsymbol{d}_h^{n+1} - \boldsymbol{d}_h^n)|^2\Big) + \lambda\gamma k |P_h(\boldsymbol{f}_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n)) + \boldsymbol{w}_h^{n+1}|^2 \\ +2\lambda \displaystyle\int_\Omega (F_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^{n+1}) - F_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n)) + \frac{\lambda}{\varepsilon^2}\int_\Omega \Big(\frac{1}{4}(|\boldsymbol{d}_h^{n+1}|^2 - |\boldsymbol{d}_h^n|^2)^2 + |\boldsymbol{d}_h^{n+1} - \boldsymbol{d}_h^n|^2\Big) \le 0. \end{array}\right. \tag{7}$$

A continuación, por un proceso de inducción sobre la etapa de tiempo apoyándonos en el lema anterior establecemos el siguiente resultado:

Teorema 2 *Existen h_0, k_0 y ε_0 de modo que para cualquier $h \le h_0$, $k \le k_0$ y $\varepsilon \le \varepsilon_0$ satisfaciendo (S), la solución del problema discreto (3)-(6) verifica las estimaciones:*

$$\textit{i)} \max_{0\le n\le N} |\boldsymbol{u}_h^n| \le C, \qquad \textit{ii)}\, k\sum_{n=0}^{N-1} |\nabla \boldsymbol{u}_h^{n+1}|^2 \le C, \qquad \textit{iii)} \sum_{n=0}^{N-1} |\boldsymbol{u}_h^{n+1}-\boldsymbol{u}_h^n|^2 \le C,$$

$$\textit{iv)} \max_{0\le n\le N} \|\boldsymbol{d}_h^n\|_{H^1(\Omega)} \le C, \qquad \textit{v)}\, k\sum_{n=0}^{N-1} |P_h(\boldsymbol{f}_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n)) + \boldsymbol{w}_h^{n+1}|^2 \le C \qquad \textit{vi)} \sum_{n=0}^{N-1} \|\boldsymbol{d}_h^{n+1}-\boldsymbol{d}_h^n\|_{H^1(\Omega)}^2 \le C,$$

$$\textit{vii)} \max_{0\le n\le N} \int_\Omega F_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n) \le C \qquad \textit{viii)}\, \frac{1}{\varepsilon^2}\sum_{n=0}^{N-1} \int_\Omega (|\boldsymbol{d}_h^{n+1}|^2 - |\boldsymbol{d}_h^n|^2)^2 \le C \qquad \textit{ix)}\, \frac{1}{\varepsilon^2}\sum_{n=0}^{N-1} \int_\Omega |\boldsymbol{d}_h^{n+1}-\boldsymbol{d}_h^n|^2 \le C$$

donde $C > 0$ es una constante independiente de (k, h, ε).

4. Compacidad para $\boldsymbol{u}$ y $\boldsymbol{d}$

Eligiendo como función test $\bar{\boldsymbol{w}}_h = P_h \bar{\boldsymbol{w}}$ en (5), con $\boldsymbol{w} \in \boldsymbol{L}^3(\Omega)$, y usando las estimaciones del Teorema 2 y la estabilidad en $L^3(\Omega)$ del proyector ortogonal en L^2 sobre $\boldsymbol{W}_h$ ([2]), obtenemos

Lema 3 *Bajo las condiciones del Teorema 2, se tiene*

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

donde $C > 0$ una constante independiente de (k, h, ε).

Como consecuencia de este lema y de las estimaciones de estabilidad del Teorema 2, conseguimos la compacidad de la sucesión $(\boldsymbol{d}_{h,k,\varepsilon})$ en $L^q(0,T;L^r(\Omega))$ con $1 \le r < 6$ y $1 \le q < \infty$, donde $\boldsymbol{d}_{h,k,\varepsilon}$ es la función continua y lineal a trozos que vale $\boldsymbol{d}_{h,k,\varepsilon}(t_n) = \boldsymbol{d}_h^n$.

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

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

y consideramos $A_h^{-1} : \boldsymbol{V}_h \to \boldsymbol{V}_h$ el inverso del operador de Stokes discreto definido como

$$\Big(\nabla A_h^{-1}\boldsymbol{u}_h, \nabla \boldsymbol{v}_h\Big) = \Big(\boldsymbol{u}_h, \boldsymbol{v}_h\Big), \quad \forall\, \boldsymbol{v}_h \in \boldsymbol{V}_h.$$

Se puede probar que $|\nabla A_h^{-1}\boldsymbol{u}_h|$ y $\|\boldsymbol{u}_h\|_{\boldsymbol{V}_h'}$ son normas equivalentes ($\boldsymbol{V}_h'$ es el dual de $\boldsymbol{V}_h$).

Multiplicando (3) por k, sumando (localmente) para $n = m, ..., m-1+r$, seleccionado $\bar{\boldsymbol{u}}_h = A_h^{-1}(\boldsymbol{u}_h^{m+r} - \boldsymbol{u}_h^m)$ como función test y finalmente sumando (globalmente) para $m = 0, ..., N-r$, llegamos a la siguientes estimaciones de una derivada fraccionaria para $\boldsymbol{u}_{h,k,\varepsilon}$ (la función constante a trozos que vale $\boldsymbol{u}_{h,k,\varepsilon}(t) = \boldsymbol{u}_h^{n+1}$ en $(t_n, t_{n+1}]$):

Lema 4 *Bajo las hipótesis del Teorema 2, se tiene*

$$\int_0^{T-\delta} \|\boldsymbol{u}_{h,k,\varepsilon}(t+\delta) - \boldsymbol{u}_{h,k,\varepsilon}(t)\|_{\boldsymbol{V}_h'}^2\, dt \le C\,\delta^{1/2} \quad \forall\,\delta : 0 < \delta < T, \tag{8}$$

donde $C > 0$ es independiente de (h, k, ε).

Nótese que la derivada fraccionaria en tiempo para la velocidad discreta ha sido acotada en la norma $\boldsymbol{V}'_h$ la cual "se mueve" con respecto al parámetro de espacio h. Luego, no podemos aplicar los resultados de compacidad para espacios L^p en tiempo con valores en espacios de Banach, dados por *J. Simon* en ([8]). Por tanto, 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

$$\boldsymbol{V} = \{\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{H}^1_0(\Omega) \;:\; \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0\}$$

y la proyección ortogonal

$$R_h : \boldsymbol{V}_h \to \boldsymbol{V} \quad \text{tal que} \quad \Big(\nabla(R_h \boldsymbol{u}_h - \boldsymbol{u}_h), \nabla \boldsymbol{v}\Big) = 0, \quad \forall\, \boldsymbol{v} \in \boldsymbol{V}.$$

Usando las siguientes propiedades del operador R_h:

- $\|R_h \boldsymbol{u}_h\| \le \|\boldsymbol{u}_h\|$ (dependencia continua en H^1),
- $|R_h \boldsymbol{u}_h - \boldsymbol{u}_h| \le C\, h |\nabla \cdot \boldsymbol{u}_h|$ (estimación de error en L^2),

se prueba ([4]) que

$$\|R_h \boldsymbol{u}_h\|_{\boldsymbol{V}'} \le C \Big(h|\nabla \cdot \boldsymbol{u}_h| + \|\boldsymbol{u}_h\|_{\boldsymbol{V}'_h} \Big).$$

Tomando $\boldsymbol{u}_h = \boldsymbol{u}_h^{m+r} - \boldsymbol{u}_h^m$ y usando (8), se tiene

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

Entonces, la convergencia fuerte de sucesión $(R_h \boldsymbol{u}_{h,k,\varepsilon})$ en $L^2(\boldsymbol{L}^2)$ se deduce a partir del siguiente resultado obtenido por P. Azérad y F. Guillén-González [1], para la tripleta de espacios $\boldsymbol{V} \hookrightarrow \boldsymbol{H} \hookrightarrow \boldsymbol{V}'$, donde $\boldsymbol{H} = \{\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{L}^2(\Omega) \;:\; \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0,\; \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}\big|_{\partial\Omega} = 0\}$.

Teorema 5 Sea $T > 0$, y sea $\mathbf{X} \hookrightarrow \mathbf{B} \hookrightarrow \mathbf{Y}$, con la primera inyección compacta y la segunda continua. Sea $\{f_\epsilon\}_{\epsilon>0}$ una familia de funciones de $L^p(0,T;\mathbf{X})$, $1 \le p < \infty$ tal que

(H1) $\{f_\epsilon\}_{\epsilon>0}$ está acotada en $L^p(0,T;\mathbf{X})$,

(H2) $\|f_\epsilon(t+\delta) - f_\epsilon(t)\|_{L^p(0,T;\mathbf{Y})} \le \varphi(\delta) + \psi(\epsilon)$ con $\lim\limits_{\delta\to 0} \varphi(\delta) = 0$ y $\lim\limits_{\epsilon\to 0} \psi(\epsilon) = 0$.

Entonces, la familia $\{f_\epsilon\}_{\epsilon>0}$ posee un punto de acumulación en $L^p(0,T;\mathbf{B})$ cuando $\epsilon \to 0$.

Finalmente, gracias a la aproximación (externa) de $\boldsymbol{V}_h$ a $\boldsymbol{V}$, se tiene ([4]) la convergencia fuerte de $(\boldsymbol{u}_{h,k,\varepsilon})$ en $L^2(\boldsymbol{L}^2(\Omega))$.

5. Convergencia del esquema para $\boldsymbol{d}$

La convergencia para (5) está basado en el siguiente resultado:

Lema 6 *Los dos sistemas siguientes son equivalentes:*

$$\partial_t \boldsymbol{d} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{d} - \gamma \Delta \boldsymbol{d} - \gamma |\nabla \boldsymbol{d}|^2 \boldsymbol{d} = \boldsymbol{0} \quad \text{en } Q, \tag{9}$$

y

$$|\boldsymbol{d}| = 1, \quad \partial_t \boldsymbol{d} \wedge \boldsymbol{d} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{d} \wedge \boldsymbol{d} - \gamma \nabla \cdot (\nabla \boldsymbol{d} \wedge \boldsymbol{d}) = \boldsymbol{0} \quad \text{en } Q. \tag{10}$$

Que el vector de orientación límite $\boldsymbol{d}$, es decir, el vector de orientación obtenido como consecuencia del Teorema 2, verifique la restricción $(10)_a$ se deduce tomando límite en la estimación

$$\max_n \int_\Omega F_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n) = \frac{1}{\varepsilon^2}\int_\Omega (|\boldsymbol{d}_h^{n+1}|^2 - 1)^2 \le C.$$

Luego, basta probar $(10)_b$

Usando $P_h : \boldsymbol{L}^2(\Omega) \to \boldsymbol{W}_h$ el proyector respecto de los producto escalar en $L^2(\Omega)$ sobre $\boldsymbol{W}_h$, las hipótesis sobre los espacios discretos y el hecho que $\boldsymbol{f}_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n) \wedge \boldsymbol{d}_h^n = 0$, llegamos a la siguiente versión discreta de $(10)_b$ a partir de (6):

$$\begin{aligned}&\left(\frac{\boldsymbol{d}_h^{n+1} - \boldsymbol{d}_h^n}{k} \wedge \boldsymbol{d}_h^n, \bar{\boldsymbol{d}}_h\right) + \Big((\boldsymbol{u}_h^{n+1} \cdot \nabla)\boldsymbol{d}_h^n \wedge \boldsymbol{d}_h^n, \bar{\boldsymbol{d}}_h\Big)\\ &+\gamma\Big(\boldsymbol{w}_h^{n+1} \wedge [\boldsymbol{d}_h^{n+1} + (\boldsymbol{d}_h^n - \boldsymbol{d}_h^{n+1})], \bar{\boldsymbol{d}}_h\Big) + \Big((P_h(\boldsymbol{f}_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n)) - \boldsymbol{f}_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n)) \wedge \boldsymbol{d}_h^n, \bar{\boldsymbol{d}}_h\Big) = 0.\end{aligned} \tag{11}$$

Por otra parte, queremos obtener la versión discreta de la siguiente identidad en continuo

$$-\Delta \boldsymbol{d} \wedge \boldsymbol{d} = -\nabla \cdot (\nabla \boldsymbol{d} \wedge \boldsymbol{d}) - \nabla \boldsymbol{d} \wedge \nabla \boldsymbol{d} = -\nabla \cdot (\nabla \boldsymbol{d} \wedge \boldsymbol{d}).$$

Ello se obtiene usando $P_h^1 : \boldsymbol{H}_0^1(\Omega) \to \boldsymbol{D}_{0h}$ el proyector respecto del producto escalar en $H_0^1(\Omega)$, llegando a

$$\Big(\nabla \boldsymbol{d}_h^{n+1} \wedge \boldsymbol{d}_h^{n+1}, \bar{\boldsymbol{d}}_h\Big) = \Big(\boldsymbol{w}_h^{n+1} \wedge \boldsymbol{d}_h^{n+1}, \bar{\boldsymbol{d}}_h\Big) + R_1^{n+1} + R_2^{n+1}, \tag{12}$$

donde

$$R_1^{n+1} = \Big(\boldsymbol{w}_h^{n+1}, P_h^1[\boldsymbol{d}_h^{n+1} \circledcirc \bar{\boldsymbol{d}}_h] - [\boldsymbol{d}_h^{n+1} \circledcirc \bar{\boldsymbol{d}}_h]\Big),$$

$$R_2^{n+1} = \Big(\nabla \widetilde{\boldsymbol{d}}_h, \nabla[\boldsymbol{d}_h^{n+1} \circledcirc \bar{\boldsymbol{d}}_h]\Big),$$

donde $\circledcirc$ denota el producto vectorial tal que:

$$\Big(\boldsymbol{w}_h^{n+1} \wedge \boldsymbol{d}_h^{n+1}, \bar{\boldsymbol{d}}_h\Big) := \Big(\boldsymbol{w}_h^{n+1}, \boldsymbol{d}_h^{n+1} \circledcirc \bar{\boldsymbol{d}}_h\Big). \tag{13}$$

Luego, usando (12) en (11), multiplicando por k y sumando en (11) para $n = 0, \ldots, N-1$, conseguimos

$$\begin{aligned}&k\sum_{n=0}^{N-1}\left\{\left(\frac{\boldsymbol{d}_h^{n+1} - \boldsymbol{d}_h^n}{k} \wedge \boldsymbol{d}_h^n, \bar{\boldsymbol{d}}_h\right) + \Big((\boldsymbol{u}_h^{n+1} \cdot \nabla)\boldsymbol{d}_h^n \wedge \boldsymbol{d}_h^n, \bar{\boldsymbol{d}}_h\Big) + \gamma\Big(\nabla \boldsymbol{d}_h^{n+1} \wedge \boldsymbol{d}_h^{n+1}, \nabla \bar{\boldsymbol{d}}_h\Big)\right\}\\ &= k\sum_{n=0}^{N-1}(R^n + R_1^{n+1} + R_2^{n+1} + R_3^{n+1}).\end{aligned}$$

donde

$$R^n := \Big(\boldsymbol{f}_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n), P_h(\boldsymbol{d}_h^n \circledcirc \bar{\boldsymbol{d}}_h) - \boldsymbol{d}_h^n \circledcirc \bar{\boldsymbol{d}}_h\Big)$$

$$R_3^{n+1} := \gamma\Big(\boldsymbol{w}_h^{n+1} \wedge (\boldsymbol{d}_h^{n+1} - \boldsymbol{d}_h^n), \bar{\boldsymbol{d}}_h\Big).$$

Teniendo en cuenta las convergencias obtenidas se puede pasar al límite en la formulación débil anterior y mostrar que los términos residuales del segundo miembro van a cero.

6. Compacidad para el gradiente de $\boldsymbol{d}$

Definimos $\boldsymbol{z}_{h,k,\varepsilon}(t) = \boldsymbol{w}_h^{n+1} + P_h(\boldsymbol{f}_\varepsilon(\boldsymbol{d}_h^n))$ y $\boldsymbol{d}_{h,k,\varepsilon}(t) = \boldsymbol{d}_h^{n+1}$ si $t \in (t_n, t_{n+1}]$. Entonces, $\boldsymbol{d}_{h,k,\varepsilon}(t)$ es caracterizado por el siguientes problema de optimización (sin restricciones):

$$J_{h,k,\varepsilon}(\boldsymbol{d}_{h,k,\varepsilon}(t)) = \min_{\boldsymbol{e}_h \in \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{l}_h}} J_{h,k,\varepsilon}(\boldsymbol{e}_h) \tag{14}$$

donde $J_{h,k,\varepsilon} : \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{l}_h} \to \mathbb{R}$ es definido como

$$J_{h,k,\varepsilon}(\boldsymbol{e}_h) = \int_\Omega \left(\frac{1}{2}|\nabla \boldsymbol{e}_h|^2 + F_\varepsilon(\boldsymbol{e}_h) - \boldsymbol{z}_{h,k,\varepsilon}(t) \cdot \boldsymbol{e}_h \right)$$

y

$$\boldsymbol{D}_{l_h} = \{\boldsymbol{d}_h \in D_h : \boldsymbol{d}_h = \boldsymbol{l}_h \text{ sobre } \partial\Omega\}.$$

Por otro lado, definimos $\boldsymbol{d}^*(t) : [0,T] \to \boldsymbol{H}^1_{\boldsymbol{l}}(\Omega)$ como la solución del problema de optimización (con restricciones):

$$J(\boldsymbol{d}^*(t)) = \min_{\{\boldsymbol{e} \in \boldsymbol{H}_{\boldsymbol{l}}, |\boldsymbol{e}|=1|\}} J(\boldsymbol{e}) \tag{15}$$

donde

$$J(\boldsymbol{e}) = \int_\Omega \left(\frac{1}{2}|\nabla \boldsymbol{e}|^2 - \boldsymbol{z}(t) \cdot \boldsymbol{e} \right) \tag{16}$$

y $\boldsymbol{z}$ es una función limite de $\boldsymbol{z}_{h,k,\varepsilon}$, que existe ya que $\boldsymbol{z}_{h,k,\varepsilon}$ está acotado en $\boldsymbol{L}^2(Q)$ gracias al Teorema 2.

Se prueba ([4]) que $J_{h,k,\varepsilon}(\boldsymbol{d}_{h,k,\varepsilon})$ converge a $J(\boldsymbol{d})$ y que $\boldsymbol{d}^*$ se identifica con el vector de orientación límite $\boldsymbol{d}$ conseguido por las estimaciones de $(\boldsymbol{d}_{h,k,\varepsilon})$. Entonces, tenemos que $\nabla \boldsymbol{d}_{h,k,\varepsilon}$ converge débil a $\nabla \boldsymbol{d}$ en $L^2(\boldsymbol{L}^2)$ y también converge en norma, de donde deducimos la convergencia fuerte en $L^2(\boldsymbol{L}^2)$, con la que se puede pasar al límite en el sistema de momentos discreto (3).

Agradecimientos

Los autores han sido subvencionados por el proyecto MTM2006–07932

Referencias

[1] P. Azérad, F. Guillen-González. *Mathematical justification of the hidrostatic approximation in the primitive equations of geophysical fluid dynamics.* SIAM J. Math. Anal. 33 (2001), no. 4, 847–859.

[2] 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.

[3] V. Girault, F. Guillén-González. *Mixed formulation, approximation and decoupling algorithm for a nematic liquid crystals model.* In preparation.

[4] F. Guillén-González and J.V. Gutiérrez-Santacreu. In preparation.

[5] F. Guillén-González and M.A. Rojas-Medar. *Global solution of nematic crystals models.* C.R.Acad.Sci. Paris, Ser. I 335 (2002) 1085-1090.

[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] C. Liu, N.J. Walkington. *Approximation of liquid crystal flows.* SIAM J. Numer. Anal. 37 (2000), no. 3, 725–741.

[8] J. Simon. *Compact sets in $L^p(0,T;B)$.* Ann. Mat. Pura Appl., sér. IV, CXLVI (1987), 65–96.