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

F. Guillén-González, J. V. Gutiérrez-Santacreu,
Dpto. de Ecuaciones Diferenciales y Análisis Numérico, Univ. de Sevilla
guillen@us.es, juanvi@us.es

Resumen

En esta comunicación presentamos un esquema numérico con elementos finitos continuos en espacio y diferencias finitas en tiempo para aproximar un modelo de cristales líquidos nemáticos por medio de un modelo penalizado. Supongamos $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un dominio acotado y de frontera $\partial\Omega$ suficientemente regular 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: $\boldsymbol{u}$ el campo de velocidades incompresible, p la presión del fluido y $\boldsymbol{d}$ la orientación de las macromoléculas de cristales líquidos, y verifican el siguiente problema en derivadas parciales:

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

donde $\boldsymbol{u}_0$ y $\boldsymbol{d}_0$ son las condiciones iniciales, $\boldsymbol{l}$ es la condición de Dirichlet para el vector de orientación $\boldsymbol{d}$ (que hay que supponer independiente del tiempo), $\nu > 0$ representa la viscosidad del fluido y $\lambda > 0$ es la constante de elasticidad. $(\nabla\boldsymbol{d})^t$ denota la matriz traspuesta de $\nabla\boldsymbol{d}$. Imponiendo que $|\boldsymbol{d}_0| = 1$ y $|\boldsymbol{l}| = 1$, se tiene existencia de solución global en tiempo de (1) con la siguiente regularidad:

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

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

Las principales dificultades para diseñar esquemas numéricos estables y convergentes para el modelo penalizado son: aproximar $\boldsymbol{d}$ con elemento finitos solo globalmente continuos aunque la regularidad de $\boldsymbol{d}$ es H^2 y obtener la restricción $|\boldsymbol{d}| \le 1$ aunque el esquema no verifique puntualmente dicha restricción. En [1] se introduce un esquema (lineal) con una variable auxiliar para aproximar $-\Delta\boldsymbol{d}$, que resulta ser incondicionalmente estable y convergente, obteniéndose además estimaciones de error y convergencia de métodos iterativos para desacoplar el esquema. Ver también los trabajos previos [3, 4] para otros esquemas menos eficientes.

Cuando se trata de construir 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), nos encontramos principalmente con las siguientes dificultades: Obtener estimaciones de estabilidad independientes de ε, ya que los esquemas anteriores explotan cuando $\varepsilon \to 0$. Se pierde la estimación H^2 para $\boldsymbol{d}$, que dificulta primero la compacidad L^2 para $\boldsymbol{u}$, que es la clave 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 una restricción que involucra los tres parámetros (h,k,ε) y convergente hacia una solución del problema (1).

Sección en el CEDYA 2007: AN

Referencias

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

[2] 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.

[3] 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.

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