

ESTUDIO NUMÉRICO DEL MODELO DE CAHN-HILLIARD

IVÁN MORENO VILLAMIL

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE MATEMÁTICAS

BUCARAMANGA

2021

ESTUDIO NUMÉRICO DEL MODELO DE CAHN-HILLIARD

IVÁN MORENO VILLAMIL

Trabajo de Grado para optar al título de
Matemático

Director

DIEGO ARMANDO RUEDA GÓMEZ
Ph.D en Matemáticas

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE MATEMÁTICAS

BUCARAMANGA

2021

*Dedicado: A mi familia, en especial
a mis padres.*

AGRADECIMIENTOS

- ◇ Agradezco a Dios por conducir mi vida y permitirme alcanzar este gran logro.
- ◇ Agradezco a mis padres: **Arelys Villamil** y **Eduardo Parra** por ser mi fundamental apoyo y motivación durante mi formación.
- ◇ Agradezco al profesor **Diego Rueda**, por su paciencia, colaboración e interés en mi proyecto, por todas sus recomendaciones y enseñanzas durante este proceso.
- ◇ Agradezco a mis amigos con los cuales tuve la oportunidad de compartir durante toda esta etapa.

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	10
1. PRELIMINARES	15
1.1. NOTACIÓN	15
1.2. ESPACIOS DE FUNCIONES	16
2. MODELO DE CAHN-HILLIARD Y APROXIMACIÓN TEMPORAL	21
2.1. MODELO DE CAHN-HILLIARD	21
2.2. ESQUEMA IMPLÍCITO-EXPLÍCITO GENÉRICO ASOCIADO AL MODELO DE CAHN-HILLIARD	26
2.3. ESTABILIDAD ENERGÉTICA	27
2.4. ERRORES DE CONSISTENCIA	33
3. ESQUEMAS NUMÉRICOS LINEALES DE PRIMER Y SEGUNDO ORDEN PARA EL MODELO DE CAHN-HILLIARD	39
3.1. ESQUEMA DE PRIMER ORDEN EN TIEMPO PARA LA ECUACIÓN DE CAHN-HILLIARD	40
3.1.1. Descomposición de Eyre no lineal	40
3.1.2. Esquema lineal de Eyre (E1)	43
3.1.3. Esquema de disipación óptima (OD1)	47
3.1.4. Esquema LM1	54
3.2. UN ESQUEMA DE SEGUNDO ORDEN EN TIEMPO	59
4. SIMULACIONES NUMÉRICAS	62
4.1. ESQUEMAS DE PRIMER ORDEN: E1, LM1 y OD1	63

4.2. ESQUEMA OD2

67

BIBLIOGRAFÍA

71

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Dato inicial ϕ_0	63
Figura 2. Comparación de la dinámica de los esquemas OD1 , E1 y LM1	64
Figura 3. Energía en $[0, 0.4]$ correspondiente a los esquemas OD1 , E1 y LM1	65
Figura 4. Energía en $[0.4, 1]$ correspondiente a los esquemas OD1 , E1 y LM1	65
Figura 5. ND en $[0, 0.04]$ correspondiente a los esquemas OD1 , E1 y LM1	66
Figura 6. ND en $[0.05, 0.4]$ correspondiente a los esquemas OD1 , E1 y LM1	66
Figura 7. Dinámica de las fases en el esquema OD2	67
Figura 8. Energía en $[0, 0.4]$ correspondiente al esquema OD2	68
Figura 9. Energía en $[0.4, 1]$ correspondiente al esquema OD2	68
Figura 10. ND en $[0, 0.04]$ correspondiente al esquema OD2	69
Figura 11. ND en $[0.05, 0.4]$ correspondiente al esquema OD2	69

RESUMEN

TÍTULO: ESTUDIO NUMÉRICO DEL MODELO DE CAHN-HILLIARD. *

AUTOR: IVÁN MORENO VILLAMIL **

PALABRAS CLAVE: CAMPO DE FASE, INTERFAZ DIFUSA, MODELO DE CAHN-HILLIARD, ELEMENTOS FINITOS, ESTABILIDAD ENERGÉTICA.

DESCRIPCIÓN:

El estudio de la dinámica interfacial forma un papel clave dentro de múltiples aplicaciones científicas de ingeniería e industriales donde se necesita modelar mezclas de diferentes fluidos para entender su comportamiento. Un enfoque para resolver problemas de interfaz es la teoría de interfaz difusa la cual permite modelar y aproximar transiciones de fase sólido-líquido, describiendo la interfaz mediante una mezcla de energía, con límites de espesor finito. En este trabajo, se presenta un estudio numérico para el modelo de interfaz difusa de Cahn-Hilliard, el cual se introdujo en sus orígenes para modelar las transiciones de fase en aleaciones de hierro y las fuerzas termodinámicas que impulsan la separación de fases. Específicamente, se estudian diversos esquemas de aproximación numérica de primer y segundo orden en el tiempo, usando el método de elementos finitos para la aproximación espacial y el método de diferencias finitas para la aproximación temporal. Se realizan algunas comparaciones entre ellos y se prueban ciertas propiedades tales como: la estabilidad energética, la conservación de la masa total y el buen planteamiento de cada esquema. Finalmente, se muestran los resultados de algunas simulaciones numéricas realizadas usando el software Freefem++, a partir de las cuales se puede evidenciar el buen desempeño de estos esquemas.

* Trabajo de grado

** Facultad de Ciencias. Escuela de Matemáticas. Director: Diego Armando Rueda Gómez, Ph.D en Matemáticas.

ABSTRACT

TITLE: NUMERICAL STUDY OF THE CAHN-HILLIARD MODEL *

AUTHOR: IVÁN MORENO VILLAMIL **

KEYWORDS: PHASE FIELD, DIFFUSE INTERFACE, CAHN-HILLIARD MODEL, FINITE ELEMENT, ENERGY STABILITY.

DESCRIPTION:

The study of interfacial dynamics plays a key role in multiple scientific engineering and industrial applications where it is necessary to model mixtures of different fluids to understand their behavior. One approach to solving interface problems is the fuzzy interface theory, which allows modeling and approximating solid-liquid phase transitions, describing the interface by means of a mixture of energy, with limits of finite thickness. In this work, we present a numerical study for the Cahn-Hilliard fuzzy interface model, which was originally introduced to model phase transitions in iron alloys and the thermodynamic forces that drive phase separation. Specifically, some first and second order in time numerical approximation schemes are studied, using the finite element method for the spatial approximation and the finite difference method for the approximation in time. Some comparisons are made between them and certain properties are proved such as: energy stability, conservation of the total mass and the well-posedness of each scheme. Finally, the results of some numerical simulations carried out using the Freefem ++ software are shown, from which the good performance of these schemes can be evidenced.

* Bachelor Thesis

** Faculty of Sciences. School of Mathematics. Director: Diego Armando Rueda Gómez, Ph.D in Mathematics

INTRODUCCIÓN

El estudio de dinámica interfacial ha formado un papel clave para comprender el comportamiento de diferentes sistemas en múltiples aplicaciones científicas de ingeniería e industriales donde necesitamos modelar mezclas de diferentes fluidos, sólidos o gases. Por ejemplo, surgen de manera natural en la hidrodinámica y la ciencia de materiales (véase ^{1 2 3 4 5}). En este trabajo, realizamos un estudio numérico de un sistema de ecuaciones diferenciales parciales conocido en la literatura como el modelo de Cahn-Hilliard (véase ⁶). Específicamente, nos centraremos en estudiar esquemas numéricos de tipo mixto, usando el método de elementos finitos (véase ⁷) para la aproximación espacial y el método de diferencias finitas para la

-
- ¹ S. ESEDOGLU A. L. BERTOZZI y A. GILLETE. “Inpainting of binary images using the Cahn-Hilliard equation”. En: *IEEE Transactions on image processing* 16 (2006), págs. 285-291.
 - ² J. W. CAHN. “On spinodal decomposition”. En: *Acta Metallurgica* 9 (1961), págs. 795-801.
 - ³ M. A. PELETIER R. CHOKSI y J. F. WILLIAMS. “On the phase diagram for microphase separation of diblock copolymers: an approach via a nonlocal Cahn-Hilliard functional”. En: *SIAM Journal on Applied Mathematics* 69 (2009), págs. 1712-1738.
 - ⁴ et al D. JEONG. “Numerical analysis of energy-minimizing wavelengths of equilibrium states for diblock copolymers”. En: *Current Applied Physics* 14 (2014), págs. 1263-1272.
 - ⁵ L. CHEN J. ZHU y J. SHEN. “Morphological evolution during phase separation and coarsening with strong inhomogeneous elasticity”. En: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 9 (2001).
 - ⁶ J. W. CAHN y J. E. HILLIARD. “Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy”. En: *The Journal of Chemical Physics* 28 (1958), págs. 258-267.
 - ⁷ G. ALLAIRE. *Numerical analysis and optimization: an introduction to mathematical modeling and numerical simulation*. Oxford University Press, 2007.

aproximación temporal , los cuales fueron estudiados en ⁸. Se incluirán esquemas de primer y segundo orden en tiempo, y se realizarán comparaciones entre ellos mostrando que los sistemas describen el proceso de separación de fases, por el cual dos componentes de un fluido binario (fluido bifásico o fluido de dos fases) se separan espontáneamente y forman dominios puros en cada componente.

Un enfoque para resolver problemas relacionados con la dinámica interfacial es la teoría de la interfaz difusa, la cual se desarrolló originalmente como una metodología para modelar y aproximar transiciones de fase sólido-líquido. En esta línea, encontramos el modelo de Cahn-Hilliard, el cual se introdujo para modelar las transiciones de fase en aleaciones de hierro y las fuerzas termodinámicas que impulsan la separación de fases, respectivamente. Debido a su conexión con múltiples problemas motivados físicamente, la ecuación de Cahn-Hilliard ha sido ampliamente estudiada en los últimos años (véase, por ejemplo, ^{9 10 11 12 13} y referencias citadas en ellos) y las aplicaciones de esta ecuación se han extendido a diversas áreas, entre las que

-
- ⁸ F. GUILLÉN-GONZÁLEZ y G. TIERRA. “On linear schemes for a Cahn-Hilliard diffuse interface model”. En: *Journal of Computational Physics* 234 (2013), págs. 140-171.
- ⁹ A. MELLET A. CUCCHI y N. MEUNIER. “A Cahn-Hilliard Model for Cell Motility”. En: *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 52 (2020), págs. 3843-3880.
- ¹⁰ K. LAM H. GARCKE y A. SIGNORI. “On a phase field model of Cahn-Hilliard type for tumour growth with mechanical effects”. En: *Nonlinear Analysis Real World Applications* 57 (2021), págs. 103-192.
- ¹¹ F. GUILLÉN-GONZÁLEZ y G. TIERRA. “Second order schemes and time-step adaptivity for Allen-Cahn and Cahn-Hilliard models”. En: *Computers and Mathematics with Applications* 68 (2014), págs. 821-846.
- ¹² et al H. LEE. “Modeling and simulation of droplet evaporation using a modified Cahn-Hilliard equation”. En: *Journal Applied Mathematics and Computation* 390 (2021).
- ¹³ G. TIERRA y F. GUILLÉN-GONZÁLEZ. “Numerical Methods for Solving the Cahn–Hilliard Equation and Its Applicability to Related Energy-Based Models”. En: *Archives of Computational Methods in Engineering* 22 (2015), págs. 269-289.

se encuentran: química, física, biología e ingeniería, en fenómenos tales como: la descomposición espinodal (véase ²), el copolímero dibloque (véase ^{3 4}), la pintura de imágenes binarias (véase ¹), los flujos de fluidos multifásicos (véase ^{14 15}), las microestructuras con inhomogeneidad elástica (véase ⁵), la motilidad celular (véase ⁹) y crecimiento tumoral (véase ^{10 16}), entre otros. En los modelos de interfaz difusa, se define una función auxiliar ϕ (llamada función de campo de fase) que se utiliza para localizar las fases dentro del sistema, es decir, muestra el estado actual del fluido en cada instante de tiempo. La función de campo de fase ϕ asume diferentes valores estables para cada fase (por ejemplo $\phi = 1$ en una fase y $\phi = -1$ en la otra) y sobre las regiones interfaciales la función varía suavemente, $-1 < \phi < 1$. El modelo de Cahn-Hilliard permite estudiar el comportamiento de una mezcla homogénea entre dos sustancias mediante el uso de la función de campo de fase, de modo que se tenga la evolución y disolución de una interfase en campo de fase controlado y se establezca un sistema de masa y energía estables. La ecuación de Cahn-Hilliard puede ser obtenida a partir de la ley de balance de masa

$$\phi_t + \gamma \nabla \cdot J = 0,$$

-
- ¹⁴ H. D. CENICEROS y S. BANERJEE. V. E. BADALASSI. "Computation of multiphase systems with phase field models". En: *Journal of computational physics* 190 (2003), págs. 371-397.
- ¹⁵ M. KOTSCHOTE y R. ZACHER. "Strong solutions in the dynamical theory of compressible fluid mixtures". En: *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 25 (2015), págs. 1217-1256.
- ¹⁶ H. GARCKE y S. YAYLA. "Long-time dynamics for a Cahn-Hilliard tumor growth model with chemotaxis". En: *Journal of Mathematical Physics* 71 (2020).

donde J es un flujo de fase definido por $J = -\nabla\left(\frac{\partial E(\phi)}{\partial \phi}\right)$ y $E(\phi)$ es un funcional de energía libre dado por

$$E(\phi) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 + F(\phi) \right) dx,$$

siendo $F(\phi) := F_{\varepsilon}(\phi)$ un potencial de doble pozo (competencia entre una parte convexa y una cóncava) para representar la tendencia del sistema a tener dos fases estables diferentes, y $\varepsilon > 0$ es el parámetro relacionado con el espesor de la interfaz. Entonces, la ecuación de Cahn-Hilliard está dada por:

$$\phi_t = \Delta(-\Delta\phi + F'(\phi)).$$

Se asume que nada de la mezcla puede atravesar las paredes del contenedor; por lo tanto, consideramos condiciones de frontera de tipo Neumann homogéneas para las derivadas normales hacia afuera de ϕ y $\Delta\phi - F'(\phi)$, es decir, se anulan en la frontera de Ω .

En la ecuación de Cahn-Hilliard, la evolución de la concentración de la mezcla consta de dos etapas: en la primera etapa se presenta una separación de fases rápida y en la segunda etapa se produce un engrosamiento. Al final de la primera etapa, se forman regiones de fase de escala fina que están separadas por la interfaz, mientras que al final de la segunda etapa, la solución alcanza un estado de equilibrio, que minimiza el funcional de energía. Hay tres desafíos principales para resolver numéricamente la ecuación de Cahn-Hilliard: la no linealidad en el sistema, la presencia del parámetro ε en las ecuaciones (que suele ser pequeño en aplicaciones de transición de fase) y las diferentes escalas de tiempo de cada una de las etapas en la evolución de concentración.

En el presente trabajo se realiza una revisión de los resultados obtenidos en ⁸ y está organizado de la siguiente manera: En el Capítulo 1, se realiza un repaso de

algunos conceptos y resultados relevantes que serán utilizados en el desarrollo del trabajo. Así mismo, se lleva a cabo una breve revisión sobre ciertos espacios de funciones, incluyendo principalmente los espacios de Lebesgue, Sobolev y Bochner, recordando algunas definiciones y resultados asociados a estos espacios.

En el Capítulo 2, se introduce el modelo de Cahn-Hilliard con condiciones iniciales y de frontera determinados. Una vez planteado el modelo, se deduce la formulación variacional asociada a partir de la cual se planteará un esquema implícito-explicito genérico, y se analizarán algunas propiedades asociadas a este esquema.

En el Capítulo 3, se abordan diferentes esquemas numéricos lineales completamente discretos para aproximar soluciones de la ecuación de Cahn-Hilliard. Se estudian algunos esquemas de aproximación numérica derivados a partir del esquema genérico derivado en el Capítulo 2 y se prueban buenas propiedades de cada uno ellos, tales como: estabilidad energética, la conservación de la masa total y el buen planteamiento. Se analizan esquemas de primer y segundo orden en tiempo.

Finalmente, en el Capítulo 4 se muestran los resultados de algunas simulaciones numéricas realizadas para comparar los esquemas estudiados en los Capítulos 2 y 3. Estas simulaciones incluyen resultados referentes a la estabilidad energética y la disipación total introducida por los esquemas.

1. PRELIMINARES

En este capítulo haremos un repaso de algunos conceptos y resultados relevantes que serán utilizados en el desarrollo del trabajo. Realizamos una breve revisión sobre ciertos espacios de funciones, incluyendo principalmente los espacios de Lebesgue, Sobolev y Bochner. Así mismo, recordamos algunas definiciones y resultados asociados a estos espacios.

1.1. NOTACIÓN

En el desarrollo de este trabajo, Ω denotará un dominio de \mathbb{R}^d , para $d = 2, 3$, esto es, un conjunto no vacío, abierto y conexo cuya frontera será denotada por $\partial\Omega$. Un punto de \mathbb{R}^d es escrito como $x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ y su norma euclidiana viene dada por $\|x\|_{\mathbb{R}^d} = \left(\sum_{i=1}^d x_i^2\right)^{1/2}$. El producto interno de dos vectores x, y en \mathbb{R}^d es dado por $\langle x, y \rangle_{\mathbb{R}^d} = \sum_{i=1}^d x_i y_i$.

Si $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_d)$ es una d -upla de enteros no negativos α_i , se dice que α es un multi-índice de longitud $|\alpha| := \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_d$. Para $x \in \mathbb{R}^d$ y α un multi-índice, se define x^α como $x^\alpha := x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \dots x_n^{\alpha_d}$. Similarmente, si $D_j = \partial/\partial x_j$, entonces D^α definido como

$$D^\alpha := D_1^{\alpha_1} D_2^{\alpha_2} \dots D_n^{\alpha_d} = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \dots \partial x_n^{\alpha_d}}, \quad (1)$$

denota el operador diferencial de orden $|\alpha|$. Note que $D^{(0,0,\dots,0)}u = u$.

El símbolo ∇ representará el operador gradiente, que es definido como:

$$\nabla := \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_d} \right).$$

Así, para una función escalar f , ∇f representa el vector con i -ésima componente $\frac{\partial f}{\partial x_i}$. De la misma forma, Δ representará el operador Laplaciano, que es definido como:

$$\Delta =: \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2},$$

esto es, si f es una función escalar, entonces $\Delta f = \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}$.

Para $1 \leq p \leq \infty$, p' denotará su exponente conjugado. Para $1 < p < \infty$, p' viene dado por la relación

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1,$$

y si $p = 1$ entonces $p' = \infty$, o si $p = \infty$ entonces $p' = 1$.

En general, para un espacio normado X se denota su norma como $\|\cdot\|_X$. Si X es un espacio de Hilbert, denotaremos su producto interno como $\langle \cdot, \cdot \rangle_X$, (salvo el caso de $L^2(\Omega)$ que es denotado por (\cdot, \cdot)), y para el producto dual entre X' (dual de X) y X , se usará $\langle \cdot, \cdot \rangle_{X', X}$.

1.2. ESPACIOS DE FUNCIONES

Sea Ω un dominio acotado de \mathbb{R}^d con borde $\partial\Omega$ suficientemente regular. Para $p \in \mathbb{R}$, $1 \leq p < \infty$, el espacio de Banach $L^p(\Omega)$ es definido como

$$L^p(\Omega) := \left\{ u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} : u \text{ es medible y } \int_{\Omega} |u(x)|^p dx < \infty \right\},$$

con norma $\|\cdot\|_{L^p(\Omega)}$ definida por

$$\|u\|_{L^p(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |u(x)|^p dx \right)^{1/p}.$$

En el caso $p = 2$, el espacio $L^2(\Omega)$ es un espacio de Hilbert con producto interno

$$(u, v) := (u, v)_{L^2(\Omega)} = \int_{\Omega} u(x)v(x) dx,$$

con norma definida por $\|u\|_{L^2(\Omega)} = (u, u)^{1/2}$. Se muestra fácilmente que si $p \geq q$, el espacio $L^p(\Omega) \subseteq L^q(\Omega)$.

El espacio $L^\infty(\Omega)$ es definido como

$$L^\infty(\Omega) := \{u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} : u \text{ es medible y existe una constante } C \geq 0 \text{ tal que } |u(x)| \leq C, \text{ para casi todo } x \text{ en } \Omega\},$$

con norma definida por

$$\|u\|_{L^\infty(\Omega)} = \sup_{x \in \Omega} |u(x)| = \min\{C \geq 0 : |u| \leq C, \text{ c.t.p en } \Omega\}.$$

Para $1 < p < \infty$, el espacio dual de $L^p(\Omega)$ denotado por $(L^p(\Omega))'$ es dado por

$$(L^p(\Omega))' = L^q(\Omega), \text{ donde } \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1.$$

Para espacios $L^p(\Omega)$ de funciones vectoriales de dimensión n , se usará la notación $\mathbf{L}^p(\Omega) = (L^p(\Omega))^d$, es decir

$$\mathbf{L}^p(\Omega) := \{\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_d) : u_i \in L^p(\Omega) \text{ para } i = 1, \dots, d\},$$

y su norma asociada está dada por

$$\|\mathbf{u}\|_{\mathbf{L}^p(\Omega)} = \left(\sum_{i=1}^d \|u_i\|_{L^p(\Omega)}^2 \right)^{1/2}.$$

Definimos los espacios $C_0^\infty(\Omega)$ y $L_{loc}^1(\Omega)$ como:

$$C_0^\infty(\Omega) := \{u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} : u \in C^\infty(\Omega) \text{ con soporte compacto en } \Omega\},$$

$$L^1_{loc}(\Omega) := \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} : f \text{ es medible y } \int_K |f| dx < +\infty \text{ para todo } K \subset \Omega, \\ K \text{ compacto}\}.$$

Partiendo de estos espacios, definiremos el concepto de derivada débil.

Definición 1.1 (*Derivada débil*). Suponga que $u, v \in L^1_{loc}(\Omega)$ y α es un multi-índice diremos que v es la α -ésima derivada débil de u , si

$$\int_{\Omega} u D^{\alpha} \phi dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} v \phi dx, \quad \text{para toda } \phi \in C_0^{\infty}(\Omega).$$

Para $k \in \mathbb{N}$ y $p \in \mathbb{R}$, con $1 \leq p \leq \infty$, los espacios de Sobolev $W^{k,p}(\Omega)$ son definidos como

$$W^{k,p}(\Omega) := \{v \in L^p(\Omega) \mid D^{\alpha} v \in L^p(\Omega) \text{ para todo } 0 \leq |\alpha| \leq k\},$$

donde D^{α} es el operador definido en (1). El espacio de Sobolev $W^{k,p}(\Omega)$ es un espacio de Banach con la norma

$$\|v\|_{W^{k,p}(\Omega)} = \left(\sum_{|\alpha| \leq k} \|D^{\alpha} v\|_{L^p(\Omega)}^p \right)^{1/p}, \quad p < \infty,$$

$$\|v\|_{W^{k,\infty}(\Omega)} = \max_{|\alpha| \leq k} \left(\sup_{x \in \Omega} |D^{\alpha} u(x)| \right), \quad p = \infty.$$

El espacio $W^{k,p}(\Omega)$ es separable para $1 \leq p < \infty$ y reflexivo para $1 < p < \infty$ (véase ¹⁷). Además, cuando $p = 2$, $W^{k,2}(\Omega) := H^k(\Omega)$, el cual es un espacio de Hilbert con el producto interno

$$(u, v)_{H^k(\Omega)} = \sum_{|\alpha| \leq k} (D^{\alpha} u, D^{\alpha} v) = \sum_{|\alpha| \leq k} \int_{\Omega} D^{\alpha} u(x) D^{\alpha} v(x) dx,$$

¹⁷ L. C. EVANS. *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, 2010.

y cuya norma es definida como $\|v\|_{H^m(\Omega)} = (u, u)_{H^m(\Omega)}^{1/2}$.

En particular, el espacio de Sobolev $H^1(\Omega)$ es definido como

$$H^1(\Omega) = \left\{ u \in L^2(\Omega) \text{ tal que } \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Omega) \text{ para todo } i \in \{1, \dots, d\} \right\},$$

donde $\frac{\partial u}{\partial x_i}$ es la derivada débil de u .

El espacio $H_0^m(\Omega)$ se define como la clausura de $C_0^\infty(\Omega)$ en la norma $H^m(\Omega)$. En particular, $H_0^1(\Omega)$ es caracterizado como

$$H_0^1 = \{u \in H^1(\Omega) : u = 0 \text{ en } \partial\Omega\}.$$

Para los espacios $W^{k,p}(\Omega)$ de funciones vectoriales de dimensión d , se usará la notación $\mathbf{W}^{k,p}(\Omega) = (W^{k,p}(\Omega))^d$ y $\mathbf{H}^m(\Omega) = (H^m(\Omega))^d$, es decir,

$$\mathbf{W}^{k,p}(\Omega) := \{\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_d) : v_i \in W^{k,p}(\Omega) \text{ para } i = 1, \dots, d\},$$

$$\mathbf{H}^m(\Omega) := \{\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_d) : u_i \in H^m(\Omega) \text{ para } i = 1, \dots, d\},$$

y sus respectivas normas asociadas están dadas por

$$\|\mathbf{v}\|_{\mathbf{W}^{k,p}(\Omega)} = \left(\sum_{i=1}^d \|v_i\|_{W^{k,p}(\Omega)}^2 \right)^{1/2},$$

$$\|\mathbf{u}\|_{\mathbf{H}^m(\Omega)} = \left(\sum_{i=1}^d \|u_i\|_{H^m(\Omega)}^2 \right)^{1/2},$$

respectivamente. Una consulta más detallada sobre los espacios de Sobolev y Lebesgue puede realizarse en ¹⁷ y ¹⁸.

¹⁸ G. FOLLANG. *Real analysis: modern thecnics and theory applications*. Printed in the United States of America, 1984.

Observación 1.1 *A menos que sea estrictamente necesario para evitar ambigüedades, se utilizará (para las normas en espacios de funciones vectoriales) la notación $\|\mathbf{u}\|_{X(\Omega)} = \|\mathbf{u}\|_{X(\Omega)}$, es decir, se omitirá la negrita en el espacio X .*

Definición 1.2 *(Espacios de Bochner): Sea X un espacio de Banach y a, b números reales tales que $-\infty \leq a < b \leq +\infty$. Para $1 \leq \alpha < +\infty$, se dice que $L^\alpha(a, b; X)$ es el espacio de las funciones $f : [a, b] \rightarrow X$ que son medibles y cuya norma es*

$$\|f\|_{L^\alpha(a,b;X)} = \left(\int_a^b \|f(t)\|_X^\alpha dt \right)^{1/\alpha} < +\infty.$$

En el caso $\alpha = +\infty$,

$$\|f\|_{L^\infty(a,b;X)} = \sup_{t \in [a,b]} \|f(t)\|_X.$$

Finalmente, las dos desigualdades que se citan a continuación son utilizadas frecuentemente y sus respectivas demostraciones se encuentran en ¹⁹.

Teorema 1.1 *(Desigualdad de Young) Sean a, b, p, q números reales positivos tales que $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$. Entonces se verifica la siguiente desigualdad*

$$ab \leq \frac{a^p}{p} + \frac{b^q}{q}.$$

Teorema 1.2 *(Desigualdad de Hölder Generalizada) Sea Ω un dominio acotado de \mathbb{R}^d y las funciones $f_i \in L^{p_i}(\Omega)$ para $i = 1, 2, \dots, k$, con $p_i \geq 1$ y $p \geq 1$ que satisfacen $\frac{1}{p} = \frac{1}{p_1} + \frac{1}{p_2} + \dots + \frac{1}{p_k}$. Entonces, para $f = f_1 f_2 \cdots f_{k-1} f_k$ se tiene que*

$$\|f\|_{L^p(\Omega)} \leq \|f_1\|_{L^{p_1}(\Omega)} \|f_2\|_{L^{p_2}(\Omega)} \cdots \|f_k\|_{L^{p_k}(\Omega)}.$$

¹⁹ H. BREZIS. *Análisis funcional, Teoría y aplicaciones*. Alianza Editorial, Madrid, 1984.

2. MODELO DE CAHN-HILLIARD Y APROXIMACIÓN TEMPORAL

El modelo de Cahn-Hilliard es un sistema de ecuaciones diferenciales parciales, el cual fue desarrollado para describir la separación de fases y fenómenos de engrosamiento en una aleación fundida que se enfría a una temperatura a la que solo pueden existir de forma estable dos fases de concentración diferentes (véase ⁶).

En este capítulo, será introducido el modelo de Cahn-Hilliard para una interfase difusa el cual modela la creación, evolución y disolución de una interfase en un campo difuso controlado, bajo condiciones iniciales y de frontera determinados. Una vez planteado el modelo, se deducirá la formulación variacional asociada, a partir de la cual se planteará un esquema implícito-explicito genérico, y se analizarán algunas propiedades asociadas a este esquema. El contenido de este capítulo está basado en las secciones 2 y 3 de ⁸.

2.1. MODELO DE CAHN-HILLIARD

El modelo original de Cahn-Hilliard (véase ⁶) describe la separación de fases en una aleación fundida que se enfría a una temperatura en la que sólo dos fases de concentración diferentes pueden existir de forma estable. Este modelo es obtenido como un flujo de gradiente del funcional de energía libre dado por

$$E(\phi) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla \phi|^2 dx + \int_{\Omega} F(\phi) dx. \quad (2)$$

Específicamente, el punto de partida para derivar la ecuación de Cahn-Hilliard es la siguiente ley de balance de masa

$$\phi_t + \gamma \nabla \cdot J = 0,$$

donde

- $\gamma > 0$ es una constante de relajación,
- J es el flujo de fase definido por $J = -M(\phi)\nabla(\frac{\partial E(\phi)}{\partial \phi})$ y $M(\phi)$ es llamado el funcional de movilidad y $E(\phi)$ es el funcional de energía definido en (2).

A partir de ahora, vamos a considerar un valor constante para el funcional de movilidad $M(\phi) = 1$ y el funcional de doble pozo para la energía libre (ver (2)) dado como:

$$F(\phi) = \frac{(\phi^2 - 1)^2}{4\varepsilon^2}, \quad (3)$$

con

$$f(\phi) := F'(\phi) = \frac{(\phi^2 - 1)\phi}{\varepsilon^2}, \quad (4)$$

donde el parámetro $\varepsilon > 0$ representa el ancho de la capa interfacial. Entonces, el modelo de Cahn-Hilliard está dado por

$$\begin{cases} \phi_t = \gamma\Delta(-\Delta\phi + f(\phi)) & \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \frac{\partial\phi}{\partial\nu} = 0, \quad \frac{\partial(-\Delta\phi + f(\phi))}{\partial\nu} = 0 & \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T), \\ \phi|_{t=0} = \phi_0 & \text{en } \Omega, \end{cases} \quad (5)$$

siendo Ω un dominio de \mathbb{R}^d , $d = 2, 3$, con frontera $\partial\Omega$ y ν el vector unitario normal hacia fuera a $\partial\Omega$.

En el modelo (5), la variable ϕ denota la llamada función de campo de fase que es utilizada para localizar las fases dentro del sistema, asumiendo diferentes valores estables para cada fase (por ejemplo $\phi = -1$ en una fase y $\phi = 1$ en la otra) y en las regiones interfaciales la función varía suavemente. Además, las dos condiciones de contorno consideradas en (5)₂ implican que nada de la mezcla puede atravesar las paredes del contenedor.

En lo que sigue, consideraremos por simplicidad en los cálculos el caso $\gamma = 1$. Así

mismo, con el objetivo de realizar el abordaje numérico y lidiar con los términos de la derivada de cuarto orden, el problema (5) se reescribe usando una variable auxiliar, de la siguiente manera (véase ⁸):

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_t = \Delta w \quad \text{en } \Omega \times (0, T), \\ w = -\Delta\phi + f(\phi) \quad \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \frac{\partial\phi}{\partial\nu} = \frac{\partial w}{\partial\nu} = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega \times (0, T), \\ \phi|_{t=0} = \phi_0 \quad \text{en } \Omega. \end{array} \right. \quad (6)$$

A continuación, definiremos una formulación variacional asociada a (6), la cual nos permitirá plantear aproximaciones numéricas usando el método de elementos finitos. Para ello, multiplicamos la primera y segunda de las ecuaciones diferenciales en (6) por $\bar{w} \in H^1(\Omega)$ y $\bar{\phi} \in H^1(\Omega)$, se integra en Ω , y a continuación se integra por partes y se utilizan las condiciones de contorno (6). De esto se obtiene, respectivamente, que:

$$\int_{\Omega} \phi_t \bar{w} \, dx = \int_{\Omega} \Delta w \cdot \bar{w} \, dx = - \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla \bar{w} \, dx + \int_{\partial\Omega} \frac{\partial w}{\partial\nu} \bar{w} \, dx = - \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla \bar{w} \, dx \quad (7)$$

y

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} w \bar{\phi} \, dx &= - \int_{\Omega} \Delta\phi \bar{\phi} \, dx + \int_{\Omega} f(\phi) \bar{\phi} \, dx \\ &= - \left(- \int_{\Omega} \nabla\phi \cdot \nabla\bar{\phi} \, dx + \int_{\partial\Omega} \frac{\partial\phi}{\partial\nu} \bar{\phi} \, dS \right) + \int_{\Omega} f(\phi) \bar{\phi} \, dx \\ &= \int_{\Omega} \nabla\phi \cdot \nabla\bar{\phi} \, dx + \int_{\Omega} f(\phi) \bar{\phi} \, dx. \end{aligned} \quad (8)$$

Además, tomando $\bar{w} = w$ en (7) y $\bar{\phi} = \phi_t$ en (8) tenemos que

$$\begin{aligned}
0 &= (\phi_t, w) + (\nabla w, \nabla w) \\
&= (\nabla \phi, \nabla \phi_t) + (f(\phi), \phi_t) + (\nabla w, \nabla w) \\
&= \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \nabla \phi_t \, dx + \int_{\Omega} f(\phi) \phi_t \, dx + \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla w \, dx \\
&= \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 \, dx + \frac{d}{dt} \int_{\Omega} F(\phi) \, dx + \int_{\Omega} |\nabla w|^2 \, dx \\
&= \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 + F(\phi) \right) \, dx \right) + \int_{\Omega} |\nabla w|^2 \, dx \\
&= \frac{d}{dt} E(\phi(t)) + \int_{\Omega} |\nabla w(t)|^2 \, dx,
\end{aligned}$$

de lo cual concluimos la siguiente ley de energía

$$\frac{d}{dt} E(\phi(t)) + \|\nabla w(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 = 0. \tag{9}$$

Observación 2.1 *Note que (9) implica que la energía disminuye en el tiempo con una tasa dada por la disipación física $\|\nabla w(t)\|_{L^2(\Omega)}^2$. De estas propiedades es posible deducir la existencia y la unicidad de la solución débil global en el tiempo (ϕ, w) de (6). Sin embargo, dado que el propósito de este trabajo no es el análisis teórico sino*

numérico del modelo (6), omitiremos al lector a ^{20 21 22 23}.

Teniendo en cuenta (7), (8) y (9), se plantea la siguiente formulación variacional para el problema (6): Encontrar (ϕ, w) donde

$$\phi \in L^\infty(0, T; H^1(\Omega)), \phi_t \in L^2(0, T; (H^1(\Omega))') \text{ y } w \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$$

que satisfacen la formulación variacional

$$\begin{cases} \langle \phi_t, \bar{w} \rangle + (\nabla w, \nabla \bar{w}) = 0, \text{ para toda } \bar{w} \in H^1(\Omega), \\ (w, \bar{\phi}) = (\nabla \phi, \nabla \bar{\phi}) + (f(\phi), \bar{\phi}), \text{ para toda } \bar{\phi} \in H^1(\Omega). \end{cases} \quad (10)$$

Este problema es conservativo dado que la masa total se conserva en el tiempo, es decir, $\int_\Omega \phi(t)$ permanece constante en el tiempo, lo cual se puede comprobar tomando $\bar{w} = 1$ en (10), obteniendo:

$$0 = \langle \phi_t, 1 \rangle + (\nabla w, \nabla 1) = \int_\Omega \phi_t \, dx,$$

²⁰ J.F. BLOWEY J.W. BARRET y H. GARCKE. "Finite element approximation of the Cahn–Hilliard equation with degenerate mobility". En: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 37 (1999), págs. 286-318.

²¹ C.M. ELLIOT y H. GARCKE. "On the Cahn–Hilliard equation with degenerate mobility". En: *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 27 (1996), págs. 404-423.

²² X. FENG y A. PROHL. "Error analysis of a mixed finite element method for the Cahn–Hilliard equation". En: *Numerische Mathematik* 99 (2004), págs. 47-48.

²³ V. STYLES D. KAY y E. SULI. "Discontinuous Galerkin finite element approximation of the Cahn–Hilliard Equation with convection". En: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 47 (2009), págs. 2660-2685.

lo cual implica que

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \phi \, dx = 0, \text{ es decir, } \int_{\Omega} \phi(t) \, dx = \int_{\Omega} \phi_0 \, dx \text{ para todo } t \geq 0. \quad (11)$$

2.2. ESQUEMA IMPLÍCITO-EXPLÍCITO GENÉRICO ASOCIADO AL MODELO DE CAHN-HILLIARD

Consideremos una partición fija del intervalo de tiempo $[0, T]$ (en N subintervalos) dada por $t_n = nk$ (para $n \leq N$ y $k = \frac{T}{N} > 0$). En el Capítulo 3 se presentan algunos esquemas lineales de primer y segundo orden (en tiempo), obtenidos a partir del siguiente esquema genérico basado en una aproximación implícita-explícita de la parte del potencial $f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))$. El esquema es el siguiente: Dada $\phi(x, t_n) := \phi^n \in H^1(\Omega)$, calcular $(\phi(x, t_{n+1}), w(x, t_{n+\frac{1}{\alpha}})) := (\phi^{n+1}, w^{n+\frac{1}{\alpha}}) \in H^1(\Omega) \times H^1(\Omega)$, tal que:

$$\begin{cases} (\delta_t \phi^{n+1}, \bar{w}) + (\nabla w^{n+\frac{1}{\alpha}}, \nabla \bar{w}) = 0, \text{ para toda } \bar{w} \in H^1(\Omega), \\ (w^{n+\frac{1}{\alpha}}, \bar{\phi}) = (\nabla \phi^{n+\frac{1}{\alpha}}, \nabla \bar{\phi}) + (f_k(\phi^{n+1}, \phi^n), \bar{\phi}), \text{ para toda } \bar{\phi} \in H^1(\Omega), \end{cases} \quad (12)$$

donde $\delta_t \phi^{n+1} = \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k}$, y $\phi^{n+\frac{1}{\alpha}} = \phi^{n+1}$ (si $\alpha = 1$) o $\phi^{n+\frac{1}{\alpha}} = \phi^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\phi^{n+1} + \phi^n}{2}$ (si $\alpha = 2$). La inicialización del esquema (12) está dada por la condición inicial del problema (6), esto es, $\phi^0(x) = \phi(x, 0) = \phi_0(x)$, $x \in \Omega$.

Como se ha mencionado anteriormente, dependiendo del tratamiento del término potencial $f_k(\phi^{n+1}, \phi^n)$, se introducen diferentes esquemas lineales. A continuación, se verán algunas propiedades del esquema genérico (12).

Observe que el esquema (12) es conservativo, es decir, la masa total permanece

constante en el tiempo, lo cual se comprueba tomando $\bar{w} = 1$ en (12), obteniendo

$$\begin{aligned} 0 &= (\delta_t \phi^{n+1}, 1) + (\nabla w^{n+\frac{1}{\alpha}}, \nabla 1) = \int_{\Omega} \delta_t \phi^{n+1} (1) dx + \int_{\Omega} \nabla w^{n+\frac{1}{\alpha}} \cdot \nabla 1 dx \\ &= \frac{1}{k} \int_{\Omega} (\phi^{n+1} - \phi^n) dx, \end{aligned}$$

lo cual implica que $\int_{\Omega} (\phi^{n+1} - \phi^n) dx = 0$, y por lo tanto se obtiene que el esquema satisface

$$\int_{\Omega} \phi^{n+1} dx = \int_{\Omega} \phi^n dx = \int_{\Omega} \phi^{n-1} dx = \dots = \int_{\Omega} \phi^0 dx.$$

2.3. ESTABILIDAD ENERGÉTICA

Dada la trascendencia que tiene la verificación de la Ley de energía (9) para el tratamiento del problema continuo (6), se busca establecer bajo qué condiciones el esquema (12) satisface una versión discreta de esta Ley de energía. Con este fin, se denotan primero algunos términos residuales numéricos.

Sea $\alpha = 1, 2$. Se denotan:

$$ND_1(\phi, \psi) = \left(\frac{\nabla \phi + (\alpha - 1) \nabla \psi}{\alpha}, \frac{\nabla \phi - \nabla \psi}{k} \right) - \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (|\nabla \phi|^2 - |\nabla \psi|^2) dx, \quad (13)$$

para toda $\phi, \psi \in H^1(\Omega)$ y

$$ND_2(\phi, \psi) = \frac{1}{k} \int_{\Omega} f_k(\phi, \psi)(\phi - \psi) dx - \frac{1}{k} \int_{\Omega} (F(\phi) - F(\psi)) dx. \quad (14)$$

Finalmente,

$$ND(\phi, \psi) = ND_1(\phi, \psi) + ND_2(\phi, \psi). \quad (15)$$

Ahora podemos derivar una Ley de energía discreta asociada al esquema numérico (12). Comenzaremos analizando el caso $\alpha = 1$.

Lema 2.1 Sea $\alpha = 1$. Si (ϕ^{n+1}, w^{n+1}) es solución de (12), entonces satisface la siguiente Ley de energía discreta:

$$\delta_t E(\phi^{n+1}) + \|\nabla w^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 + ND(\phi^{n+1}, \phi^n) = 0. \quad (16)$$

Demostración: Tomando $\bar{w} = w^{n+1}$ en (12)₁ y $\bar{\phi} = \delta_t \phi^{n+1}$ en (12)₂ se obtiene

$$\begin{cases} (\delta_t \phi^{n+1}, w^{n+1}) + (\nabla w^{n+1}, \nabla w^{n+1}) = 0, \\ (w^{n+1}, \delta_t \phi^{n+1}) = (\nabla \phi^{n+1}, \nabla \delta_t \phi^{n+1}) + (f_k(\phi^{n+1}, \phi^n), \delta_t \phi^{n+1}). \end{cases} \quad (17)$$

Reemplazando (17)₂ en (17)₁ se obtiene

$$(\nabla \phi^{n+1}, \nabla \delta_t \phi^{n+1}) + (f_k(\phi^{n+1}, \phi^n), \delta_t \phi^{n+1}) + (\nabla w^{n+1}, \nabla w^{n+1}) = 0. \quad (18)$$

En el primer término de la ecuación (18) se tiene que

$$(\nabla \phi^{n+1}, \nabla \delta_t \phi^{n+1}) = \left(\nabla \phi^{n+1}, \nabla \left(\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k} \right) \right) = \frac{1}{k} (\nabla \phi^{n+1}, \nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n),$$

y utilizando la identidad $a(a - b) = \frac{1}{2}(a^2 - b^2) + \frac{1}{2}(a - b)^2$ en la anterior igualdad con

$a = \nabla\phi^{n+1}$ y $b = \nabla\phi^n$, se obtiene:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{k}(\nabla\phi^{n+1}, \nabla\phi^{n+1} - \nabla\phi^n) &= \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (|\nabla\phi^{n+1}|^2 - |\nabla\phi^n|^2 + |\nabla\phi^{n+1} - \nabla\phi^n|^2) dx \\
&= \delta_t \left(\int_{\Omega} \frac{1}{2} |\nabla\phi^{n+1}|^2 dx \right) + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} |\nabla\phi^{n+1} - \nabla\phi^n|^2 dx \\
&= \delta_t \left(\int_{\Omega} \frac{1}{2} |\nabla\phi^{n+1}|^2 dx \right) + \delta_t \int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) dx \\
&\quad + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} |\nabla\phi^{n+1} - \nabla\phi^n|^2 dx - \delta_t \int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) dx \\
&= \delta_t \left(\int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla\phi^{n+1}|^2 + F(\phi^{n+1}) \right) dx \right) \\
&\quad + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} |\nabla\phi^{n+1} - \nabla\phi^n|^2 dx - \delta_t \int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) dx.
\end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$(\nabla\phi^{n+1}, \nabla\delta_t\phi^{n+1}) = \delta_t E(\phi^{n+1}) + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} |\nabla\phi^{n+1} - \nabla\phi^n|^2 dx - \delta_t \int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) dx. \quad (19)$$

Reemplazando (19) en (18) se establece que

$$\begin{aligned}
\delta_t E(\phi^{n+1}) + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} |\nabla\phi^{n+1} - \nabla\phi^n|^2 dx \\
- \delta_t \int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) dx + \int_{\Omega} f_k(\phi^{n+1}, \phi^n) \delta_t \phi^{n+1} dx + \int_{\Omega} |\nabla w^{n+1}|^2 dx = 0. \quad (20)
\end{aligned}$$

De (13) tenemos que $ND_1(\phi^{n+1}, \phi^n)$, asociada al esquema (12) cuando $\alpha = 1$, está

dada por

$$\begin{aligned}
ND_1(\phi^{n+1}, \phi^n) &= \left(\nabla \phi^{n+1}, \frac{\nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n}{k} \right) - \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (|\nabla \phi^{n+1}|^2 - |\nabla \phi^n|^2) dx \\
&= \frac{1}{k} \int_{\Omega} (\nabla \phi^{n+1})(\nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n) dx - \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (|\nabla \phi^{n+1}|^2 - |\nabla \phi^n|^2) dx \\
&= \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (|\nabla \phi^{n+1}|^2 - |\nabla \phi^n|^2 + |\nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n|^2) dx - \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (|\nabla \phi^{n+1}|^2 - |\nabla \phi^n|^2) dx \\
&= \frac{1}{2k} \int_{\Omega} |\nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n|^2 dx,
\end{aligned}$$

luego, para $\alpha = 1$,

$$ND_1(\phi^{n+1}, \phi^n) = \frac{1}{2k} \int_{\Omega} |\nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n|^2 dx. \quad (21)$$

Así mismo, de (14), $ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n)$ asociada al esquema (12) para $\alpha = 1$ (o $\alpha = 2$) es dada por

$$\begin{aligned}
ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n) &= \frac{1}{k} \int_{\Omega} f_k(\phi^{n+1}, \phi^n)(\phi^{n+1} - \phi^n) dx - \frac{1}{k} \int_{\Omega} (F(\phi^{n+1}) - F(\phi^n)) dx \\
&= \int_{\Omega} f_k(\phi^{n+1}, \phi^n) \left(\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k} \right) dx - \int_{\Omega} \frac{F(\phi^{n+1}) - F(\phi^n)}{k} dx
\end{aligned}$$

por lo cual, para $\alpha = 1, 2$,

$$ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n) = \int_{\Omega} f_k(\phi^{n+1}, \phi^n) \delta_t \phi^{n+1} dx - \delta_t \int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) dx. \quad (22)$$

Así, de (20), (21) y (22) se obtiene que

$$\delta_t E(\phi^{n+1}) + \|\nabla w^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 + ND_1(\phi^{n+1}, \phi^n) + ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n) = 0,$$

de lo cual se concluye (16). □

El caso $\alpha = 2$ es analizado en el siguiente lema.

Lema 2.2 *Sea $\alpha = 2$. Si (ϕ^{n+1}, w^{n+1}) es solución de (12), entonces satisface la Ley de energía discreta (16).*

Demostración: Tomando $\bar{w} = w^{n+\frac{1}{2}}$ en (12)₁ y $\bar{\phi} = \delta_t \phi^{n+1}$ en (12)₂ se obtiene

$$\begin{cases} (\delta_t \phi^{n+1}, w^{n+\frac{1}{2}}) + (\nabla w^{n+\frac{1}{2}}, \nabla w^{n+\frac{1}{2}}) = 0, \\ (w^{n+\frac{1}{2}}, \delta_t \phi^{n+1}) = (\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \delta_t \phi^{n+1}) + (f_k(\phi^{n+1}, \phi^n), \delta_t \phi^{n+1}). \end{cases} \quad (23)$$

Reemplazando (23)₂ en (23)₁ obtenemos la siguiente igualdad

$$(\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \delta_t \phi^{n+1}) + (f_k(\phi^{n+1}, \phi^n), \delta_t \phi^{n+1}) + (\nabla w^{n+\frac{1}{2}}, \nabla w^{n+\frac{1}{2}}) = 0. \quad (24)$$

En el primer término de esta ecuación se tiene que :

$$\begin{aligned} (\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \delta_t \phi^{n+1}) &= \left(\nabla \left(\frac{\phi^{n+1} + \phi^n}{2} \right), \nabla \left(\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k} \right) \right) \\ &= \frac{1}{2k} (\nabla \phi^{n+1} + \nabla \phi^n, \nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n), \end{aligned}$$

de lo cual, usando la identidad $(a + b)(a - b) = (a^2 - b^2)$ (tomando $a = \nabla \phi^{n+1}$ y $b = \nabla \phi^n$), obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{2k} (\nabla \phi^{n+1} + \nabla \phi^n, \nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n) &= \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (|\nabla \phi^{n+1}|^2 - |\nabla \phi^n|^2) dx \\ &= \delta_t \left(\frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla \phi^{n+1}|^2 dx \right) + \delta_t \int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) dx - \delta_t \int_{\Omega} F(\phi^n) dx, \\ &= \delta_t \left(\frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla \phi^{n+1}|^2 dx + \int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) dx \right) - \delta_t \int_{\Omega} F(\phi^n) dx, \end{aligned}$$

y por lo tanto,

$$(\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \delta_t \phi^{n+1}) = \delta_t E(\phi^{n+1}) - \delta_t \int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) dx. \quad (25)$$

Así, reemplazando (25) en (24) tenemos

$$\delta_t E(\phi^{n+1}) - \delta_t \int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) dx + \int_{\Omega} f_k(\phi^{n+1}, \phi^n) \delta_t \phi^{n+1} dx + \int_{\Omega} |\nabla w^{n+\frac{1}{2}}|^2 dx = 0. \quad (26)$$

Finalmente, note que de (13), tenemos que $ND_1(\phi^{n+1}, \phi^n)$ asociada al esquema (12) cuando $\alpha = 2$ está dada por

$$\begin{aligned} ND_1(\phi^{n+1}, \phi^n) &= \left(\frac{\nabla \phi^{n+1} + \nabla \phi^n}{2}, \frac{\nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n}{k} \right) - \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (|\nabla \phi^{n+1}|^2 - |\nabla \phi^n|^2) dx \\ &= \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (\nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n)(\nabla \phi^{n+1} + \nabla \phi^n) dx - \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (|\nabla \phi^{n+1}|^2 - |\nabla \phi^n|^2) dx \\ &= 0. \end{aligned} \quad (27)$$

Así de (22), (26) y (27), se obtiene que

$$\delta_t E(\phi^{n+1}) + \|\nabla w^{n+\frac{1}{2}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + ND_1(\phi^{n+1}, \phi^n) + ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n) = 0,$$

de lo cual se concluye (16). □

Observación 2.2 *Independientemente del valor de $\alpha = 1, 2$, (16) es una Ley de energía discreta asociada al esquema (12).*

Definición 2.1 *En el caso $ND(\phi^{n+1}, \phi^n) \geq 0$, se dice que el esquema (12) introduce disipación numérica (en el paso de tiempo n); mientras que, si $ND(\phi^{n+1}, \phi^n) \leq 0$, se dice que el esquema introduce una fuente numérica.*

Observación 2.3 *Note que, independientemente del valor de $\alpha = 1, 2$, de (21) y (27) se tiene que $ND_1(\phi^{n+1}, \phi^n) \geq 0$. De hecho, $ND_1(\phi^{n+1}, \phi^n) = \frac{1}{2k} \|\nabla(\phi^{n+1} - \phi^n)\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq 0$ (si $\alpha = 1$) y $ND_1(\phi^{n+1}, \phi^n) = 0$ (si $\alpha = 2$).*

Teniendo en cuenta lo anterior, se define el concepto de estabilidad energética como sigue.

Definición 2.2 *El esquema numérico (12) es estable en energía (o energéticamente estable), si para cualquier solución $(\phi^{n+1}, w^{n+\frac{1}{\alpha}})$ de (12) se cumple la siguiente relación*

$$\delta_t E(\phi^{n+1}) + \|\nabla w^{n+\frac{1}{\alpha}}\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq 0, \quad \text{para todo } n \geq 0.$$

En particular, los esquemas de energéticamente estables satisfacen que su energía es decreciente en tiempo, esto es,

$$E(\phi^{n+1}) \leq E(\phi^n), \quad \text{para todo } n \geq 0.$$

Observación 2.4 *De la Definición 2.2 y la Observación 2.3 se concluye que para que el esquema numérico (12) sea energéticamente estable, es suficiente con escoger $f_k(\phi^{n+1}, \phi^n)$ tal que $ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n) \geq 0$.*

2.4. ERRORES DE CONSISTENCIA

En esta sección estudiaremos los errores de consistencia asociados al esquema numérico (12) dependiendo del valor de $\alpha = 1, 2$. Para esto, se considera (ϕ, w) una solución del problema (6) suficientemente regular. Específicamente asuma que

- Para $\alpha = 1$, $\phi_{tt} \in C([0, T]; L^2(\Omega))$.
- Para $\alpha = 2$, $\phi_{ttt} \in C([0, T]; L^2(\Omega))$, $\Delta\phi_{tt} \in C([0, T]; L^2(\Omega))$.

Por facilidad en la notación, y teniendo en cuenta que analizaremos los errores de consistencia a nivel temporal, denotaremos $(\phi(x, t_n), w(x, t_n)) := (\phi(t_n), w(t_n))$. Se considera primero el caso $\alpha = 1$. Considerando $t = t_{n+1}$ en (10), se obtiene que:

$$\begin{cases} (\phi_t(t_{n+1}), \bar{w}) + (\nabla w(t_{n+1}), \nabla \bar{w}) = 0, \\ -(w(t_{n+1}), \bar{\phi}) + (\nabla \phi(t_{n+1}), \nabla \bar{\phi}) + (f(\phi(t_{n+1})), \bar{\phi}) = 0. \end{cases}$$

Por lo tanto, teniendo en cuenta que los errores de consistencia son aquellos errores introducidos como resultado de aproximar la solución exacta (ϕ, w) de (10) por el esquema (12), se tiene que:

$$(\delta_t \phi(t_{n+1}), \bar{w}) + (\nabla w(t_{n+1}), \nabla \bar{w}) = (\delta_t \phi(t_{n+1}) - \phi_t(t_{n+1}), \bar{w}),$$

$$\begin{aligned} -(w(t_{n+1}), \bar{\phi}) + (\nabla \phi(t_{n+1}), \nabla \bar{\phi}) + (f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)), \bar{\phi}) \\ = (-f(\phi(t_{n+1})) + (f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)), \bar{\phi})). \end{aligned}$$

Luego si $\alpha = 1$, los errores de consistencia asociados al esquema (12) son

$$\begin{cases} \xi_w^{n+1} = \delta_t \phi(t_{n+1}) - \phi_t(t_{n+1}), \\ \xi_\phi^{n+1} = f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+1})). \end{cases} \quad (28)$$

Ahora veamos el caso $\alpha = 2$. Considerando $t = t_{n+\frac{1}{2}}$ en (10) se tiene que:

$$\begin{cases} (\phi_t(t_{n+\frac{1}{2}}), \bar{w}) + (\nabla w(t_{n+\frac{1}{2}}), \nabla \bar{w}) = 0, \\ -(w(t_{n+\frac{1}{2}}), \bar{\phi}) + (\nabla \phi(t_{n+\frac{1}{2}}), \nabla \bar{\phi}) + (f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}}))), \bar{\phi}) = 0. \end{cases}$$

Por lo tanto, teniendo en cuenta el esquema (12) con $\alpha = 2$,

$$(\delta_t \phi(t_{n+1}), \bar{w}) + (\nabla w(t_{n+\frac{1}{2}}), \nabla \bar{w}) = (\delta_t \phi(t_{n+1}) - \phi_t(t_{n+\frac{1}{2}}), \bar{w}),$$

$$\begin{aligned}
& - (w(t_{n+\frac{1}{2}}), \bar{\phi}) + \frac{1}{2}(\nabla(\phi(t_{n+1}) + \phi(t_n)), \nabla \bar{\phi}) + (f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)), \bar{\phi}) \\
& = (-\nabla \phi(t_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{2}(\nabla(\phi(t_{n+1}) + \phi(t_n)), \nabla \bar{\phi}) \\
& \quad - (f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}})), \bar{\phi}) + (f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)), \bar{\phi}) \\
& = (\Delta \phi(t_{n+\frac{1}{2}}), \bar{\phi}) - \left(\Delta \left(\frac{\phi(t_{n+1}) + \phi(t_n)}{2} \right), \bar{\phi} \right) \\
& \quad - (f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}})), \bar{\phi}) + (f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)), \bar{\phi}),
\end{aligned}$$

donde en la última igualdad se ha utilizado integración por partes y las condiciones de contorno (6)₃. Luego, si $\alpha = 2$, los errores de consistencia asociados al esquema genérico (12) son

$$\begin{cases} \xi_w^{n+1} = \delta_t \phi(t_{n+1}) - \phi_t(t_{n+\frac{1}{2}}), \\ \xi_\phi^{n+1} = -\Delta \left(\frac{\phi(t_{n+1}) + \phi(t_n)}{2} \right) + \Delta \phi(t_{n+\frac{1}{2}}) + f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}})). \end{cases} \quad (29)$$

Veamos ahora el orden con respecto al parámetro discreto de tiempo k de los errores de consistencia ξ_w^{n+1} y ξ_ϕ^{n+1} .

Lema 2.3 *La siguiente estimación es válida*

$$\|\xi_w^{n+1}\|_{L^2(\Omega)} \leq C_\alpha k^\alpha, \quad \alpha = 1, 2.$$

Demostración: En el caso $\alpha = 1$, el primer polinomio de Taylor de ϕ centrado en t_{n+1} , con su respectivo término de error:

$$\phi(t_n) = \phi(t_{n+1}) + \phi_t(t_{n+1})(t_n - t_{n+1}) + \frac{1}{2}\phi_{tt}(t_{n+\xi})(t_n - t_{n+1})^2,$$

con $\xi \in (0, 1)$, implica que

$$\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n) - k\phi_t(t_{n+1}) = -\frac{k^2}{2}\phi_{tt}(t_{n+\xi}).$$

Entonces, dividiendo por k y teniendo en cuenta (28)₁, se deduce

$$\xi_w^{n+1} = \delta_t \phi(t_{n+1}) - \phi_t(t_{n+1}) = \frac{-k}{2} \phi_{tt}(t_{n+\xi}),$$

y por lo tanto,

$$\begin{aligned} \|\xi_w^{n+1}\|_{L^2(\Omega)} &= \frac{1}{2}k \|\phi_{tt}(t_{n+\xi})\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C_1 k \|\phi_{tt}\|_{C([0,T];L^2(\Omega))}. \end{aligned}$$

Por otra parte, si $\alpha = 2$, considerando el segundo polinomio de Taylor de ϕ centrado en $t_{n+\frac{1}{2}}$ con su término de error, se tiene que

$$\phi(t_{n+1}) = \phi(t_{n+\frac{1}{2}}) + \phi_t(t_{n+\frac{1}{2}}) \left(\frac{k}{2}\right) + \frac{1}{2} \phi_{tt}(t_{n+\frac{1}{2}}) \left(\frac{k}{2}\right)^2 + \frac{1}{3!} \phi_{ttt}(t_{n+\xi_1}) \left(\frac{k}{2}\right)^3 \quad (30)$$

y

$$\phi(t_n) = \phi(t_{n+\frac{1}{2}}) + \phi_t(t_{n+\frac{1}{2}}) \left(-\frac{k}{2}\right) + \frac{1}{2!} \phi_{tt}(t_{n+\frac{1}{2}}) \left(-\frac{k}{2}\right)^2 + \frac{1}{3!} \phi_{ttt}(t_{n+\xi_2}) \left(-\frac{k}{2}\right)^3, \quad (31)$$

con $\xi_1 \in (\frac{1}{2}, 1)$ y $\xi_2 \in (0, \frac{1}{2})$. Entonces, restando (30) y (31) se obtiene

$$\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n) = k \phi_t(t_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{24} (\phi_{ttt}(t_{n+\xi_1}) + \phi_{ttt}(t_{n+\xi_2})) k^3,$$

de lo cual, teniendo en cuenta (29)₁, se deduce que

$$\xi_w^{n+1} = \delta_t \phi(t_{n+1}) - \phi_t(t_{n+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{24} (\phi_{ttt}(t_{n+\xi_1}) + \phi_{ttt}(t_{n+\xi_2})) k^2,$$

y por lo tanto,

$$\begin{aligned}\|\xi_w^{n+1}\|_{L^2(\Omega)} &= \frac{1}{24}k^2 \|\phi_{ttt}(t_{n+\xi_1}) + \phi_{ttt}(t_{n+\xi_2})\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C_2 k^2 \|\phi_{ttt}\|_{C([0,T];L^2(\Omega))}.\end{aligned}$$

□

Lema 2.4 *Se asume que $f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))$ se define de tal manera que*

$$\|f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+\frac{1}{\alpha}}))\|_{L^2(\Omega)} \leq D_\alpha k^\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \quad (32)$$

en donde D_1, D_2 son constantes positivas, que dependen de la regularidad de ϕ .

Entonces

$$\begin{cases} \|\xi_\phi^{n+1}\|_{L^2(\Omega)} \leq D_1 k, & \text{si } \alpha = 1, \\ \|\xi_\phi^{n+1}\|_{L^2(\Omega)} \leq D_2 k^2 + \frac{k^2}{8} \|\Delta\phi_{tt}\|_{C([0,T];L^2(\Omega))}, & \text{si } \alpha = 2. \end{cases} \quad (33)$$

Demostración: Si $\alpha = 1$, observando (28)₂, la conclusión es inmediata de las hipótesis del lema. Por otra parte, si $\alpha = 2$, considerando el primer polinomio de Taylor de ϕ centrado en $t_{n+\frac{1}{2}}$ con su término de error, se obtiene que

$$\phi(t_{n+1}) = \phi(t_{n+\frac{1}{2}}) + \phi_t(t_{n+\frac{1}{2}}) \left(\frac{k}{2}\right) + \frac{1}{2}\phi_{tt}(t_{n+\xi_1}) \left(\frac{k}{2}\right)^2 \quad (34)$$

y

$$\phi(t_n) = \phi(t_{n+\frac{1}{2}}) + \phi_t(t_{n+\frac{1}{2}}) \left(-\frac{k}{2}\right) + \frac{1}{2}\phi_{tt}(t_{n+\xi_2}) \left(-\frac{k}{2}\right)^2, \quad (35)$$

con $\xi_1 \in (\frac{1}{2}, 1)$ y $\xi_2 \in (0, \frac{1}{2})$. Luego, sumando (34) y (35) se obtiene

$$\frac{\phi(t_{n+1}) + \phi(t_n)}{2} - \phi(t_{n+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{8}(\phi_{tt}(t_{n+\xi_1}) + \phi_{tt}(t_{n+\xi_2})) k^2,$$

lo cual implica que

$$\Delta \left(\frac{\phi(t_{n+1}) + \phi(t_n)}{2} \right) - \Delta \phi(t_{n+\frac{1}{2}}) = \frac{k^2}{8} (\Delta(\phi_{tt}(t_{n+\xi_1}) + \phi_{tt}(t_{n+\xi_2}))). \quad (36)$$

Entonces, por hipótesis y (36), de (29)₂ se tiene que

$$\begin{aligned} \|\xi_\phi^{n+1}\|_{L^2(\Omega)} &\leq \left\| \Delta \left(\frac{\phi(t_{n+1}) + \phi(t_n)}{2} \right) - \Delta \phi(t_{n+\frac{1}{2}}) \right\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + \|f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}}))\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq k^2 \|\Delta \phi_{tt}\|_{C([0,T];L^2(\Omega))} + D_2 k^2, \end{aligned}$$

y se concluye (33). □

Observación 2.5 *De lo anterior tenemos que, para definir esquemas de primer ($\alpha = 1$) y segundo orden ($\alpha = 2$) en tiempo usando el esquema genérico (12), es suficiente con escoger $f_k(\phi^{n+1}, \phi^n)$ tal que (32) se cumpla.*

3. ESQUEMAS NUMÉRICOS LINEALES DE PRIMER Y SEGUNDO ORDEN PARA EL MODELO DE CAHN-HILLIARD

En este capítulo abordaremos diferentes esquemas numéricos lineales para aproximar soluciones de la ecuación de Cahn-Hilliard. Se estudian algunos esquemas de aproximación numérica derivados a partir del esquema (12) y se prueban buenas propiedades de cada uno ellos, tales como: estabilidad energética, la conservación de la masa total y el buen planteamiento. Esta sección tendrá dos partes principales: la primera está dedicada a presentar esquemas numéricos de primer orden en el tiempo; mientras que en la segunda, se presentarán esquemas de segundo orden en el tiempo. El contenido de este capítulo estará basado en las secciones 4 y 5 de 8.

Para la discretización espacial de (12), se considera una familia de triangulaciones $\{T_h\}_{h>0}$ de $\bar{\Omega}$ conformadas por símlices K (triángulos en 2D y tetraedros en 3D), tales que $\bar{\Omega} = \bigcup_{K \in T_h} K$, donde $h = \max_{K \in T_h} h_K$, con h_K siendo el diámetro de K . Se consideran los siguientes espacios de elementos finitos para (ϕ, w) :

$$\Phi_h := \{\phi \in C(\bar{\Omega}) : \phi|_K \in \mathbb{P}_s, \forall K \in T_h\} \subset H^1(\Omega)$$

y

$$W_h := \{w \in C(\bar{\Omega}) : w|_K \in \mathbb{P}_r, \forall K \in T_h\} \subset H^1(\Omega)$$

con $s, r \geq 1$, donde en general \mathbb{P}_a denota el conjunto de todos los polinomios de grado menor o igual que a . Para mayores detalles teóricos referentes a la construcción de los espacios discretos puede consultarse 7.

3.1. ESQUEMA DE PRIMER ORDEN EN TIEMPO PARA LA ECUACIÓN DE CAHN-HILLIARD

Se van a considerar esquemas semi-implícitos de primer orden, tomando $\alpha = 1$ en (12) (aproximación implícita) y aproximación semi-implícita en el término de potencial $f_k(\phi^{n+1}, \phi^n)$, esto es, tomando $\phi^n \in \Phi_h$ encontrar $(\phi^{n+1}, w^{n+1}) \in \Phi_h \times W_h$ tal que

$$\begin{cases} (\delta_t \phi^{n+1}, \bar{w}) + (\nabla w^{n+1}, \nabla \bar{w}) = 0, \text{ para toda } \bar{w} \in W_h, \\ (w^{n+1}, \bar{\phi}) = (\nabla \phi^{n+1}, \nabla \bar{\phi}) + (f_k(\phi^{n+1}, \phi^n), \bar{\phi}), \text{ para toda } \bar{\phi} \in \Phi_h. \end{cases} \quad (37)$$

3.1.1. Descomposición de Eyre no lineal El primer tipo de esquemas que se van a derivar se basan en las ideas introducidas por Eyre en su célebre trabajo ²⁴, en donde se separa el término potencial entre la parte convexa y no convexa para asegurar la introducción de alguna disipación numérica y, por tanto, deducir la estabilidad energética incondicional del esquema (12). Para ello se considera que

$$F(\phi) = F_c(\phi) + F_e(\phi) \text{ con } F_c''(\phi) \geq 0 \text{ y } F_e''(\phi) \leq 0 \text{ para toda } \phi \in \mathbb{R}. \quad (38)$$

Se puede considerar, $F_c(\phi) = \frac{\phi^4 + 1}{4\varepsilon^2}$ y $F_e(\phi) = \frac{-\phi^2}{2\varepsilon^2}$. En efecto,

$$F(\phi) = \frac{\phi^4 + 1}{4\varepsilon^2} - \frac{-\phi^2}{2\varepsilon^2} = \frac{\phi^4 + 1 - 2\phi^2}{4\varepsilon^2} = \frac{(\phi^2 - 1)^2}{4\varepsilon^2}.$$

Entonces, el esquema de Eyre (no lineal) toma implícitamente el término convexo y explícitamente el no convexo, es decir,

$$f_k(\phi^{n+1}, \phi^n) = f_c(\phi^{n+1}) + f_e(\phi^n), \quad (39)$$

²⁴ D. J. EYRE. "An Unconditionally Stable One-Step Scheme for Gradient System". En: (1997).

donde $f_c(\phi^{n+1}) = F'_c(\phi^{n+1})$ y $f_e(\phi^n) = F'_e(\phi^n)$. Ahora, veamos que $ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n) \geq 0$ para $\alpha = 1$, de lo cual, teniendo en cuenta la Observación 2.3, la Ley de energía discreta (16) y la Definición 2.2, se concluirá que el esquema (37) con la aproximación (39) es incondicionalmente estable en energía.

La expansión de Taylor de F_c en ϕ^{n+1} y de F_e en ϕ^n son, respectivamente,

$$F_c(\phi^n) = F_c(\phi^{n+1}) + F'_c(\phi^{n+1})(\phi^n - \phi^{n+1}) + \frac{F''_c(\phi^{n+\xi})}{2}(\phi^n - \phi^{n+1})^2, \quad (40)$$

$$F_e(\phi^{n+1}) = F_e(\phi^n) + F'_e(\phi^n)(\phi^{n+1} - \phi^n) + \frac{F''_e(\phi^{n+\eta})}{2}(\phi^{n+1} - \phi^n)^2, \quad (41)$$

para algunos $\xi, \eta \in (0, 1)$, donde $\phi^{n+\xi} = \phi^n + \xi(\phi^{n+1} - \phi^n) = \xi\phi^{n+1} + (1 - \xi)\phi^n$ y $\phi^{n+\eta} = \phi^n + \eta(\phi^{n+1} - \phi^n) = \eta\phi^{n+1} + (1 - \eta)\phi^n$. Entonces, restando las anteriores ecuaciones se tiene

$$\begin{aligned} F_c(\phi^n) - F_e(\phi^{n+1}) = & F_c(\phi^{n+1}) - F_e(\phi^n) + F'_c(\phi^{n+1})(\phi^n - \phi^{n+1}) - F'_e(\phi^n)(\phi^{n+1} - \phi^n) \\ & + \frac{F''_c(\phi^{n+\xi})}{2}(\phi^n - \phi^{n+1})^2 - \frac{F''_e(\phi^{n+\eta})}{2}(\phi^{n+1} - \phi^n)^2, \end{aligned} \quad (42)$$

y al reagrupar términos,

$$\begin{aligned} -(F_c(\phi^{n+1}) + F_e(\phi^{n+1})) + ((F_c(\phi^n) + F_e(\phi^n))) = & f_c(\phi^{n+1})(\phi^n - \phi^{n+1}) \\ & - f_e(\phi^n)(\phi^{n+1} - \phi^n) + \frac{F''_c(\phi^{n+\xi})}{2}(\phi^n - \phi^{n+1})^2 - \frac{F''_e(\phi^{n+\eta})}{2}(\phi^{n+1} - \phi^n)^2. \end{aligned} \quad (43)$$

Teniendo en cuenta que $(\phi^n - \phi^{n+1}) = -(\phi^{n+1} - \phi^n)$, de (43) se deduce que:

$$\begin{aligned} -(F_c(\phi^{n+1}) + F_e(\phi^{n+1})) + (F_c(\phi^n) + F_e(\phi^n)) = & -f_c(\phi^{n+1})(\phi^{n+1} - \phi^n) \\ & - f_e(\phi^n)(\phi^{n+1} - \phi^n) + \left(\frac{F''_c(\phi^{n+\xi})}{2} - \frac{F''_e(\phi^{n+\eta})}{2} \right) (\phi^{n+1} - \phi^n)^2. \end{aligned} \quad (44)$$

Como $F(\phi) = F_c(\phi) + F_e(\phi)$ se llega a que

$$F(\phi^{n+1}) - F(\phi^n) = (f_c(\phi^{n+1}) + f_e(\phi^n))(\phi^{n+1} - \phi^n) - \left(\frac{F_c''(\phi^{n+\xi})}{2} - \frac{F_e''(\phi^{n+\eta})}{2} \right) (\phi^{n+1} - \phi^n)^2. \quad (45)$$

Ahora bien, tomando $F(\phi) = F(\phi^{n+1})$ y $F(\psi) = F(\phi^n)$ en la definición de ND_2 dada en (14) y usando (39) y (45), se obtiene que

$$\begin{aligned} ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n) &= \frac{1}{k} \int_{\Omega} (f_c(\phi^{n+1}) + f_e(\phi^n))(\phi^{n+1} - \phi^n) dx - \frac{1}{k} \int_{\Omega} (f_c(\phi^{n+1}) + f_e(\phi^n))(\phi^{n+1} - \phi^n) dx \\ &\quad + \frac{1}{k} \int_{\Omega} \left(\frac{F_c''(\phi^{n+\xi})}{2} - \frac{F_e''(\phi^{n+\eta})}{2} \right) (\phi^{n+1} - \phi^n)^2 dx, \end{aligned} \quad (46)$$

o bien, que

$$ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n) = k \int_{\Omega} \left(\frac{F_c''(\phi^{n+\xi})}{2} - \frac{F_e''(\phi^{n+\eta})}{2} \right) (\delta_t \phi^{n+1})^2 dx. \quad (47)$$

Por la división del término potencial dada en (38) se tiene que $F_c''(\phi^{n+\xi}) \geq 0$ y $-F_e''(\phi^{n+\eta}) \geq 0$. Por lo tanto, $F_c''(\phi^{n+\xi}) - F_e''(\phi^{n+\eta}) \geq 0$ y en consecuencia se tiene que $ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n) \geq 0$. Así, se tiene que $ND(\phi^{n+1}, \phi^n) \geq 0$, lo que implica que el esquema de Eyre no lineal es incondicionalmente estable en energía.

Finalmente, veamos que (32) se satisface con $\alpha = 1$ para la descomposición (39), lo cual, teniendo en cuenta la Observación 2.5, implicaría que el esquema es de

primer orden en tiempo. En efecto, teniendo en cuenta (39) y (4), se tiene que

$$\begin{aligned}
 (f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+1}))) &= \frac{(\phi(t_{n+1}))^3}{\varepsilon^2} - \frac{\phi(t_n)}{\varepsilon^2} - \left(\frac{(\phi(t_{n+1}))^3}{\varepsilon^2} - \frac{\phi(t_{n+1})}{\varepsilon^2} \right) \\
 &= \frac{1}{\varepsilon^2} (\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n)) \\
 &= \frac{1}{\varepsilon^2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi_t dt.
 \end{aligned}$$

Luego,

$$\|f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+1}))\|_{L^2(\Omega)} \leq \frac{1}{\varepsilon^2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \|\phi_t\|_{L^2(\Omega)} dt \leq \frac{1}{\varepsilon^2} \|\phi_t\|_{C([0,T];L^2(\Omega))} k,$$

de lo cual se concluye (32).

3.1.2. Esquema lineal de Eyre (E1) Para obtener esquemas lineales siguiendo las ideas propuestas por Eyre ²⁴, se reescribe la parte potencial de la energía de la siguiente manera

$$F(\phi) = \frac{1}{4\varepsilon^2} (\phi^2 - 1)^2 = \frac{1}{4\varepsilon^2} (\phi^4 + 2\phi^2 - 4\phi^2 + 1).$$

Considerando la descomposición del término de potencial como

$$F_1(\phi) = \frac{1}{2\varepsilon^2} \phi^2 \text{ y } F_2(\phi) = \frac{1}{4\varepsilon^2} (\phi^4 - 4\phi^2 + 1),$$

y tomando

$$f_k(\phi^{n+1}, \phi^n) = F_1'(\phi^{n+1}) + F_2'(\phi^n), \text{ donde } F_1'(\phi) = \frac{\phi}{\varepsilon^2} \text{ y } F_2'(\phi) = \frac{\phi^3 - 2\phi}{\varepsilon^2}, \quad (48)$$

entonces se sigue que

$$f_k(\phi^{n+1}, \phi^n) = \frac{\phi^{n+1}}{\varepsilon^2} + \frac{(\phi^n)^3 - 2\phi^n}{\varepsilon^2} = \frac{1}{\varepsilon^2} ((\phi^n)^3 - 2\phi^n + \phi^{n+1}).$$

Por lo tanto, se define el esquema lineal de Eyre (**E1**) como

$$\begin{cases} (\delta_t \phi^{n+1}, \bar{w}) + (\nabla w^{n+1}, \nabla \bar{w}) = 0, \text{ para toda } \bar{w} \in W_h, \\ (w^{n+1}, \bar{\phi}) = (\nabla \phi^{n+1}, \nabla \bar{\phi}) + \frac{1}{\varepsilon^2} ((\phi^n)^3 - 2\phi^n + \phi^{n+1}, \bar{\phi}) \text{ para toda } \bar{\phi} \in \Phi_h. \end{cases} \quad (49)$$

Lema 3.1 *El esquema **E1** es de primer orden en tiempo y condicionalmente estable en energía (en el sentido de la Definición 2.2).*

Demostración: Primero, con el objetivo de establecer la estabilidad energética del esquema **E1**, se analiza el signo de $ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n)$. Entonces, teniendo en cuenta que $F_1''(\phi) = \frac{1}{\varepsilon^2}$ y $F_2''(\phi) = \frac{1}{\varepsilon^2}(3\phi^2 - 2)$ y argumentando como en (39)-(47) para F_1 y F_2 en lugar de F_c y F_e , se llega a que

$$\begin{aligned} ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n) &= k \int_{\Omega} \left(\frac{F_1''(\phi^{n+\xi}) - F_2''(\phi^{n+\eta})}{2} \right) (\delta_t \phi^{n+1})^2 dx \\ &= k \int_{\Omega} \left(\frac{1 - (3(\phi^{n+\eta})^2 - 2)}{2\varepsilon^2} \right) (\delta_t \phi^{n+1})^2 dx \\ &= \frac{k}{2\varepsilon^2} \int_{\Omega} (-3(\phi^{n+\eta})^2 + 3) (\delta_t \phi^{n+1})^2 dx \\ &= \frac{3k}{2\varepsilon^2} \int_{\Omega} (1 - (\phi^{n+\eta})^2) (\delta_t \phi^{n+1})^2 dx. \end{aligned} \quad (50)$$

Así, si $|\phi^n| \leq 1$ para todo $n \geq 0$, se concluye que $ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n) \geq 0$. Por lo tanto, teniendo en cuenta la Observación 2.4, se concluye que el esquema **E1** es condicionalmente estable en energía.

Por otra parte, tenemos que (32) se satisface (con $\alpha = 1$) para la descomposición (48), lo cual implicaría que el esquema **E1** es de primer orden en tiempo (ver Observación 2.5). En efecto, teniendo en cuenta (48) y (4) se tiene que:

$$\begin{aligned} (f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+1}))) &= \frac{1}{\varepsilon^2} (2\phi(t_{n+1}) - 2\phi(t_n)) + \frac{1}{\varepsilon^2} ((\phi(t_n))^3 - (\phi(t_{n+1}))^3) \\ &= \frac{2}{\varepsilon^2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi_t dt - \frac{1}{\varepsilon^2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\phi^3)_t dt, \end{aligned}$$

lo cual implica que

$$\begin{aligned} \|f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+1}))\|_{L^2(\Omega)} &\leq \frac{2}{\varepsilon^2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \|\phi_t\|_{L^2(\Omega)} dt + \frac{1}{\varepsilon^2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \|(\phi^3)_t\|_{L^2(\Omega)} dt \\ &\leq C \|\phi_t\|_{C([0,T];L^2(\Omega))} k + C \|(\phi^3)_t\|_{C([0,T];L^2(\Omega))} k, \end{aligned}$$

y se concluye (32). □

Veamos ahora que el esquema (49) tiene una única solución.

Lema 3.2 *Existe una única solución $(\phi^{n+1}, w^{n+1}) \in \Phi_h \times W_h$ de (49).*

Demostración: Teniendo en cuenta que (49) es lineal y en dimensión finita, basta probar la unicidad de la solución de (49). Para esto, supongamos que existen $(\phi_1^{n+1}, w_1^{n+1})$ y $(\phi_2^{n+1}, w_2^{n+1})$ soluciones de (49). Entonces, tomando $\phi^{n+1} = \phi_1^{n+1} - \phi_2^{n+1} \in \Phi_h$ y $w^{n+1} = w_1^{n+1} - w_2^{n+1} \in W_h$, se tiene

$$\begin{cases} (\frac{1}{k}\phi^{n+1}, \bar{w}) + (\nabla w^{n+1}, \nabla \bar{w}) = 0, \text{ para toda } \bar{w} \in W_h, \\ (w^{n+1}, \bar{\phi}) = (\nabla \phi^{n+1}, \nabla \bar{\phi}) + \frac{1}{\varepsilon^2} (\phi^{n+1}, \bar{\phi}) \text{ para toda } \bar{\phi} \in \Phi_h. \end{cases} \quad (51)$$

Tomando $\bar{w} = kw^{n+1}$ y $\bar{\phi} = \phi^{n+1}$ se tiene que

$$\|\nabla \phi^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} \|\phi^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 + k \|\nabla w^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 = 0,$$

de lo cual se concluye que $\nabla w^{n+1} = 0$, $\nabla \phi^{n+1} = 0$ y $\phi^{n+1} = 0$. Así, $\phi_1^{n+1} = \phi_2^{n+1}$. Ahora, tomando $\bar{\phi} = 1$ en (51)₂ y usando que $\nabla \phi^{n+1} = \phi^{n+1} = 0$, se obtiene que $\int_{\Omega} w^{n+1} = 0$, de lo cual, teniendo en cuenta que w^{n+1} es constante, deducimos que $w^{n+1} = 0$, esto es, $w_1^{n+1} = w_2^{n+1}$. □

Finalmente, veamos que $|ND_2(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))| \leq F_1 k$, donde

$$F_1 = F(\|\phi\|_{C([0,T];L^\infty(\Omega))}, \|\phi_t\|_{C([0,T];L^2(\Omega))}).$$

En efecto, de (50) se tiene que

$$\begin{aligned} |ND_2(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))| &= \frac{k}{2\varepsilon^2} \left| \int_{\Omega} (-3(\phi(t_{n+\eta})) + 3) (\delta_t \phi(t_{n+1}))^2 dx \right| \\ &\leq C k (\|\phi\|_{C([0,T];L^\infty(\Omega))} + 1) \|\delta_t \phi(t_{n+1})\|_{L^2(\Omega)}^2. \end{aligned}$$

Pero, teniendo en cuenta que

$$\delta_t \phi(t_{n+1}) = \frac{1}{k} (\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n)) = \frac{1}{k} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi_t dt,$$

entonces

$$\|\delta_t \phi(t_{n+1})\|_{L^2(\Omega)} \leq \frac{1}{k} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \|\phi_t\|_{L^2(\Omega)} dt \leq \frac{1}{k} k \|\phi_t\|_{C([0,T];L^2(\Omega))}.$$

Así, se concluye que $|ND_2(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))| \leq F_1 k$.

Así mismo, $|ND_1(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))| \leq F_2 k$, donde $F_2 = F_2(\|\nabla \phi_t\|_{C([0,T];L^2(\Omega))})$. En efecto, de la Observación 2.3, se sigue que

$$|ND_1(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))| = \frac{1}{2k} \|\nabla(\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n))\|_{L^2(\Omega)}^2,$$

en donde

$$\nabla(\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n)) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\nabla \phi)_t dt.$$

Entonces

$$\begin{aligned} \frac{1}{2k} \|\nabla(\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n))\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq \frac{1}{2k} \left(\int_{t_n}^{t_{n+1}} \|(\nabla \phi)_t\|_{L^2(\Omega)} dt \right)^2 \\ &\leq \frac{1}{2k} \|(\nabla \phi)_t\|_{C([0,T];L^2(\Omega))}^2 k^2 \\ &\leq F_2 k. \end{aligned} \tag{52}$$

3.1.3. Esquema de disipación óptima (OD1) Anteriormente se ha visto que el término $ND_2(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))$ en el esquema lineal de Eyre es de orden $O(k)$. La idea es definir un esquema lineal tal que $ND_2(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))$ sea de orden $O(k^2)$. Las desventajas de este enfoque serán:

1. No es posible controlar el signo $ND_2(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))$, pero al menos, formalmente, se puede controlar este término para k lo suficientemente pequeño, porque su orden será mayor.
2. Surge una condición para asegurar la existencia y la unicidad de la solución del esquema.

La disipación óptima aproximada del término de potencial puede ser obtenida utilizando la siguiente fórmula de cuadratura de Hermite (exacta para \mathbb{P}_1):

$$\int_a^b g(x)dx = (b-a)g(a) + \frac{1}{2}(b-a)^2 g'(a) + C(b-a)^3 g''(\xi),$$

en el siguiente sentido:

$$F(\phi^{n+1}) - F(\phi^n) = \int_{\phi^n}^{\phi^{n+1}} f(\phi)d\phi = (\phi^{n+1} - \phi^n)f(\phi^n) + \frac{1}{2}(\phi^{n+1} - \phi^n)^2 f'(\phi^n) + C(\phi^{n+1} - \phi^n)^3 f''(\phi^{n+\xi}), \quad (53)$$

donde $\phi^{n+\xi} = \phi^n + \xi(\phi^{n+1} - \phi^n)$ con $\xi \in (0, 1)$. En este caso, si se define:

$$f_k(\phi^{n+1}, \phi^n) = f(\phi^n) + \frac{1}{2}(\phi^{n+1} - \phi^n)f'(\phi^n), \quad (54)$$

entonces de la definición de $ND_2(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))$ dada en (14), teniendo en cuenta (53), (54) y usando que $f(\phi) = \frac{1}{\varepsilon^2}(\phi^2 - 1)\phi$ (luego, $f''(\phi^{\eta+\xi}) = \frac{6}{\varepsilon^2}(\phi^{\eta+\xi})$), se obtiene que

$$\begin{aligned} ND_2(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) &= \frac{1}{k} \int_{\Omega} \left[\left(f(\phi(t_n)) + \frac{1}{2}(\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n))f'(\phi(t_n)) \right) (\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n)) \right] dx \\ &- \frac{1}{k} \int_{\Omega} \left[(\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n))f(\phi(t_n)) + \frac{1}{2}(\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n))^2 f'(\phi(t_n)) \right] dx \\ &- \frac{1}{k} \int_{\Omega} C(\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n))^3 f''(\phi(t_{\eta+\xi})) dx, \end{aligned}$$

por lo cual

$$\begin{aligned} ND_2(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) &= -\frac{C}{k} \int_{\Omega} (\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n))^3 f''(\phi(t_{\eta+\xi})) dx \\ &= -\frac{C}{\varepsilon^2} k^2 \int_{\Omega} (\delta_t \phi(t_{n+1}))^3 (\phi(t_{\eta+\xi})) dx. \end{aligned} \quad (55)$$

Ahora, teniendo en cuenta que $\delta_t \phi(t_{n+1}) = \frac{1}{k} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi_t(t) dt$, se deduce que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (\delta_t \phi(t_{n+1}))^3 dx &= \|\delta_t \phi(t_{n+1})\|_{L^3(\Omega)}^3 \\ &\leq \left(\frac{1}{k} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \|\phi_t\|_{L^3(\Omega)} dt \right)^3 \\ &\leq \frac{1}{k^3} \|\phi_t\|_{C([0,T];L^3(\Omega))}^3 k^3. \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} |ND_2(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))| &= \left| \frac{C}{\varepsilon^2} k^2 \int_{\Omega} (\delta_t \phi(t_{n+1}))^3 (\phi(t_{\eta+\xi})) dx \right| \\ &\leq C k^2 \|\phi\|_{C([0,t];L^\infty(\Omega))} \|\phi_t\|_{C([0,t];L^3(\Omega))}^3, \end{aligned}$$

así se tendrá que:

$$|ND_2(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))| \leq F_3 k^2, \quad (56)$$

donde, $F_3 = F_3 (\|\phi\|_{C([0,T];L^\infty(\Omega))}, \|\phi_t\|_{C([0,T];L^3(\Omega))})$. Por otra parte, recuerde que de la definición dada en (13), $ND_1(\phi^{n+1}, \phi^n)$ no depende de la escogencia de $f_k(\phi^{n+1}, \phi^n)$; por lo cual, (52) sigue siendo válida, esto es $|ND_1(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))| \leq F_2 k$.

Ahora bien, usando $f(\phi) = \frac{1}{\varepsilon^2}(\phi^2 - 1)\phi$ y $f'(\phi) = \frac{1}{\varepsilon^2}(3\phi^2 - 1)$ en (54), se tiene

$$\begin{aligned} f_k(\phi^{n+1}, \phi^n) &= \frac{1}{\varepsilon^2}((\phi^n)^2 - 1)\phi^n + \frac{1}{2}(\phi^{n+1} - \phi^n)\frac{1}{\varepsilon^2}(3(\phi^n)^2 - 1) \\ &= \frac{1}{\varepsilon^2} \left[(\phi^n)^3 - \phi^n + \frac{3}{2}(\phi^n)^2\phi^{n+1} - \frac{1}{2}\phi^{n+1} - \frac{3}{2}(\phi^n)^3 + \frac{1}{2}\phi^n \right] \\ &= \frac{1}{\varepsilon^2} \left[\frac{3}{2}(\phi^n)^2\phi^{n+1} - \frac{1}{2}(\phi^n)^3 - \frac{1}{2}\phi^{n+1} - \frac{1}{2}\phi^n \right] \\ &= \frac{1}{\varepsilon^2} \left[\frac{3}{2}(\phi^n)^2\phi^{n+1} - \frac{1}{2}(\phi^n)^3 - \frac{\phi^{n+1} + \phi^n}{2} \right]. \end{aligned} \quad (57)$$

Por lo tanto, el esquema lineal con disipación numérica ND_2 de segundo orden (el cual se llamará **OD1**) es definido como

$$\begin{cases} (\delta_t \phi^{n+1}, \bar{w}) + (\nabla w^{n+1}, \nabla \bar{w}) = 0, \\ (w^{n+1}, \bar{\phi}) = (\nabla \phi^{n+1}, \nabla \bar{\phi}) + \frac{1}{\varepsilon^2} \left(\frac{3}{2}(\phi^n)^2\phi^{n+1} - \frac{1}{2}(\phi^n)^3 - \frac{1}{2}(\phi^{n+1} + \phi^n) \right), \end{cases} \quad (58)$$

para cada $(\bar{w}, \bar{\phi}) \in W_h \times \Phi_h$.

A continuación se probará un resultado de existencia y unicidad de la solución condicional.

Lema 3.3 *Sea $\Phi_h \subset W_h$. Entonces existe una única solución (ϕ^{n+1}, w^{n+1}) del esquema (58) bajo la restricción $k < 8\varepsilon^4$.*

Demostración: Sean $(\phi_1^{n+1}, w_1^{n+1})$ y $(\phi_2^{n+1}, w_2^{n+1})$ dos soluciones de (58). Entonces, denotando por $\phi = \phi_1^{n+1} - \phi_2^{n+1}$ y $w = w_1^{n+1} - w_2^{n+1}$, se obtiene que

$$\begin{cases} \frac{1}{k}(\phi, \bar{w}) + (\nabla w, \nabla \bar{w}) = 0, \text{ para cada } \bar{w} \in W_h, \\ (w, \bar{\phi}) = (\nabla \phi, \nabla \bar{\phi}) + \frac{1}{2}(f'(\phi^n)\phi, \bar{\phi}), \text{ para cada } \bar{\phi} \in \Phi_h. \end{cases} \quad (59)$$

Sean $\bar{w} = w$ y $\bar{\phi} = \frac{1}{k}\phi$. Entonces

$$\begin{cases} (\frac{1}{k}\phi, w) + (\nabla w, \nabla w) = 0, \\ (w, \frac{1}{k}\phi) = (\nabla \phi, \nabla \frac{1}{k}\phi) + \frac{1}{2}(f'(\phi^n)\phi, \frac{1}{k}\phi), \end{cases} \quad (60)$$

de lo cual se tiene que

$$\frac{1}{k}\|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} f'(\phi^n)|\phi|^2 dx = 0. \quad (61)$$

Como $f'(\phi^n) = \frac{3(\phi^n)^2 - 1}{\varepsilon^2}$ entonces

$$\begin{aligned} \frac{1}{2k} \int_{\Omega} f'(\phi^n)|\phi|^2 dx &= \frac{1}{2k} \int_{\Omega} \left(\frac{3(\phi^n)^2 - 1}{\varepsilon^2} \right) |\phi|^2 dx \\ &= \frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} 3(\phi^n)^2|\phi|^2 dx - \frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} |\phi|^2 dx, \end{aligned}$$

que al reemplazar en (61) da que

$$\frac{1}{k}\|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} 3(\phi^n)^2|\phi|^2 dx = \frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} |\phi|^2 dx. \quad (62)$$

Para controlar el término del lado derecho se considera $\bar{w} = \phi$ en (59) (lo cual es posible pues $\Phi_h \subset W_h$), llegando a que

$$\frac{1}{k}(\phi, \phi) + (\nabla w, \nabla \phi) = \frac{1}{k} \int_{\Omega} \phi^2 dx + \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla \phi dx = 0.$$

Por lo tanto, al multiplicar la anterior igualdad por $\frac{1}{2\varepsilon^2}$ y de la desigualdad de Young

(ver Teorema 1.1), se obtiene que

$$\begin{aligned} \frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} \phi^2 dx &= -\frac{1}{2\varepsilon^2} \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla \phi dx \\ &\leq \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla w|^2 dx + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2\varepsilon^2} \right)^2 \int_{\Omega} |\nabla \phi|^2 dx \\ &= \frac{1}{2} \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{8\varepsilon^4} \|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2. \end{aligned}$$

Usando este resultado en (62) se obtiene la siguiente desigualdad:

$$\frac{1}{k} \|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} 3(\phi^n)^2 |\phi|^2 dx \leq \frac{1}{2} \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{8\varepsilon^4} \|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2,$$

lo cual implica que

$$\begin{aligned} \left(\|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{1}{2} \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) + \frac{1}{k} \|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{1}{8\varepsilon^4} \|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ + \frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} 3(\phi^n)^2 |\phi|^2 dx \leq 0 \end{aligned}$$

y por lo tanto, teniendo en cuenta que $\frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} 3(\phi^n)^2 |\phi|^2 dx \geq 0$, se tiene que

$$\frac{1}{2} \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{8\varepsilon^4} \right) \|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq 0.$$

Considerando que $k < 8\varepsilon^4$, se concluye que ϕ y w son funciones constantes (puesto que $\nabla \phi = \nabla w = 0$). Finalmente, usando este hecho en (59)₁ y tomando $\bar{w} = 1$ se concluye que $\phi = 0$. Usando este mismo razonamiento en (59)₂, se deduce que $w = 0$, con lo cual, $\phi_1^{n+1} = \phi_2^{n+1}$ y $w_1^{n+1} = w_2^{n+1}$. \square

Observación 3.1 Note que de (55) se concluye que para el esquema **OD1** no es posible controlar el signo de $ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n)$. Por esta razón, no se puede concluir ni la estabilidad energética condicional ni la incondicional de este esquema numérico.

Finalmente, veamos que (32) se satisface (con $\alpha = 1$) para la escogencia del término $f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))$ dada en (54), la cual implicaría que el esquema **OD1** es de primer orden en el tiempo. Para ello, se prueba el siguiente lema.

Lema 3.4 *Sea $f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n))$ dada en (54). Entonces, la siguiente estimación es válida*

$$\|f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}}))\|_{L^2(\Omega)} \leq D_2 k^2, \quad (63)$$

donde $D_2 = D_2(\|\phi\|_{C([0,T];L^\infty(\Omega))}, \|\phi_t\|_{C([0,T];L^4(\Omega))}, \|\phi_{tt}\|_{C([0,T];L^2(\Omega))})$.

Demostración: Mediante la fórmula de Taylor para $f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}}))$ se obtiene que

$$f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}})) = f(\phi(t_n)) + f'(\phi(t_n))\phi_t(t_n)\frac{k}{2} + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dt^2}f(\phi(t))|_{t=t_n+s}\left(\frac{k}{2}\right)^2,$$

para algún $s \in (0, \frac{1}{2})$. Entonces, sumando y restando $\frac{1}{2}(\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n))f'(\phi(t_n))$ al lado derecho de esta igualdad se obtiene que

$$\begin{aligned} f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}})) &= f(\phi(t_n)) + \frac{1}{2}(\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n))f'(\phi(t_n)) \\ &\quad + f'(\phi(t_n))\frac{k}{2}\left(\phi_t(t_n) - \frac{\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n)}{k}\right) + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dt^2}f(\phi(t))|_{t=t_n+s}\left(\frac{k}{2}\right)^2, \end{aligned}$$

y por lo tanto, usando el hecho de que $f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) = f(\phi(t_n)) + \frac{1}{2}(\phi(t_{n+1}) - \phi(t_n))f'(\phi(t_n))$, se obtiene que

$$\begin{aligned} f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}})) &= f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) + f'(\phi(t_n))\frac{k}{2}(\phi_t(t_n) - \delta_t\phi(t_{n+1})) \\ &\quad + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dt^2}f(\phi(t))|_{t=t_n+s}\left(\frac{k}{2}\right)^2. \end{aligned}$$

Ahora bien, usando el hecho de que $\phi_t(t_n) - \delta_t\phi(t_{n+1}) = \frac{k}{2}\phi_{tt}(t_{n+\xi})$ para algún $\xi \in$

(0, 1), se tiene que

$$\begin{aligned}
& \|f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}}))\|_{L^2(\Omega)} \\
&= \left\| f'(\phi(t_n)) \frac{k}{2} (\phi_t(t_n) - \delta_t \phi(t_{n+1})) + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} f(\phi(t))|_{t=t_{n+s}} \left(\frac{k}{2}\right)^2 \right\|_{L^2(\Omega)} \\
&= \left\| f'(\phi(t_n)) \frac{k^2}{4} \phi_{tt}(t_{n+\xi}) + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} f(\phi(t))|_{t=t_{n+s}} \left(\frac{k}{2}\right)^2 \right\|_{L^2(\Omega)} \\
&\leq \left\| f'(\phi(t_n)) \frac{k^2}{4} \phi_{tt}(t_{n+\xi}) \right\|_{L^2(\Omega)} + \left\| \frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} f(\phi(t))|_{t=t_{n+s}} \left(\frac{k^2}{4}\right) \right\|_{L^2(\Omega)} \\
&= \frac{k^2}{4} \|f'(\phi(t_n)) \phi_{tt}\|_{L^2(\Omega)} + \frac{k^2}{8} \left\| \frac{d^2}{dt^2} f(\phi(t))|_{t=t_{n+s}} \right\|_{L^2(\Omega)} \\
&\leq Ck^2 \left(\left\| f'(\phi(t_n)) \phi_{tt}(t_{n+\xi}) \right\|_{L^2(\Omega)} + \left\| \frac{d^2}{dt^2} f(\phi(t))|_{t=t_{n+s}} \right\|_{L^2(\Omega)} \right).
\end{aligned}$$

Luego, usando regla de la cadena para derivadas obtenemos que

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{dt^2} f(\phi(t)) &= \frac{d}{dt} (f'(\phi(t)) \phi_t(t)) \\
&= f''(\phi(t)) \phi_t(t) \phi_t(t) + f'(\phi(t)) \phi_{tt}(t) \\
&= f''(\phi(t)) (\phi_t(t))^2 + f'(\phi(t)) \phi_{tt}(t),
\end{aligned}$$

y por lo tanto,

$$\begin{aligned}
\|f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}}))\|_{L^2(\Omega)} &\leq Ck^2 \left(\|f'(\phi(t_n)) \phi_{tt}(t_{n+\xi})\|_{L^2(\Omega)} \right. \\
&\quad \left. + \|(f''(\phi(t)) (\phi_t(t))^2 + f'(\phi(t)) \phi_{tt}(t))|_{t=t_{n+s}}\|_{L^2(\Omega)} \right),
\end{aligned}$$

de lo cual se concluye (63). □

Finalmente, mediante el Lema 3.4, se tiene que

$$\begin{aligned}
\|f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+1}))\|_{L^2(\Omega)} &\leq \|f_k(\phi(t_{n+1}), \phi(t_n)) - f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}}))\|_{L^2(\Omega)} \\
&\quad + \|f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}})) - f(\phi(t_{n+1}))\|_{L^2(\Omega)} \\
&\leq D_2 k^2 + \|f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}})) - f(\phi(t_{n+1}))\|_{L^2(\Omega)}. \quad (64)
\end{aligned}$$

Pero, por expansión de Taylor,

$$\begin{aligned}
\|f(\phi(t_{n+\frac{1}{2}})) - f(\phi(t_{n+1}))\|_{L^2(\Omega)} &\leq \frac{k}{2} \|f'(\phi(t_{n+\eta}))\phi_t(t_{n+\eta})\|_{L^2(\Omega)} \\
&\leq k D_1, \quad (65)
\end{aligned}$$

donde $D_1 = D_1 (\|\phi\|_{C([0,T];L^\infty(\Omega))}, \|\phi_t\|_{C([0,T];L^2(\Omega))})$. Por lo tanto, usando (65) en (64) se concluye (32).

3.1.4. Esquema LM1 Para obtener un tercer esquema numérico lineal, se reescribe el potencial de Ginzburg-Landau de la siguiente manera:

$$f(\phi) = q\phi, \quad \text{donde } q = \frac{1}{\varepsilon^2}(\phi^2 - 1).$$

Entonces, tomando la derivada en tiempo en la ecuación para q , se tiene:

$$\varepsilon^2 q_t = 2\phi\phi_t,$$

con la condición inicial $q(0) = \frac{1}{\varepsilon^2}(\phi(0)^2 - 1)$. Partiendo de esto, se considera la siguiente formulación equivalente de (10):

$$\begin{cases} (\phi_t, \bar{w}) + (\nabla w, \nabla \bar{w}) = 0, \text{ para toda } \bar{w} \in H^1(\Omega), \\ (w, \bar{\phi}) = (\nabla \phi, \nabla \bar{\phi}) + (q\phi, \bar{\phi}), \text{ para toda } \bar{\phi} \in H^1(\Omega), \\ \frac{\varepsilon^2}{2}(q_t, \bar{q}) = (\phi\phi_t, \bar{q}), \text{ para toda } \bar{q} \in L^2(\Omega). \end{cases} \quad (66)$$

Se estudia ahora un esquema semi-implícito para este problema, considerando la aproximación de un esquema de Euler progresivo en el tiempo para esta última ecuación. Para esto, se considera:

$$Q_h := \{q \in C(\bar{\Omega}) : q|_K \in \mathbb{P}_l, \forall K \in T_h\} \subset L^2(\Omega)$$

con $l \geq 1$. Entonces, se define el esquema **LM1** de la siguiente manera: Dado $(\phi^n, q^n) \in \Phi_h \times \mathbb{Q}_h$, calcular $(\phi^{n+1}, w^{n+1}, q^{n+1}) \in \Phi_h \times W_h \times \mathbb{Q}_h$ tal que

$$\begin{cases} (\delta_t \phi^{n+1}, \bar{w}) + (\nabla w^{n+1}, \nabla \bar{w}) = 0, \text{ para toda } \bar{w} \in W_h, \\ (w^{n+1}, \bar{\phi}) = (\nabla \phi^{n+1}, \nabla \bar{\phi}) + (q^{n+1} \phi^n, \bar{\phi}), \text{ para toda } \bar{\phi} \in \Phi_h, \\ \frac{\varepsilon^2}{2} (\delta_t q^{n+1}, \bar{q}) = (\phi^n \delta_t \phi^{n+1}, \bar{q}), \text{ para toda } \bar{q} \in \mathbb{Q}_h. \end{cases} \quad (67)$$

El esquema **LM1** es conservativo, dado que la masa total permanece constante en el tiempo, lo cual se puede verificar tomando $\bar{w} = 1$ en (67)₁, obteniendo:

$$\int_{\Omega} \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k} (1) dx + \int_{\Omega} \nabla w^{n+1} \cdot \nabla (1) dx = \frac{1}{k} \int_{\Omega} (\phi^{n+1} - \phi^n) dx = 0,$$

por lo cual se observa que la masa del sistema permanece constante en el tiempo, es decir,

$$\int_{\Omega} \phi^{n+1} dx = \int_{\Omega} \phi^n dx = \int_{\Omega} \phi^{n-1} dx = \dots = \int_{\Omega} \phi^0 dx,$$

para todo entero positivo n .

Lema 3.5 *El esquema **LM1** es incondicionalmente estable en energía, en el sentido*

de que la siguiente Ley de energía discreta es válida:

$$\frac{\tilde{E}(\phi^{n+1}, q^{n+1}) - \tilde{E}(\phi^n, q^n)}{k} + \|\nabla w^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{k}{2} \|\nabla \delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{k\varepsilon^2}{4} \|\nabla \delta_t q^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 = 0, \quad (68)$$

donde

$$\tilde{E}(\phi, q) = \frac{1}{2} \|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\varepsilon^2}{4} \|q\|_{L^2(\Omega)}^2 \quad (69)$$

se puede ver como una versión modificada de la energía $E(\phi)$ dada en (2)

Demostración: Tomando $\bar{w} = w^{n+1}$, $\bar{\phi} = \delta_t \phi^{n+1}$ y $\bar{q} = q^{n+1}$ en (67), se obtiene que

$$\begin{cases} (\delta_t \phi^{n+1}, w^{n+1}) + (\nabla w^{n+1}, \nabla w^{n+1}) = 0, \\ (w^{n+1}, \delta_t \phi^{n+1}) = (\nabla \phi^{n+1}, \nabla \delta_t \phi^{n+1}) + (q^{n+1} \phi^n, \delta_t \phi^{n+1}), \\ \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{q^{n+1} - q^n}{k}, q^{n+1} \right) = \left(\phi^n \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k}, q^{n+1} \right). \end{cases} \quad (70)$$

Ahora bien, considerando que $(q^{n+1} \phi^n, \delta_t \phi^{n+1}) = (\phi^n \delta_t \phi^{n+1}, q^{n+1})$, y al reemplazar (70)₃ en (70)₂ se obtiene que

$$(w^{n+1}, \delta_t \phi^{n+1}) = (\nabla \phi^{n+1}, \nabla \delta_t \phi^{n+1}) + \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{q^{n+1} - q^n}{k}, q^{n+1} \right),$$

que al reemplazar en (70)₁ nos da que

$$(\nabla \phi^{n+1}, \nabla \delta_t \phi^{n+1}) + \frac{\varepsilon^2}{k} \left(\frac{q^{n+1} - q^n}{k}, q^{n+1} \right) + (\nabla w^{n+1}, \nabla w^{n+1}) = 0. \quad (71)$$

Usando la identidad $a(a - b) = \frac{1}{2}(a^2 - b^2) + \frac{1}{2}(a - b)^2$ se obtiene que:

$$\begin{aligned}
(\nabla\phi^{n+1}, \nabla\delta_t\phi^{n+1}) &= \left(\nabla\phi^{n+1}, \frac{\nabla\phi^{n+1} - \nabla\phi^n}{k} \right) \\
&= \frac{1}{2k} \int_{\Omega} ((|\nabla\phi^{n+1}|^2 - |\nabla\phi^n|^2) + (|\nabla\phi^{n+1} - \nabla\phi^n|^2)) dx \\
&= \frac{1}{2k} \int_{\Omega} |\nabla\phi^{n+1}|^2 dx - \frac{1}{2k} \int_{\Omega} |\nabla\phi^n|^2 dx + \frac{k}{2} \int_{\Omega} \frac{|\nabla\phi^{n+1} - \nabla\phi^n|^2}{k^2} dx \\
&= \frac{1}{2k} \|\nabla\phi^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{1}{2k} \|\nabla\phi^n\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{k}{2} \|\delta_t\nabla\phi^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2. \tag{72}
\end{aligned}$$

Procediendo de la misma forma con el segundo término del lado derecho de la ecuación (71), se obtiene que

$$\begin{aligned}
\frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{q^{n+1} - q^n}{k}, q^{n+1} \right) &= \frac{\varepsilon^2}{2k} \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2}(|q^{n+1}|^2 - |q^n|^2) + \frac{1}{2}(|q^{n+1} - q^n|^2) \right) dx \\
&= \frac{\varepsilon^2}{4k} \int_{\Omega} |q^{n+1}|^2 dx - \frac{\varepsilon^2}{4k} \int_{\Omega} |q^n|^2 dx + \frac{\varepsilon^2 k}{4} \int_{\Omega} \frac{|q^{n+1} - q^n|^2}{k^2} dx \\
&= \frac{\varepsilon^2}{4k} \|q^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{\varepsilon^2}{4k} \|q^n\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\varepsilon^2 k}{4} \|\delta_t q^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2. \tag{73}
\end{aligned}$$

Entonces, al reemplazar (72)-(73) en (71) se obtiene

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2k} \|\nabla\phi^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{1}{2k} \|\nabla\phi^n\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{k}{2} \|\delta_t\nabla\phi^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\varepsilon^2}{4k} \|q^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 \\
- \frac{\varepsilon^2}{4k} \|q^n\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\varepsilon^2 k}{4} \|\delta_t q^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla w^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 = 0,
\end{aligned}$$

de lo cual, teniendo en cuenta (69), se establece finalmente que

$$\frac{\tilde{E}(\phi^{n+1}, q^{n+1}) - \tilde{E}(\phi^n, q^n)}{k} + \|\nabla w^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{k}{2} \|\nabla\delta_t\phi^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{k\varepsilon^2}{4} \|\nabla\delta_t q^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 = 0,$$

para todo entero positivo n . □

En el siguiente resultado, se establece la unicidad de la solución del esquema **LM1**.

Lema 3.6 *El esquema numérico **LM1** tiene una única solución.*

Demostración: Teniendo en cuenta que el esquema (67) es lineal y de dimensión finita, basta con probar entonces la unicidad. Sean $(\phi_1^{n+1}, w_1^{n+1}, q_1^{n+1})$ y $(\phi_2^{n+1}, w_2^{n+1}, q_2^{n+1})$ dos soluciones de (67). Considerando $\phi = \phi_1^{n+1} - \phi_2^{n+1}$, $w = w_1^{n+1} - w_2^{n+1}$ y $q = q_1^{n+1} - q_2^{n+1}$, se tiene que

$$\int_{\Omega} \phi \, dx = 0$$

y

$$\begin{cases} \frac{1}{k}(\phi, \bar{w}) + (\nabla w, \nabla \bar{w}) = 0, \text{ para toda } \bar{w} \in W_h, \\ (w, \bar{\phi}) = (\nabla \phi, \nabla \bar{\phi}) + (q \phi^n, \bar{\phi}), \text{ para toda } \bar{\phi} \in \Phi_h, \\ \frac{\varepsilon^2}{2k}(q, \bar{q}) = \frac{1}{k}(\phi^n \phi, \bar{q}), \text{ para toda } \bar{q} \in \mathbb{Q}_h. \end{cases} \quad (74)$$

Si ahora se hace $\bar{w} = w$, $\bar{\phi} = \frac{1}{k}\phi$ y $\bar{q} = q$, entonces

$$\begin{cases} \frac{1}{k}(\phi, w) + (\nabla w, \nabla w) = 0, \\ (w, \frac{1}{k}\phi) = (\nabla \phi, \nabla \frac{1}{k}\phi) + (q \phi^n, \frac{1}{k}\phi), \\ \frac{\varepsilon^2}{2k}(q, q) = \frac{1}{k}(\phi^n \phi, q). \end{cases} \quad (75)$$

Reemplazando (75)₃ en (75)₂ se obtiene

$$\frac{1}{k}(w, \phi) = \frac{1}{k}(\nabla \phi, \nabla \phi) + \frac{\varepsilon^2}{2k}(q, q),$$

que al reemplazar $(w, \frac{1}{k}\phi)$ en (75)₁ da la siguiente igualdad:

$$\frac{1}{k}(\nabla \phi, \nabla \phi) + \frac{\varepsilon^2}{2k}(q, q) + (\nabla w, \nabla w) = 0.$$

Por lo tanto, se sigue que

$$\frac{1}{k} \|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\varepsilon^2}{2k} \|q\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 = 0.$$

Así, w y ϕ son funciones constantes (pues $\nabla w = \nabla \phi = 0$) y $q = 0$, luego $q_1^{n+1} = q_2^{n+1}$. Usando esto en (74)₁ y (74)₂ (considerando $\bar{w} = \bar{\phi} = 1$), se deduce que $w = \phi = 0$ y por lo tanto, $w_1^{n+1} = w_2^{n+1}$ y $\phi_1^{n+1} = \phi_2^{n+1}$, para todo entero positivo n . \square

3.2. UN ESQUEMA DE SEGUNDO ORDEN EN TIEMPO

En esta sección, se presenta un esquema numérico de segundo orden en el tiempo, el cual se obtiene de uno de los esquemas analizados en la sección (3.1). La idea principal es modificar el esquema **OD1**, considerando la aproximación del término potencial $f_k(\phi^{n+1}, \phi^n) = f(\phi^n) + \frac{1}{2}(\phi^{n+1} - \phi^n)f'(\phi^n)$, pero aplicando la discretización de Crank-Nicholson para los términos restantes. Se presenta el esquema **OD2** de la siguiente manera:

Para $\phi^n \in \Phi_h$, calcular $(\phi^{n+1}, w^{n+1}) \in \Phi_h \times W_h$ tal que

$$\begin{cases} (\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k}, \bar{w}) + (\nabla w^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \bar{w}) = 0, \text{ para toda } \bar{w} \in W_h, \\ (w^{n+\frac{1}{2}}, \bar{\phi}) = (\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \bar{\phi}) + (f(\phi^n) + \frac{1}{2}(\phi^{n+1} - \phi^n)f'(\phi^n), \bar{\phi}), \text{ para toda } \bar{\phi} \in \Phi_h, \end{cases} \quad (76)$$

donde $\phi^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\phi^{n+1} + \phi^n}{2}$. Notemos que $w^{n+\frac{1}{2}}$ se calcula directamente de la aproximación de $w(t_{n+\frac{1}{2}})$.

Lema 3.7 *El esquema numérico **OD2** tiene solución única bajo la restricción $k \leq 4\varepsilon^4$.*

Demostración: Teniendo en cuenta que el esquema (76) es lineal y de dimensión finita, basta con probar la unicidad. Sean $(\phi_1^{n+1}, w_1^{n+\frac{1}{2}})$ y $(\phi_2^{n+1}, w_2^{n+\frac{1}{2}})$ dos soluciones

de (76). Denotando por $\phi = \phi_1^{n+1} - \phi_2^{n+1}$ y $w = w_1^{n+\frac{1}{2}} - w_2^{n+\frac{1}{2}}$, se llega a que:

$$\begin{cases} (\frac{1}{k}\phi, \bar{w}) + (\nabla w, \nabla \bar{w}) = 0, \text{ para toda } \bar{w} \in W_h, \\ (w, \bar{\phi}) = \frac{1}{2}(\nabla \phi, \nabla \bar{\phi}) + (\frac{1}{2}f'(\phi^n)\phi, \bar{\phi}), \text{ para toda } \bar{\phi} \in \Phi_h. \end{cases} \quad (77)$$

Al hacer $\bar{w} = w$ y $\bar{\phi} = \frac{1}{k}\phi$, se tiene

$$\begin{cases} (\frac{1}{k}\phi, w) + (\nabla w, \nabla w) = 0, \\ (w, \frac{1}{k}\phi) = \frac{1}{2}(\nabla \phi, \nabla \frac{1}{k}\phi) + (\frac{1}{2}f'(\phi^n)\phi, \frac{1}{k}\phi), \end{cases} \quad (78)$$

y al reemplazar (78)₂ en (78)₁ se obtiene

$$\frac{1}{2k}(\nabla \phi, \nabla \phi) + (\nabla w, \nabla w) + \frac{1}{2k}(f'(\phi^n)\phi, \phi) = 0,$$

lo cual implica que

$$\frac{1}{2k}\|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} f'(\phi^n)|\phi|^2 dx = 0. \quad (79)$$

Además, se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{1}{2k} \int_{\Omega} f'(\phi^n)|\phi|^2 dx &= \frac{1}{2k} \int_{\Omega} \left(\frac{3(\phi^n)^2 - 1}{\varepsilon^2} \right) |\phi|^2 dx \\ &= \frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} 3(\phi^n)^2 |\phi|^2 dx - \frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} |\phi|^2 dx. \end{aligned}$$

Por consiguiente, al reemplazar la anterior igualdad en (79), se tiene que

$$\frac{1}{2k}\|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} 3(\phi^n)^2 |\phi|^2 dx = \frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} |\phi|^2 dx. \quad (80)$$

El término del lado derecho de (80) se puede controlar de la misma manera como en la prueba del Lema 3.3, llegando a

$$\frac{1}{2k} \|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{2k\varepsilon^2} \int_{\Omega} 3(\phi^n)^2 |\phi|^2 dx \leq \frac{1}{2} \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{8\varepsilon^4} \|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)},$$

y por lo tanto,

$$\frac{1}{2} \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left(\frac{1}{2k} - \frac{1}{8\varepsilon^4} \right) \|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq 0,$$

si $k < 4\varepsilon^4$, de esto se tiene que ϕ y w son funciones constantes. Usando este hecho en (77)₁ y tomando $\bar{w} = 1$ se deduce que $\phi = 0$. Finalmente, de (77)₂ y tomando $\bar{\phi} = 1$ se deduce que $w = 0$. Luego, $\phi_1^{n+1} = \phi_2^{n+1}$ y $w_1^{n+\frac{1}{2}} = w_2^{n+\frac{1}{2}}$, para todo entero positivo n . □

Observación 3.2 *En cuanto a la estabilidad energética, al igual que el esquema **OD1**, para el esquema **OD2** no es posible controlar el signo de $ND_2(\phi^{n+1}, \phi^{n+1})$, con lo cual no se puede probar estabilidad condicional ni incondicional.*

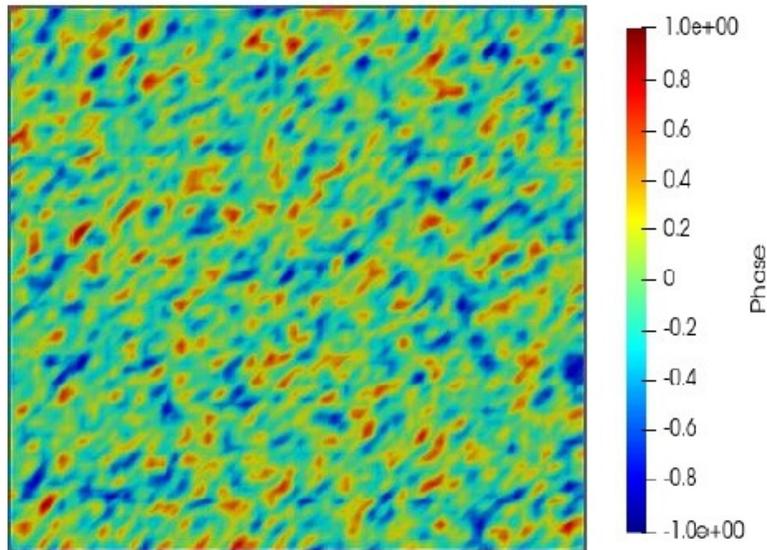
Observación 3.3 *Del Lema 3.4, se tiene de inmediato que (32) se verifica y, por lo tanto, el esquema **OD2** es de segundo orden en tiempo. Así mismo, al igual que en el esquema **OD1**, es inmediato que $|ND_2(\phi^{n+1}, \phi^n)| \leq C k^2$. Por otra parte, de los resultados obtenidos en el Capítulo 2 (ver Observación 2.3) $ND_1(\phi^{n+1}, \phi^n) = 0$ para este esquema.*

4. SIMULACIONES NUMÉRICAS

El objetivo de esta sección es comparar los resultados de algunas simulaciones numéricas realizadas utilizando los esquemas derivados en el Capítulo 3 de este trabajo. En una primera parte, se compara los esquemas de primer orden; mientras que, en la segunda parte, se presentan los respectivos resultados obtenidos a partir del esquema de segundo orden. En ambos casos, se realizan comparaciones referentes a la estabilidad energética y la disipación total introducida por los esquemas. Con respecto a la discretización espacial, se aproximan los espacios Φ_h y W_h tomando $s = r = 1$; y en el caso del esquema **LM1**, también se considera la aproximación de Q_h tomando $l = 1$. Se considera el dominio $\Omega = (0, 1)^2$ utilizando una malla estructurada con $h = \frac{1}{90}$. En todas las simulaciones se toma $\gamma = 0.0001$, $\varepsilon = 0.01$ y se considera la condición inicial para ϕ correspondiente a un dato inicial aleatorio con valores entre -10^{-2} y 10^{-2} , con el objetivo de simular una descomposición espinodal, es decir, muestra la mezcla de dos fluidos en el momento ϕ_0 (ver Fig. 1). Todas las simulaciones se realizaron usando el software **FreeFem ++**, y el parámetro temporal escogido fue $k = 0.00001$. Desde el punto de vista de la estabilidad, todos los esquemas son comparados con respecto a la energía $E(\phi^{n+1})$ y la Ley de energía discreta (16).

Finalmente, es necesario mencionar que, debido al alto costo computacional y los grandes tiempos de cómputo requeridos, en las simulaciones numéricas mostradas en este capítulo no se pudo evidenciar las soluciones de equilibrio obtenidas en ⁸ pero en los experimentos que se muestran sí se sigue el mismo patrón (para los tiempos más pequeños), y por lo tanto, es de esperar que se pueda llegar a las mismas soluciones encontradas en ⁸.

Figura 1. Dato inicial ϕ_0



4.1. ESQUEMAS DE PRIMER ORDEN: E1, LM1 y OD1

Con respecto a la dinámica de los esquemas, en la Fig. 2 se muestra la evolución de las distintas fases en el tiempo de los esquemas **E1**, **LM1** y **OD1**, donde se observa la tendencia de estas a llegar a una solución de equilibrio siguiendo la misma dinámica evidenciada en ⁸. La razón de las ligeras diferencias observadas en las dinámicas de la Fig. 2, radica en la alta disipación numérica introducida por algunos esquemas. De hecho, en las Figs. 5 y 6 se puede evidenciar el valor de ND introducido en cada esquema.

Así mismo, en las Figs. 3 y 4, se muestra la evolución de la energía $E(\phi^{n+1})$ para los 3 esquemas en dos intervalos de tiempo diferentes, donde se verifica que estos satisfacen la propiedad de energía decreciente en tiempo (ver Definición 2.2).

Figura 2. Comparación de la dinámica de los esquemas **OD1**, **E1** y **LM1**

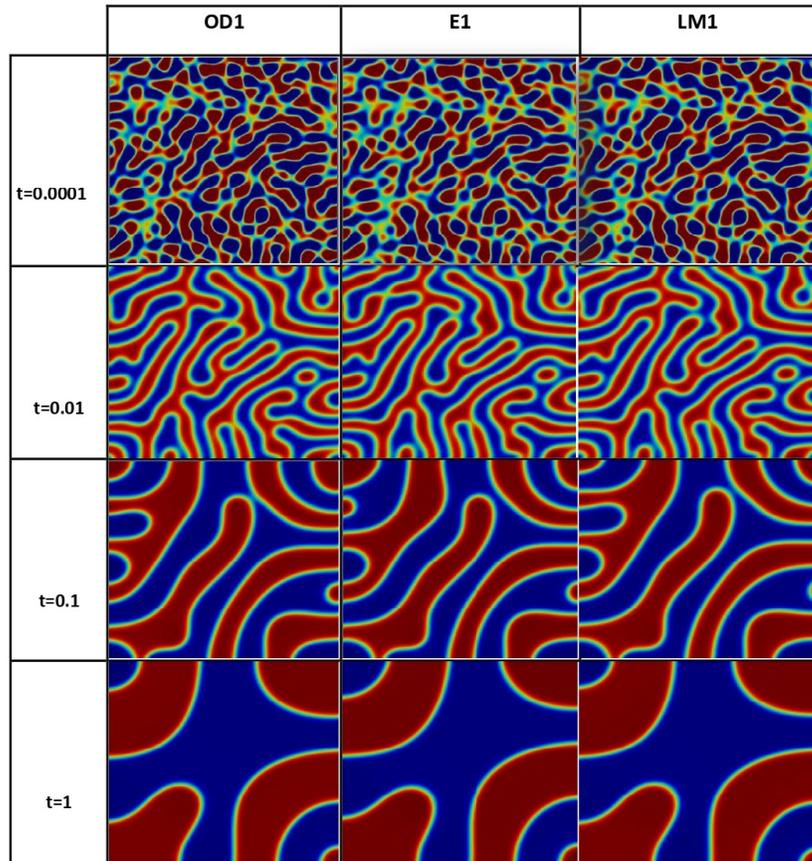


Figura 3. Energía en $[0, 0.4]$ correspondiente a los esquemas **OD1**, **E1** y **LM1**

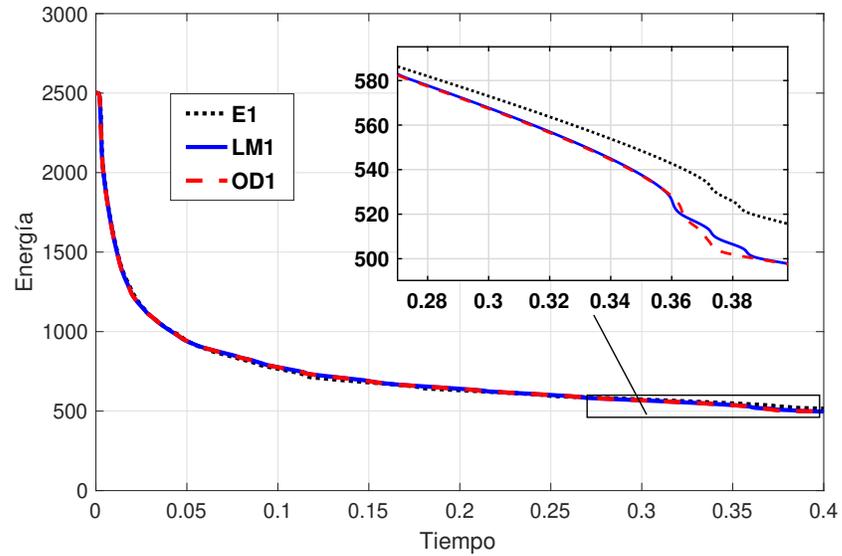


Figura 4. Energía en $[0.4, 1]$ correspondiente a los esquemas **OD1**, **E1** y **LM1**

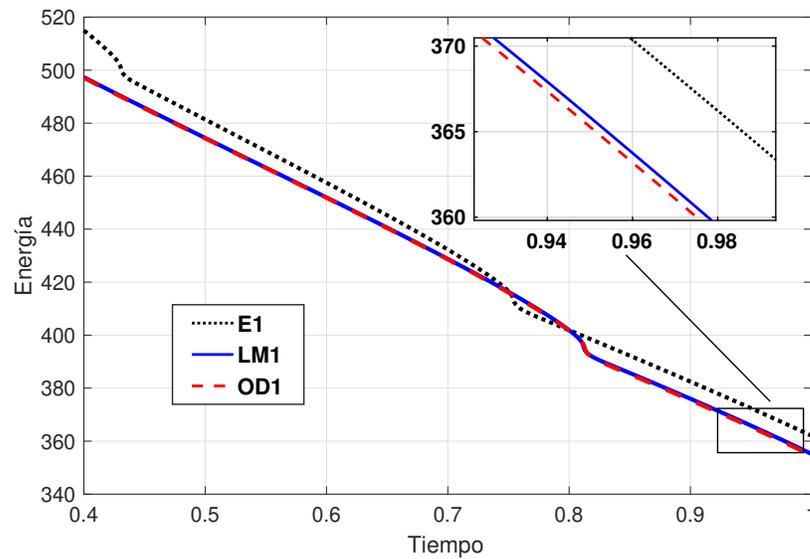


Figura 5. ND en $[0, 0.04]$ correspondiente a los esquemas **OD1**, **E1** y **LM1**

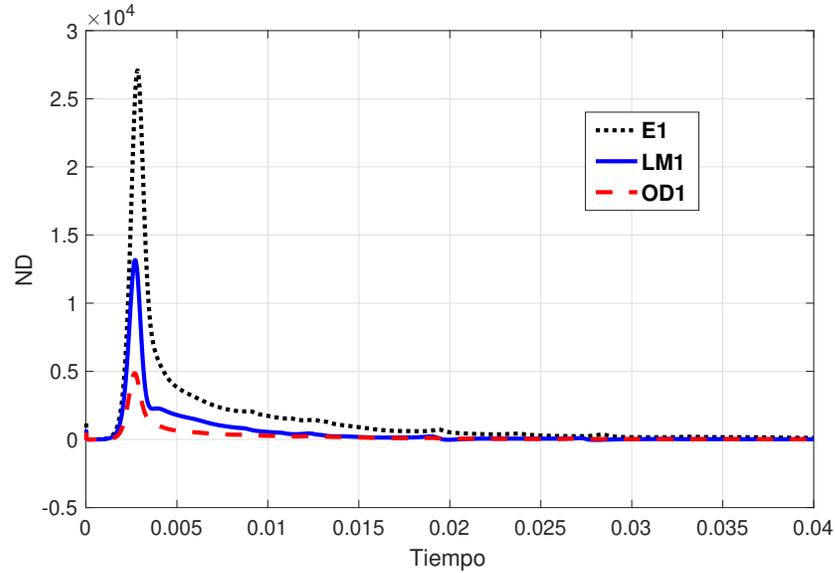
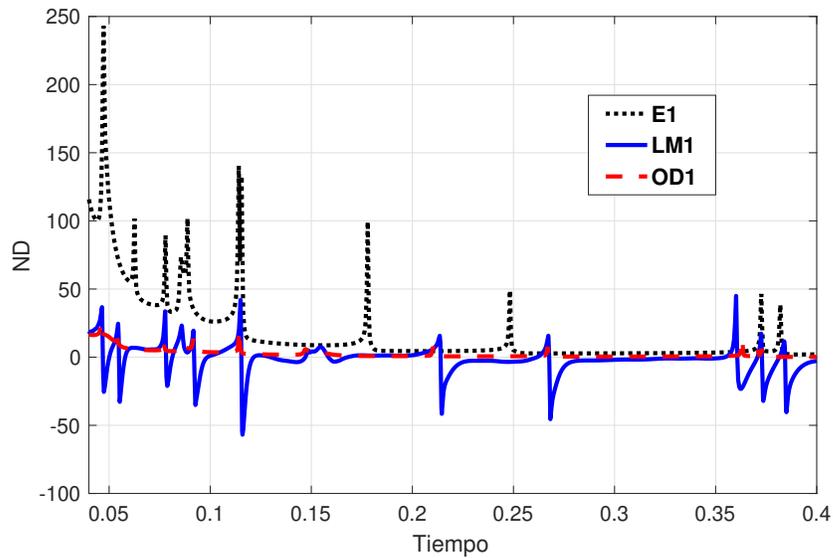


Figura 6. ND en $[0.05, 0.4]$ correspondiente a los esquemas **OD1**, **E1** y **LM1**



Finalmente, es necesario mencionar que la influencia directa de los altos valores alcanzados por la disipación numérica en algunos esquemas se puede evidenciar en las soluciones de equilibrio que se obtienen. De hecho, el lector interesado puede

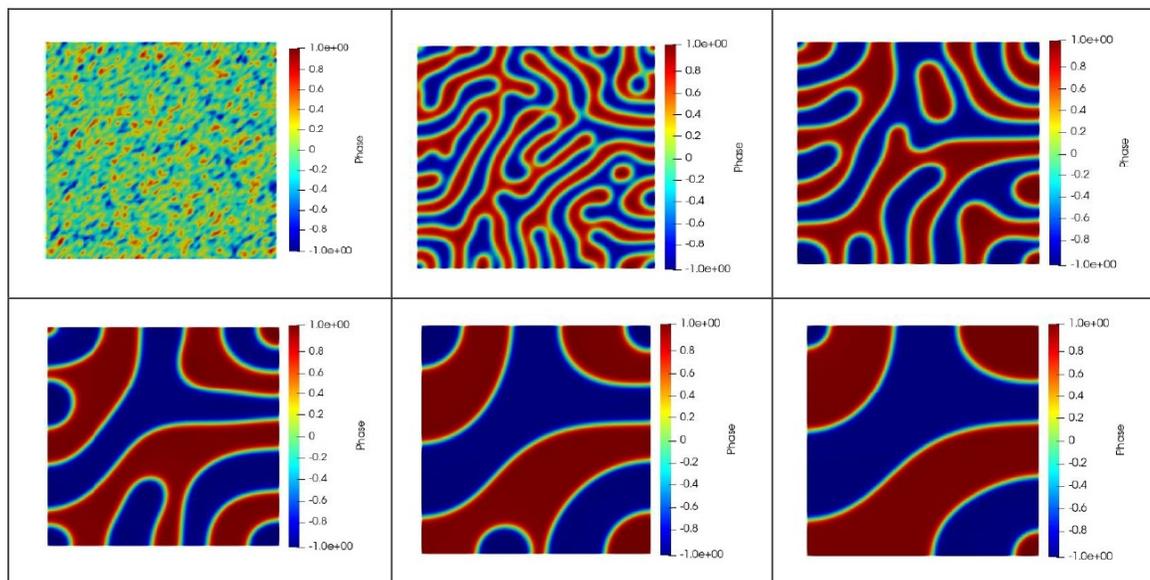
consultar ⁸, en donde se observa que el esquema **OD1** (aquel que introduce la menor disipación numérica) llega a la solución de equilibrio correcta para $k \leq 10^{-5}$; mientras que los esquemas **E1** y **LM1** (aquellos que introducen mayor disipación numérica), solo logran llegar a la solución de equilibrio correcta cuando se toma el valor del parámetro temporal $k \leq 10^{-7}$.

Teniendo en cuenta lo anterior, se concluye que, desde el punto de vista computacional, **OD1** es el mejor de los esquemas de primer orden, porque podemos tomar pasos de tiempo más grandes (reduciendo el costo computacional) y aún así obtener un buen comportamiento del esquema.

4.2. ESQUEMA OD2

Con respecto a la dinámica del esquema **OD2**, en la Fig. 7 se muestra la evolución de las distintas fases a lo largo del tiempo; y se evidencia la tendencia del esquema a llegar a una solución de equilibrio, siguiendo la misma dinámica observada en ⁸.

Figura 7. Dinámica de las fases en el esquema **OD2**



Con respecto a la estabilidad energética, en las Figs. 8 y 9, se muestra la evolución de la energía $E(\phi^{n+1})$ en dos intervalos de tiempo diferentes, donde se verifica que el esquema **OD2** tiene energía decreciente en tiempo.

Figura 8. Energía en $[0, 0.4]$ correspondiente al esquema **OD2**

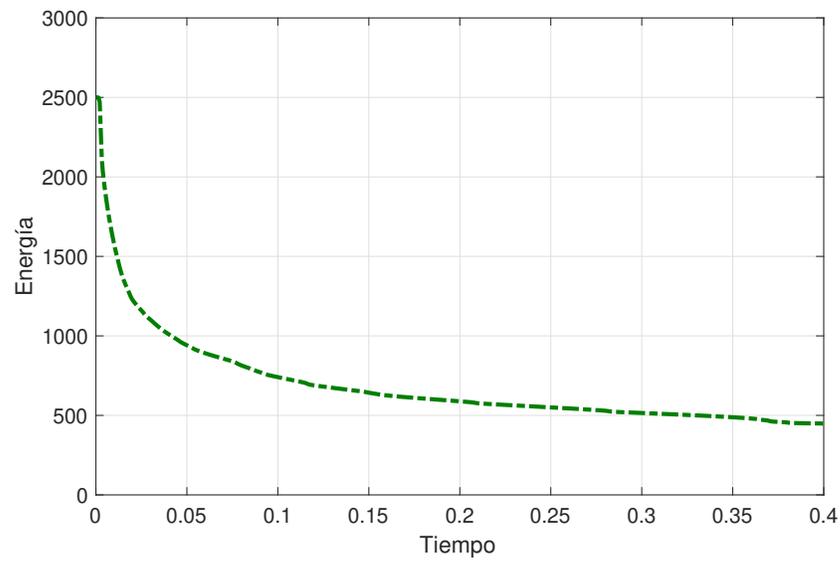


Figura 9. Energía en $[0.4, 1]$ correspondiente al esquema **OD2**

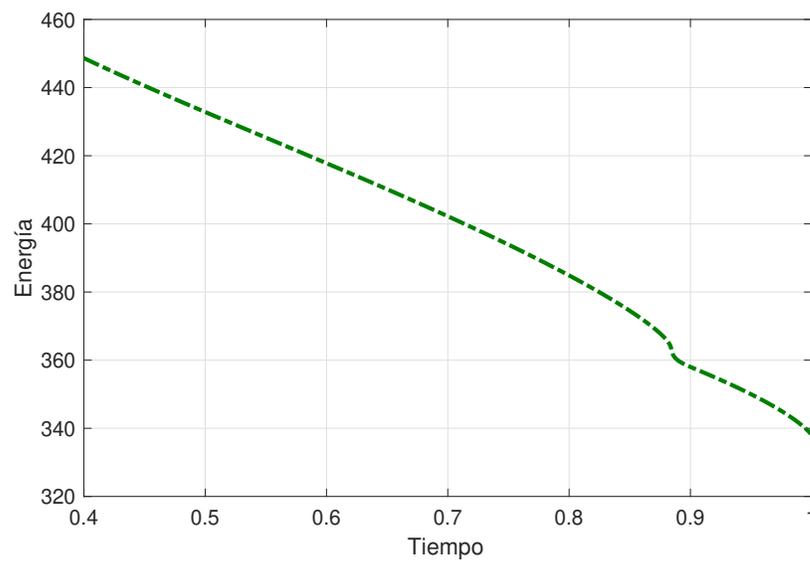


Figura 10. ND en $[0, 0.04]$ correspondiente al esquema **OD2**

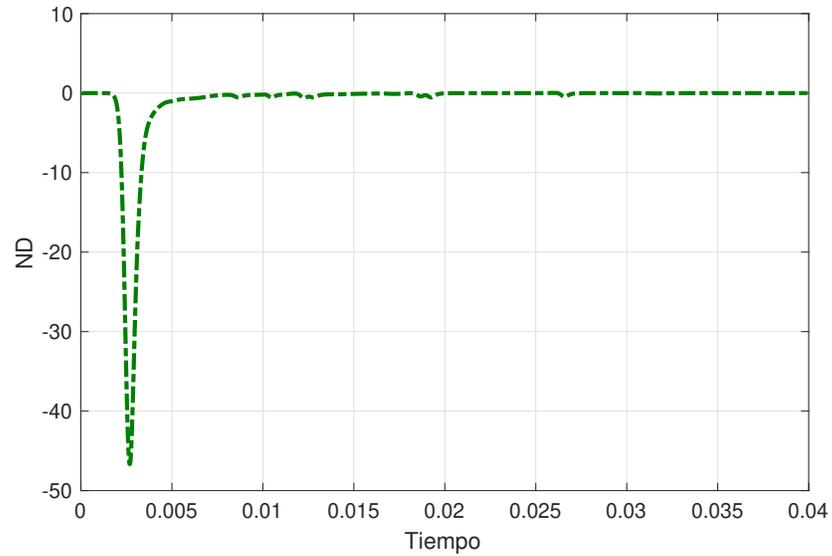
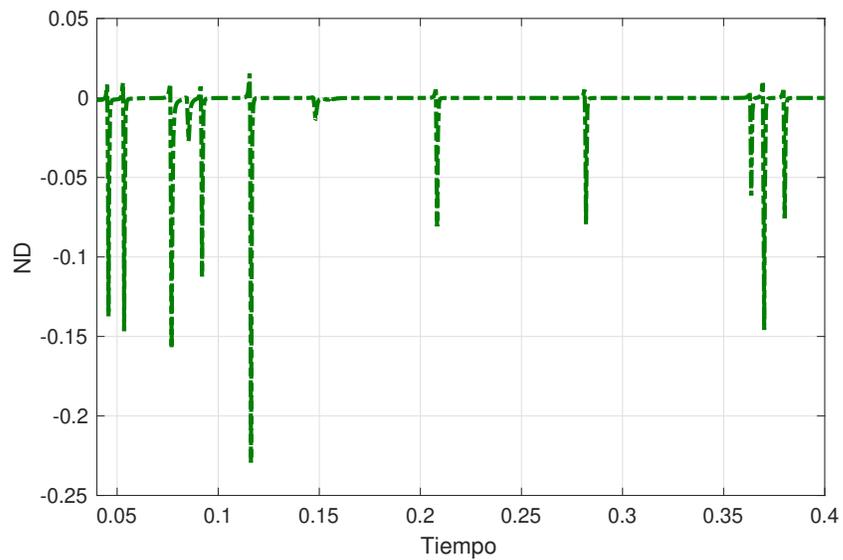


Figura 11. ND en $[0.05, 0.4]$ correspondiente al esquema **OD2**



Finalmente, en las Figs. 10 y 11 se observa que los valores de ND introducidos por el esquema **OD2** son bastante más pequeños que los observados en los esquemas lineales de primer orden. Como consecuencia directa de esto y teniendo en cuenta

que **OD2** es de segundo orden en tiempo, en ⁸ se puede constatar que el esquema **OD2** llega a la solución correcta de equilibrio para valores de la longitud del paso en el tiempo $k \leq 10^{-4}$.

Como conclusión se tiene que, desde el punto de vista computacional, el esquema de segundo orden **OD2** es el mejor de todos los esquemas estudiados en este trabajo, porque se pueden tomar longitudes de paso en el tiempo más grandes (reduciendo el costo computacional) y aún así obtener un buen comportamiento del esquema.

BIBLIOGRAFÍA

- A. CUCCHI, A. MELLET y N. MEUNIER. “A Cahn-Hilliard Model for Cell Motility”. En: *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 52 (2020), págs. 3843-3880 (vid. págs. 11, 12).
- A. L. BERTOZZI, S. ESEDOGLU y A. GILLETE. “Inpainting of binary images using the Cahn–Hilliard equation”. En: *IEEE Transactions on image processing* 16 (2006), págs. 285-291 (vid. págs. 10, 12).
- ALLAIRE, G. *Numerical analysis and optimization: an introduction to mathematical modeling and numerical simulation*. Oxford University Press, 2007 (vid. págs. 10, 39).
- BREZIS, H. *Análisis funcional, Teoría y aplicaciones*. Alianza Editorial, Madrid, 1984 (vid. pág. 20).
- CAHN, J. W. “On spinodal decomposition”. En: *Acta Metallurgica* 9 (1961), págs. 795-801 (vid. págs. 10, 12).
- CAHN, J. W. y J. E. HILLIARD. “Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy”. En: *The Journal of Chemical Physics* 28 (1958), págs. 258-267 (vid. págs. 10, 21).
- D. JEONG, et al. “Numerical analysis of energy-minimizing wavelengths of equilibrium states for diblock copolymers”. En: *Current Applied Physics* 14 (2014), págs. 1263-1272 (vid. págs. 10, 12).

- D. KAY, V. STYLES y E. SULI. “Discontinuous Galerkin finite element approximation of the Cahn–Hilliard Equation with convection”. En: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 47 (2009), págs. 2660-2685 (vid. pág. 25).
- ELLIOT, C.M. y H. GARCKE. “On the Cahn–Hilliard equation with degenerate mobility”. En: *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 27 (1996), págs. 404-423 (vid. pág. 25).
- EVANS, L. C. *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, 2010 (vid. págs. 18, 19).
- EYRE, D. J. “An Unconditionally Stable One-Step Scheme for Gradient System”. En: (1997) (vid. págs. 40, 43).
- FENG, X. y A. PROHL. “Error analysis of a mixed finite element method for the Cahn–Hilliard equation”. En: *Numerische Mathematik* 99 (2004), págs. 47-48 (vid. pág. 25).
- FOLLANG, G. *Real analysis: modern thecnics and theory applications*. Printed in the United States of America, 1984 (vid. pág. 19).
- GARCKE, H. y S. YAYLA. “Long-time dynamics for a Cahn-Hilliard tumor growth model with chemotaxis”. En: *Journal of Mathematical Physics* 71 (2020) (vid. pág. 12).
- GUILLÉN-GONZÁLEZ, F. y G.TIERRA. “On linear schemes for a Cahn-Hilliard diffuse interface model”. En: *Journal of Computational Physics* 234 (2013), págs. 140-171 (vid. págs. 11, 13, 21, 23, 39, 62, 63, 67, 70).

- GUILLÉN-GONZÁLEZ, F. y G. TIERRA. “Second order schemes and time-step adaptivity for Allen-Cahn and Cahn-Hilliard models”. En: *Computers and Mathematics with Applications* 68 (2014), págs. 821-846 (vid. pág. 11).
- H. GARCKE, K. LAM y A. SIGNORI. “On a phase field model of Cahn-Hilliard type for tumour growth with mechanical effects”. En: *Nonlinear Analysis Real World Applications* 57 (2021), págs. 103-192 (vid. págs. 11, 12).
- H. LEE, et al. “Modeling and simulation of droplet evaporation using a modified Cahn-Hilliard equation”. En: *Journal Applied Mathematics and Computation* 390 (2021) (vid. pág. 11).
- J. ZHU, L. CHEN y J. SHEN. “Morphological evolution during phase separation and coarsening with strong inhomogeneous elasticity”. En: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 9 (2001) (vid. págs. 10, 12).
- J.W. BARRET, J.F. BLOWEY y H. GARCKE. “Finite element approximation of the Cahn–Hilliard equation with degenerate mobility”. En: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 37 (1999), págs. 286-318 (vid. pág. 25).
- KOTSCHOTE, M. y R. ZACHER. “Strong solutions in the dynamical theory of compressible fluid mixtures”. En: *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 25 (2015), págs. 1217-1256 (vid. pág. 12).
- R. CHOKSI, M. A. PELETIER y J. F. WILLIAMS. “On the phase diagram for microphase separation of diblock copolymers: an approach via a nonlocal Cahn-Hilliard functional”. En: *SIAM Journal on Applied Mathematics* 69 (2009), págs. 1712-1738 (vid. págs. 10, 12).

- TIERRA, G. y F. GUILLÉN-GONZÁLEZ. “Numerical Methods for Solving the Cahn–Hilliard Equation and Its Applicability to Related Energy-Based Models”. En: *Archives of Computational Methods in Engineering* 22 (2015), págs. 269-289 (vid. pág. 11).
- V. E. BADALASSI, H. D. CENICEROS y S. BANERJEE. “Computation of multiphase systems with phase field models”. En: *Journal of computational physics* 190 (2003), págs. 371-397 (vid. pág. 12).