

ESTUDIO DE UN PROBLEMA DIFERENCIAL MODELANDO SEPARACIÓN DE
FASES

JUAN PABLO BARRERA CARDOZO

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE MATEMÁTICAS
BUCARAMANGA
2023

ESTUDIO DE UN PROBLEMA DIFERENCIAL MODELANDO SEPARACIÓN DE
FASES

JUAN PABLO BARRERA CARDOZO

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

2023

DEDICATORIA

Este trabajo está dedicado a mi padre que fue un apoyo incondicional, a mi hermano y en especial a la mujer que me acompañó a lo largo de la carrera.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mi padre Humberto Barrera por la motivación y el apoyo incondicional brindado en mi formación.

Agradezco al profesor Diego Rueda, por sus enseñanzas, paciencia y pasión por mi proyecto de grado.

Agradezco a mis compañeros de clase en especial a Maria Fernanda, Yurley y Lucho.

Agradezco a Valentina Barrios, la mujer que estuvo acompañándome en los buenos y malos momentos, por el amor brindado en todos estos años.

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	10
1. Preliminares	15
1.1. Notación	15
1.2. Espacios de funciones	16
1.3. Definiciones y resultados de Análisis Funcional	19
1.4. Otros resultados relativos al análisis numérico	22
2. Análisis teórico	24
2.1. Modelo de Allen-Cahn	24
2.2. Existencia de soluciones débiles	26
3. Esquemas numéricos	31
3.1. Un esquema genérico de segundo orden	31
3.2. Esquema no lineal 1 (NL1)	34
3.3. Esquema no lineal 2 (NL2)	45
3.4. Esquema lineal de dos pasos	50
4. Métodos de Newton y simulaciones	56
4.1. Método de Newton para el esquema no lineal 1 (NL1)	56
4.2. Método de Newton para el esquema no lineal 2 (NL2)	62
4.3. Simulaciones numéricas	65
BIBLIOGRAFÍA	68

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. $\text{diam}(K)$ y $\rho(K)$ para un triángulo K en \mathbb{R}^2 .	23
Figura 2. Dato inicial ϕ_0 .	65
Figura 3. Dinámica de las fases.	66
Figura 4. Energía $E(\phi)$ en el intervalo $[3, 7]$.	67
Figura 5. Energía $E(\phi)$ en el intervalo $[7, 15]$.	67
Figura 6. Energía $E(\phi)$ en el intervalo $[0, 100]$.	67

RESUMEN

TÍTULO: ESTUDIO DE UN PROBLEMA DIFERENCIAL MODELANDO SEPARACIÓN DE FASES
*

AUTOR: JUAN PABLO BARRERA CARDOZO **

PALABRAS CLAVE: MODELO DE ALLEN-CAHN, ESQUEMAS NUMÉRICOS, EXISTENCIA DE SOLUCIONES DÉBILES.

DESCRIPCIÓN:

La ecuación de Allen-Cahn es una EDP de reacción-difusión que describe el proceso de separación de fases en sistemas de aleaciones de varios componentes. Debido a sus variadas aplicaciones científicas, el estudio (tanto teórico como numérico) de este modelo ha sido el foco de interés de diversos investigadores en los últimos años. El presente trabajo se enfoca en el estudio matemático del modelo de Allen-Cahn. Por un lado, en lo que respecta al análisis teórico del modelo, se estudia la existencia de soluciones débiles usando el método de aproximaciones de Galerkin. Por otro lado, en lo que respecta al análisis numérico, se estudian tres esquemas de segundo orden en tiempo para aproximar numéricamente el modelo de Allen-Cahn, dos de los cuales son no lineales y uno es lineal. Se estudian dos métodos de Newton (cada uno de ellos asociado a uno de los esquemas no lineales estudiados), y se estudia su buen planteamiento y convergencia. Finalmente, se presentan los resultados de algunas simulaciones numéricas realizadas para ilustrar la dinámica de separación de fases descrita por el modelo de Allen-Cahn.

* Trabajo de grado

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

ABSTRACT

TITLE: STUDY OF A DIFFERENTIAL PROBLEM BY MODELING PHASE SEPARATION *

AUTHOR: JUAN PABLO BARRERA CARDOZO **

KEYWORDS: ALLEN-CAHN MODEL, NUMERICAL SCHEMES, EXISTENCE OF WEAK SOLUTIONS.

DESCRIPTION:

The Allen-Cahn equation is a reaction-diffusion PDE that describes the phase separation process in multi-component alloy systems. Due to its varied scientific applications, the study (both theoretical and numerical) of this model has been the focus of interest of various researchers in recent years. The present work focuses on the mathematical study of the Allen-Cahn model. On one hand, with regard to the theoretical analysis of the model, the existence of weak solutions is studied using the Galerkin approximation method. On the other hand, with regard to the numerical analysis, three second-order in time schemes are studied to approximate the Allen-Cahn model, two of which are nonlinear and one is linear. Two Newton methods are studied (each associated with one of the nonlinear schemes studied), and their well-posedness and convergence are studied. Finally, the results of some numerical simulations carried out to illustrate the phase separation dynamics described by the Allen-Cahn model are presented.

* Bachelor Thesis

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

INTRODUCCIÓN

El presente trabajo de grado se enmarca en la teoría de las ecuaciones diferenciales parciales (EDP) no lineales, con un enfoque específico en el estudio teórico y numérico del modelo de Allen-Cahn ¹. La ecuación Allen-Cahn es una EDP de reacción-difusión que describe el proceso de separación de fases (proceso físico por el cual se pueden separar las mezclas) en sistemas de aleaciones de varios componentes. Esta ecuación constituye el modelo fundamental para el desarrollo de transiciones de fase y dinámicas de interfaz.

La ecuación de Allen-Cahn es obtenida partiendo del funcional de energía libre dado por

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

donde ϕ denota la función de campo de fase y $F(\phi)$ es un potencial. Aunque en la literatura se han presentado varias opciones para $F(\phi)$, en este trabajo se considera el potencial de doble pozo de “Ginzburg-Landau” dado por

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

donde $\varepsilon > 0$ es un parámetro relacionado con el espesor de la interfaz. Existen otras opciones posibles del potencial que se suelen considerar en la bibliografía, como el potencial logarítmico

$$F(\phi) = \frac{\theta}{2} [(1 + \phi) \log(1 + \phi) + (1 - \phi) \log(1 - \phi)] + \frac{\theta_c}{2} (1 + \phi)(1 - \phi),$$

¹ J. W. Cahn S. M. Allen. “Coherent and Incoherent Equilibria in Iron-Rich Iron-Aluminum Alloys”. En: *Acta Metall* 23.9 (1975), págs. 1017-1026.

y el respectivo análisis matemático (tanto teórico como numérico), difiere considerablemente dependiendo del tipo de potencial que se considere. Tomando como punto de partida el funcional $E(\phi)$, la ecuación de Allen-Cahn se puede escribir como $\phi_t = -\frac{\delta E(\phi)}{\delta \phi}$, donde $\frac{\delta E(\phi)}{\delta \phi}$ es la derivada variacional de la energía libre tomada en la norma $L^2(\Omega)$.

Debido a sus variadas aplicaciones científicas, el estudio (tanto teórico como numérico) de este modelo ha sido el foco de interés de diversos investigadores en los últimos años. Aunque originalmente se utilizó para describir el movimiento de los límites de fase en sólidos cristalinos², actualmente es bien conocido que sus aplicaciones abarcan desde problemas de ingeniería e industriales en los que existe una interfaz que evoluciona en el tiempo; hasta problemas físicos, como el crecimiento de cristales, la segmentación de imágenes y la mezcla de dos fluidos incompresibles, o en la hidrodinámica y la ciencia de los materiales para modelar la mezcla de diferentes fluidos, sólidos o gases (ver, por ejemplo,^{2 3 4 5 6 7} y referencias citadas en ellos).

-
- ² J. W. Cahn S. M. Allen. "A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening". En: *Acta Metall* 27.6 (1979), págs. 1085-1095.
 - ³ K. Mikula M. Bene V. Chalupecky. "Geometrical image segmentation by the Allen Cahn equation". En: *Appl. Numer. Math.* 51.3 (2004), págs. 187-205.
 - ⁴ S. M. Allen J. W. Cahn. "A Microscopic Theory of Domain Wall Motion and Its Experimental Verification in Fe-Al Alloy Domain Growth Kinetics". En: *Journal de Physique* (1977), págs. 51-54.
 - ⁵ J. Shen C. Liu. "A phase field model for the mixture of two incompressible fluids and its approximation by a Fourier-spectral method". En: *Physica D* 179.3 (2003), págs. 211-228.
 - ⁶ B. Peter A. Shah M. Sabir. "An efficient time-stepping scheme for numerical simulation of dendritic crystal growth". En: *European Journal of Computational Mechanics* 25.6 (2017), págs. 475-488.
 - ⁷ J. J. Feng C. F. Olliviergouch H. Hu P. Yue C. Zhou. "Phase-field simulations of interfacial dynamics in viscoelastic fluids using finite elements with adaptive meshing". En: *J. Comput. Phys.* 219.1 (2006), págs. 47-67.

Este trabajo de grado está enfocado en analizar, tanto teórica como numéricamente, el modelo de Allen-Cahn; y las dos principales contribuciones de este trabajo se resumen a continuación:

1. Desde el punto de vista teórico, en lo que respecta al análisis de la existencia de soluciones débiles del modelo de Allen-Cahn, no se conoce algún trabajo que estudie específicamente este modelo. En ⁸, fue estudiado un modelo que incluye una ecuación más general tipo Cahn-Hilliard/Allen-Cahn, y allí se estudia la existencia de soluciones débiles para este modelo generalizado. En este trabajo, se usan las ideas presentadas en ⁸, para escribir una demostración limpia de la existencia de soluciones débiles para el modelo específico de Allen-Cahn.
2. Desde el punto de vista numérico, en ⁹ se estudiaron diversos esquemas numéricos de segundo orden (energéticamente estables, ver Definición 3.1.1 abajo) asociados al modelo de Allen-Cahn. En este trabajo de grado, se consideran tres de los esquemas numéricos propuestos en ⁹ (2 no lineales y 1 lineal), y se demuestran las mismas propiedades cualitativas estudiadas en ⁹, pero proponiendo demostraciones diferentes a las planteadas en el trabajo original. Específicamente, se presentan demostraciones alternativas respecto a: (a) la existencia y unicidad de soluciones para los esquemas numéricos; (b) la existencia y unicidad de solución de los métodos de Newton asociados a los esquemas no lineales; y (c) la convergencia de las soluciones de los mé-

⁸ Y. Nagase G. Karali. "On the existence of solution for a Cahn-Hilliard/Allen-Cahn equation". En: *Discrete Contin. Dyn. Syst.* 7 (2014), págs. 127-137.

⁹ G. Tierra F. Guillén-González. "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.

todos de Newton hacia la solución de cada esquema numérico no lineal. Es importante destacar que en ⁹, se demostraron estas propiedades utilizando argumentos relacionados con mínimos de funcionales estrictamente convexos; mientras que, en este trabajo se utilizarán las propiedades de estabilidad energética de los esquemas numéricos para demostrar las mismas propiedades.

El presente trabajo 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. Se inicia con 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; posteriormente, se presenta un repaso de algunos resultados conocidos del análisis funcional, y finalmente, se presentan algunos resultados y definiciones que serán usados en el análisis numérico del modelo.

En el Capítulo 2, se presenta el análisis teórico del modelo de Allen-Cahn. Específicamente, se demuestra la existencia de soluciones débiles del modelo usando el método de aproximaciones de Galerkin.

En el Capítulo 3, se estudian tres esquemas numéricos de segundo orden en tiempo para aproximar numéricamente el modelo de Allen-Cahn. Los dos primeros son esquemas no lineales y el tercero es lineal. Para estos esquemas se prueban algunas propiedades cualitativas, incluyendo la existencia y unicidad de soluciones, y la estabilidad energética (ver Definición 3.1.1 abajo).

Finalmente, en el Capítulo 4, se estudian dos métodos de Newton (cada uno de ellos asociado a uno de los esquemas no lineales estudiados), y se estudia

su buen planteamiento y convergencia. Así mismo, se presentan los resultados de algunas simulaciones numéricas realizadas para ilustrar la dinámica de separación de fases descrita por el modelo de Allen-Cahn, usando uno de los esquemas numéricos estudiados en este trabajo.

1. Preliminares

En este capítulo se llevará a cabo una revisión detallada de los conceptos y resultados fundamentales que serán necesarios para el desarrollo del trabajo. En primer lugar, se hará un repaso de los diferentes espacios de funciones, destacando principalmente los espacios de Lebesgue, Sobolev y Bochner. Así mismo, se presenta un repaso de algunos resultados conocidos del análisis funcional; y finalmente, se presentan algunos resultados y definiciones que serán usados en el análisis numérico del modelo

1.1. Notación

En el desarrollo de este trabajo, Ω denotará un dominio de \mathbb{R}^n , para $n = 2, 3$, esto es, un conjunto no vacío, abierto y conexo cuya frontera será denotada por $\partial\Omega$. Un punto de \mathbb{R}^n es escrito como $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ y su norma euclidiana viene dada por $\|x\|_{\mathbb{R}^n} = (\sum_{i=1}^n x_i^2)^{1/2}$.

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

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

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:

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

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:

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

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

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 será 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}^n con frontera $\partial\Omega$ suficientemente regular. Para $p \in \mathbb{R}, 1 \leq p < \infty$, el espacio de Banach $L^p(\Omega)$ es definido como

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

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

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

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 $\|u\|_{L^2} = (u, u)^{\frac{1}{2}}$. 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

$$L^\infty(\Omega) := \{u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n : u \text{ es medible y } |u(x)| \leq C \text{ c.t.p. en } \Omega\},$$

con norma definida por

$$\|u\|_{L^\infty} = \sup_{x \in \Omega} \text{ess } |u(x)|.$$

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

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

Partiendo de estos espacios, se presentará el concepto de derivada débil.

Definición 1.2.1. (Derivada débil) Suponga que $u, v \in L^1_{loc}(\Omega)$ y α es un multi-índice. Se dice que v es la α -ésima derivada débil de u , si

$$\int_{\Omega} u D^\alpha \phi d\mathbf{x} = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} v \phi d\mathbf{x}, \quad \forall \phi \in C_0^\infty(\Omega).$$

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 por

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

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

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

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

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

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

y cuya norma es definida por $\|v\|_{H^m} = (u, u)_{H^m(\Omega)}^{\frac{1}{2}}$. En particular, el espacio de Sobolev $H^1(\Omega)$ es definido por

$$H^1(\Omega) = \left\{ u \in L^2(\Omega) \text{ tal que } \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), \quad \forall_i \in \{1, \dots, n\} \right\},$$

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

Finalmente, se definirán los espacios de Bochner.

Definición 1.2.2. (Espacios de Bochner) Sea X un espacio de Banach y a, b tales que $-\infty \leq a < b \leq +\infty$. Para $1 \leq \alpha < +\infty$, diremos que $f \in L^\alpha(a, b; X)$ si: f es medible y

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

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

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

1.3. Definiciones y resultados de Análisis Funcional

En esta sección, se citarán algunas definiciones y resultados del área de Análisis Funcional que serán utilizados en el desarrollo de los capítulos posteriores. Se comenzará enunciando las siguientes dos desigualdades que serán usadas frecuentemente, y sus respectivas demostraciones se encuentran en ¹⁰.

Teorema 1.3.1. (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 1.3.2. (Desigualdad de Hölder Generalizada) Sea Ω un dominio acotado de \mathbb{R}^n y las funciones $f_i \in L^{p_i}(\Omega)$ para $i = 1, 2, \dots, k$, con $p_i, p \geq 1$ y satisfaciendo $\frac{1}{p} = \frac{1}{p_1} + \frac{1}{p_2} + \dots + \frac{1}{p_k}$. Entonces, para $f = f_1 f_2 \cdots f_{k-1} f_k \in L^p(\Omega)$ se tiene

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

A continuación, se presenta el concepto de inmersión continua de un espacio de Banach en otro, el cual será necesario para enunciar el teorema de las inmersiones de Sobolev (tomado de G. P. Galdi. *An Introduction to the Mathematical Theory of the Navier-Stokes Equations*. Springer, 2011), teorema que será usado frecuentemente en la obtención de estimaciones, tanto en el análisis teórico, como en el análisis numérico.

Definición 1.3.3. (Inmersión continua) Sean X y Y espacios de Banach con normas $\|\cdot\|_X$ y $\|\cdot\|_Y$ respectivamente, tales que $X \subseteq Y$. Diremos que X está inmerso continuamente en Y , y lo denotaremos por $X \hookrightarrow Y$, si el operador inclusión es

¹⁰ H. Brezis. *Análisis funcional. Teoría y aplicaciones*. Alianza Editorial, 1984.

continuo, es decir, si existe una constante $C > 0$ tal que

$$\|x\|_Y \leq C\|x\|_X, \quad \forall x \in X.$$

Teorema 1.3.4. (Teorema de las inmersiones de Sobolev) *Sea Ω un dominio de \mathbb{R}^n , $p \geq 1$ y $k \geq 0$. Si $kp \leq n$ entonces*

$$W^{k,p}(\Omega) \hookrightarrow L^r(\Omega),$$

para todo $r \in \left[p, \frac{np}{n-kp} \right]$ si $kp < n$, y para todo $r \in [p, \infty)$ si $kp = n$. En particular, existen constantes $c_1, c_2 > 0$ que dependen únicamente de k, p, r y n tales que, para todo $u \in W^{k,p}(\Omega)$,

$$\|u\|_{L^r} \leq c_1 \|u\|_{W^{k,p}} \quad \text{para todo } r \in \left[p, \frac{np}{n-kp} \right], \text{ si } kp < n,$$

$$\|u\|_{L^r} \leq c_2 \|u\|_{W^{k,p}} \quad \text{para todo } r \in [p, \infty), \text{ si } kp = n.$$

Finalmente, si $kp > n$, cada $u \in W^{k,p}(\Omega)$ es igual en c.t.p. en Ω a una única función en $C^l(\bar{\Omega})$, con $0 \leq l < k - \frac{n}{p}$ y la siguiente desigualdad se tiene

$$\|u\|_{C^l} \leq c_3 \|u\|_{W^{k,p}}.$$

A lo largo de este documento, se usarán repetidamente las siguientes desigualdades de Sobolev en dominios tridimensionales, que son consecuencia directa del Teorema 1.3.4:

$$\|v\|_{L^2} \leq C\|v\|_{H^1} \quad \forall v \in H^1(\Omega),$$

$$\|v\|_{L^4} \leq C\|v\|_{H^1} \quad \forall v \in H^1(\Omega),$$

$$\|v\|_{L^6} \leq C\|v\|_{H^1} \quad \forall v \in H^1(\Omega).$$

Por otra parte, los siguientes dos teoremas serán utilizados para estudiar el buen

planteamiento de los esquemas numéricos en el Capítulo 3.

Teorema 1.3.5. (Teorema de Lax-Milgram) *Sea H un espacio de Hilbert y $a: H \times H \rightarrow \mathbb{R}$ un operador bilineal continuo y coercivo, esto es, existen constantes $\alpha, \beta > 0$ tales que*

$$|a(u, v)| \leq \alpha \|u\|_H \|v\|_H, \quad \text{para todo } u, v \in H$$

y

$$a(u, u) \geq \beta \|u\|_H^2, \quad \text{para todo } u \in H.$$

Entonces, para cada $f \in H'$, existe un único elemento $u \in H$ tales que

$$a(u, v) = \langle f, v \rangle, \quad \text{para todo } v \in H.$$

Teorema 1.3.6. (Teorema de Leray-Schauder) *Sea X un espacio de Banach, $\lambda \in [0, 1]$ y $\mathcal{R}: X \rightarrow X$ una aplicación continua y compacta tal que, para cada $v \in X$ con $v = \lambda \mathcal{R}(v)$, se tiene que $\|v\|_X \leq C$ con $C > 0$ independiente de $\lambda \in [0, 1]$. Entonces, \mathcal{R} admite al menos un punto fijo.*

Para el paso al límite en las aproximaciones de Galerkin que serán estudiadas en el Capítulo 2, se hará uso de los siguientes tres resultados, cuyas pruebas pueden encontrarse, por ejemplo, en ^{10, 11}.

Teorema 1.3.7. *Sea X un espacio de Banach reflexivo y $(x_n) \subseteq X$ una sucesión acotada en X . Entonces, existe una subsucesión $(x_{n_k}) \subseteq (x_n)$ y $\bar{x} \in X$ tal que x_{n_k} converge débilmente a \bar{x} .*

Teorema 1.3.8. *Sean X Banach separable, X' el espacio dual asociado a X y $(x'_n) \subseteq X'$ una sucesión acotada en X' . Entonces, existe una subsucesión $(x'_{n_k}) \subseteq$*

¹¹ J. Peetre J.-L. Lions. "Sur une classe d'espaces d'interpolation". En: *Inst. Hautes Etudes* 19 (1964), págs. 5-68.

(x'_n) y $x' \in X$ tal que x'_{n_k} converge débil* a x' .

Lema 1.3.9. Sean $X \mapsto B \hookrightarrow Y$ espacios de Banach con inmersiones continuas, siendo además la de X en B compacta. Se tienen entonces las siguientes inyecciones compactas:

- $L^\infty(0, T; X) \cap \{\phi : \frac{\partial \phi}{\partial t} \in L^r(0, T; Y)\} \mapsto C([0, T]; B)$ si $1 < r \leq +\infty$,
- $L^q(0, T; X) \cap \{\phi : \frac{\partial \phi}{\partial t} \in L^1(0, T; Y)\} \mapsto L^q(0, T; B)$ si $1 \leq q \leq +\infty$.

1.4. Otros resultados relativos al análisis numérico

Las siguiente definición y teoremas son tomados de ¹² y ⁹, y serán necesarios en el estudio de la convergencia de los métodos de Newton en el Capítulo 4.

Definición 1.4.1. (Triangulación cuasiuniforme) Una familia de triangulaciones $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ de Ω es llamada cuasiuniforme, si existen constantes positivas C_1, C_2 , tales que, para cada $K \in \{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$, se tiene

$$C_1 h \leq \rho(K) \quad \text{y} \quad \text{diam}(K) \leq C_2 h,$$

donde $\rho(K)$ es el diámetro del mayor círculo inscrito en K y $\text{diam}(K)$ es el diámetro del menor círculo que contiene a K (ver Figura 1).

Lema 1.4.2. (Desigualdad inversa) Sea Ω un dominio acotado de \mathbb{R}^n , $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ una familia de triangulaciones cuasiuniformes y P un subespacio finito dimensional de $W^{l,p}(\Omega) \cap W^{m,q}(\Omega)$, con $1 \leq p \leq \infty$, $1 \leq q \leq \infty$ y $0 \leq m \leq l$. Entonces, existe una constante positiva C tal que, para todo $v \in P$, se tiene

$$\|v\|_{W^{l,p}} \leq C h^{m-l+n/p-n/q} \|v\|_{W^{m,q}}.$$

¹² L. R. Scott S. C. Brenner. *The mathematical theory of finite element methods*. Springer, 2011.

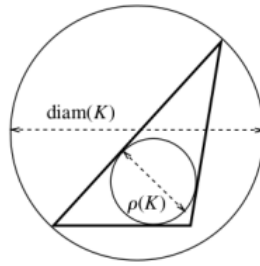


Figura 1. $\text{diam}(K)$ y $\rho(K)$ para un triángulo K en \mathbb{R}^2 .

Lema 1.4.3. *Considere una secuencia de errores $\{e_\phi^l\}_{l \geq 0}$ con $e_\phi^l = \phi^{n+1} - \phi^l$, tal que*

$$\|e_\phi^{l+1}\|_{H^1}^2 \leq C (\|e_\phi^l\|_{H^1}^2)^2 \quad \forall l \geq 0, \quad \text{y } \|e_\phi^0\|_{H^1}^2 \text{ es suficientemente pequeño.} \quad (2)$$

Entonces ϕ^{l+1} converge a ϕ^{n+1} a medida que $l \rightarrow \infty$ en la norma $H^1(\Omega)$ de forma cuadrática.

2. Análisis teórico

2.1. Modelo de Allen-Cahn

La ecuación de Allen-Cahn es una EDP de reacción-difusión que describe el proceso de separación de fases (proceso físico por el cual se pueden separar las mezclas) en sistemas de aleaciones de varios componentes. Esta ecuación constituye el modelo fundamental para el desarrollo de transiciones de fase y dinámicas de interfaz, y es obtenida tomando como punto de partida el funcional de energía libre dado por

$$E(\phi) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 + F(\phi) \right) dx, \quad (3)$$

donde $F(\phi)$ es el potencial de doble pozo de Ginzburg-Landau dado por

$$F(\phi) = (\phi^2 - 1)^2 / (4\varepsilon^2), \quad (4)$$

con derivada

$$f(\phi) = F'(\phi) = (\phi^2 - 1)\phi / \varepsilon^2. \quad (5)$$

En (3), ϕ denota la función de campo de fase, y los términos $\frac{1}{2} |\nabla \phi|^2$ y $F(\phi)$ corresponden a la energía interfacial acumulada (interacciones no locales entre componentes) y el potencial (la mayor parte de la energía de la mezcla). De acuerdo al enfoque variacional energético, la ecuación de Allen-Cahn (para el campo de fase ϕ) está dada por

$$\phi_t = - \frac{\partial E(\phi)}{\partial \phi},$$

donde $\frac{\partial E(\phi)}{\partial \phi}$ denota la derivada variacional de la energía libre en la norma de $L^2(\Omega)$.

Específicamente,

$$\left\langle \frac{\partial E(\phi)}{\partial \phi}, \bar{\phi} \right\rangle = \int_{\Omega} (\nabla \phi \nabla \bar{\phi} + F'(\phi) \bar{\phi}) \, d\mathbf{x},$$

de lo cual, asumiendo que $\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = 0$ sobre $\partial\Omega$ e integrando por partes se llega a

$$\left\langle \frac{\partial E(\phi)}{\partial \phi}, \bar{\phi} \right\rangle = - \int_{\Omega} (\Delta \phi) \bar{\phi} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} F'(\phi) \bar{\phi} \, d\mathbf{x}.$$

Entonces, el modelo de Allen-Cahn está dado por

$$\begin{cases} \phi_t + \gamma(-\Delta \phi + f(\phi)) = 0 & \text{en } (0, T) \times \Omega, \\ \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = 0 & \text{sobre } (0, T) \times \partial\Omega, \\ \phi|_{t=0} = \phi_0 & \text{en } \Omega, \end{cases} \quad (6)$$

donde $\gamma > 0$ es el coeficiente de relajación. Con el objetivo de deducir una formulación débil para el modelo de Allen-Cahn (6), se multiplica (6)₁ por $\bar{\phi} \in H^1(\Omega)$, se integra en Ω y se usa la identidad de Green y la condición de contorno (6)₂, de lo cual se obtiene

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega} \phi_t \cdot \bar{\phi} \, d\mathbf{x} + \gamma \left(\int_{\Omega} -\Delta \phi \cdot \bar{\phi} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} f(\phi) \cdot \bar{\phi} \, d\mathbf{x} \right) \\ &= \int_{\Omega} \phi_t \cdot \bar{\phi} \, d\mathbf{x} + \gamma \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \nabla \bar{\phi} \, d\mathbf{x} + \gamma \int_{\Omega} f(\phi) \cdot \bar{\phi} \, d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (7)$$

Además, tomando $\bar{\phi} = \frac{1}{\gamma}\phi_t$ en (7) se tiene que

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

de lo cual, se concluye la siguiente ley de energía

$$\frac{d}{dt} E(\phi) + \frac{1}{\gamma} \|\phi_t\|_{L^2}^2 = 0. \quad (8)$$

Teniendo en cuenta (7) y (8), se plantea la siguiente formulación variacional para el problema (6): Encontrar $\phi \in L^\infty(0, T; H^1(\Omega))$ con $\phi_t \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$, tal que $\phi(0) = \phi_0$ en Ω , y satisfaciendo la formulación variacional

$$(\phi_t, \bar{\phi}) + \gamma(\nabla\phi, \nabla\bar{\phi}) + \gamma(f(\phi), \bar{\phi}) = 0 \quad \forall \bar{\phi} \in H^1(\Omega), \quad \text{c.t.p } t \in (0, T). \quad (9)$$

2.2. Existencia de soluciones débiles

El objetivo de esta sección es probar la existencia de soluciones débiles para el modelo de Allen-Cahn (6), en el sentido de la definición dada en (9). Para esto, se usará el método de las aproximaciones de Galerkin, y se detallarán los aspectos más importantes en el desarrollo de la prueba. Con este fin, considere $\{\phi^1, \phi^2, \dots\}$ una base de $H^1(\Omega)$ satisfaciendo

$$\begin{cases} (\nabla\phi^m, \nabla\bar{\phi}) = \lambda_m(\phi^m, \bar{\phi}), & \forall \bar{\phi} \in H^1, \quad \phi^m \in H^1, \\ \|\phi^m\|_{L^2} = 1, \quad \lambda_m \uparrow +\infty, \end{cases}$$

donde $(\phi^i, \phi^j) = (\phi^i, \phi^j)_{L^2} = \delta_{ij}$. Considere Φ^m el espacio generado por $\{\phi^1, \dots, \phi^m\}$. Se dividirá la prueba en cuatro pasos principales.

Paso 1: Construcción de las soluciones aproximadas

Para cada $m \geq 1$, se considera el siguiente problema finito dimensional: Encontrar $\phi^m : [0, T] \mapsto \Phi^m$ tal que

$$\begin{cases} (\phi_t^m, \bar{\phi}) + \gamma(\nabla\phi^m, \nabla\bar{\phi}) + \gamma(f(\phi^m), \bar{\phi}) = 0 & \forall \bar{\phi} \in \Phi^m, \quad t \in (0, T), \\ \phi^m|_{t=0} = \phi^{0m}, \end{cases} \quad (10)$$

donde $\phi^{0m} = P_m\phi_0$, con $P_m : L^2 \mapsto \Phi^m$ siendo el proyector ortogonal habitual, esto es,

$$P_m\phi_0 = \sum_{i=1}^m (\phi_0, \phi^i) \phi^i.$$

Si se escribe

$$\phi^m(t) = \sum_{i=1}^m \eta_{im}(t) \phi^i,$$

entonces (10) puede considerarse como un problema de Cauchy para un sistema diferencial ordinario de primer orden, donde las incógnitas son las funciones η_{im} . Más precisamente, una formulación equivalente a (10) es la siguiente

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\eta_{jm} + \gamma\lambda_j\eta_{jm} + \gamma(f(\phi^m), \phi^j) = 0, & \forall j = 1, \dots, m, \\ \eta_{jm}(0) = (\phi_0, \phi^j), & \forall j = 1, \dots, m. \end{cases} \quad (11)$$

Por tanto, se puede aplicar la teoría clásica de existencia y unicidad para sistemas diferenciales ordinarios, y se obtiene que, para cada $m \geq 1$, existen $T_m > 0$ y una única función $\phi^m : [0, T_m) \mapsto \Phi^m$ que resuelve (10) al menos en $[0, T_m)$; así mismo,

para cada m , alguna de las siguientes dos alternativas se tiene (ver ¹³):

$$\text{O bien } T_m = T, \text{ o bien } \limsup_{t \rightarrow T_m} \|\phi^m(t)\|_{L^2} = +\infty.$$

En el siguiente paso se obtendrán algunas estimaciones para las funciones ϕ^m , que mostrarán que sólo la primera de estas dos afirmaciones puede ser cierta.

Paso 2: Estimaciones a priori de ϕ^m

En este paso y el siguiente, el objetivo es obtener estimaciones de ϕ^m que sean independientes de m . Con este fin, para cada $t \in [0, T_m)$, considere $\bar{\phi} = \phi^m(t)$ en (10), de lo cual se deduce

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\phi^m(t)\|_{L^2}^2 + \gamma \|\nabla \phi^m(t)\|_{L^2}^2 + \gamma (f(\phi^m(t)), \phi^m(t)) = 0. \quad (12)$$

Teniendo en cuenta que $f(\phi^m(t)) = \frac{1}{\varepsilon^2} [(\phi^m(t))^3 - \phi^m(t)]$, entonces se tiene que

$$(f(\phi^m(t)), \phi^m(t)) = \frac{1}{\varepsilon^2} \int_{\Omega} [(\phi^m(t))^4 - (\phi^m(t))^2] dx,$$

y usando este hecho en (12), se llega a

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\phi^m(t)\|_{L^2}^2 + \gamma \|\nabla \phi^m(t)\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{\varepsilon^2} \|\phi^m(t)\|_{L^4}^4 = \frac{\gamma}{\varepsilon^2} \|\phi^m(t)\|_{L^2}^2. \quad (13)$$

Ahora, integrando (13) en el intervalo de tiempo $[0, t]$, se obtiene que, para todo $t \in [0, T_m)$,

$$\frac{1}{2} \|\phi^m(t)\|_{L^2}^2 + \gamma \int_0^t \|\nabla \phi^m(s)\|_{L^2}^2 ds + \frac{\gamma}{\varepsilon^2} \int_0^t \|\phi^m(s)\|_{L^4}^4 ds = \frac{1}{2} \|\phi^{0m}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{\varepsilon^2} \int_0^t \|\phi^m(s)\|_{L^2}^2 ds, \quad (14)$$

¹³ E. Fernández-Cara. "A review of basic theoretical results concerning the Navier-Stokes and other similar equations". En: *Bol. Soc. Esp. Mat. Apl. SeMA* 32 (2005), págs. 45-73.

de lo cual, usando la desigualdad de Gronwall, se encuentra que

$$\|\phi^m(t)\|_{L^2}^2 \leq C(T_m)\|\phi_0\|_{L^2}^2, \quad \forall t \in [0, T_m]. \quad (15)$$

En consecuencia, en vista de (15), se tiene que $T_m = T$ y

$$\|\phi^m\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))} + \|\phi^m\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} + \|\phi^m\|_{L^4(0,T;L^4(\Omega))} \leq C, \quad (16)$$

donde C depende de Ω, T, γ y $\|\phi_0\|_{L^2}$, pero es independiente de m .

Paso 3: Estimaciones a priori de ϕ_t^m

Para obtener estimaciones uniformes de ϕ^m , considere $\bar{\phi} = \phi^m(t)$ en (10), de lo cual se deduce que

$$\|\phi_t^m(t)\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \frac{d}{dt} \|\nabla \phi^m(t)\|_{L^2}^2 + \gamma (f(\phi^m(t)), \phi_t^m(t)) = 0,$$

y procediendo como en (8), se llega a

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi^m(t)\|_{L^2}^2 + \gamma \int_{\Omega} F(\phi^m(t)) d\mathbf{x} \right) + \|\phi_t^m(t)\|_{L^2}^2 = 0. \quad (17)$$

Ahora, integrando (17) en el intervalo de tiempo $[0, t]$, se obtiene

$$\frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi^m(t)\|_{L^2}^2 + \gamma \int_{\Omega} F(\phi^m(t)) d\mathbf{x} + \int_0^t \|\phi_t^m(s)\|_{L^2}^2 ds = \frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi^{0m}\|_{L^2}^2 + \gamma \int_{\Omega} F(\phi^{0m}) d\mathbf{x},$$

de lo cual, teniendo en cuenta (16) y el hecho de que $F(\phi^m) \geq 0$ (ver (4)), se concluye que

$$\|\phi^m\|_{L^\infty(0,T;H^1(\Omega))} + \|\phi_t^m\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} \leq C, \quad (18)$$

donde $C > 0$ es independiente de m .

Paso 4: Argumentos de compacidad

Teniendo en cuenta (18), se puede usar el Lema 1.3.9 y obtener una subsucesión de $\{\phi^m\}$ con propiedades de convergencia fuerte en algún espacio apropiado. De hecho, tomando

$$X = H^1(\Omega), \quad B = L^4(\Omega), \quad Y = L^2(\Omega) \quad \text{y} \quad r = 2$$

en el Lema 1.3.9, se deduce que $\{\phi^m\}$ es relativamente compacta en $C(0, T; L^4(\Omega))$.

Así, para probar la existencia de una solución débil ϕ del problema variacional (9) para c.t.p $t \in (0; T)$, obtenido como el límite de una subsucesión de $\{\phi^m\}$, basta con pasar al límite en (10), que será posible debido a las estimaciones y compacidades obtenidas anteriormente. Específicamente, usando que, para una subsucesión de $\{\phi^m\}$, la cual por simplicidad será denotada de nuevo por $\{\phi^m\}$, se tiene que $\{\phi^m\}$ converge a ϕ fuertemente en $C(0, T; L^4(\Omega))$ y débilmente en $L^2(0, T; H^1(\Omega))$ (esto último se obtiene usando el Teorema 1.3.7), siguiendo argumentos estándar se concluye la existencia de solución débil del problema (9). Por ser argumentos bien conocidos y con el objetivo de reducir la extensión del presente trabajo, omitiremos este proceso, pero referimos al lector interesado a ⁸.

3. Esquemas numéricos

En este capítulo, se estudiarán tres esquemas numéricos, uno lineal y dos no lineales (dependiendo de la aproximación que se tome para el potencial $f(\phi)$). Para estos esquemas se probarán propiedades relativas al buen planteamiento y la estabilidad energética.

3.1. Un esquema genérico de segundo orden

Teniendo en cuenta la formulación débil dada en (9), se plantea un esquema numérico genérico de segundo orden en tiempo, utilizando una aproximación de diferencias finitas de punto medio en el tiempo para los términos lineales. Para esto, consideramos una partición uniforme de $[0, T]$ con paso de tiempo $k = T/N$ (parámetro temporal) tal que $(t_n = nk)_{n=0}^{n=N}$. Además, con respecto a la discretización espacial, se considera una familia de triangulaciones cuasiuniformes (ver Definición 1.4.1) $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ de Ω conformadas por símlices K (triángulos en 2D y tetraedros en 3D), tales que $\bar{\Omega} = \cup_{K \in \mathcal{T}_h} K$, donde $h = \max_{K \in \mathcal{T}_h} h_K$, con h_K siendo el diámetro de K . Escogemos el siguiente espacio de elementos finitos para ϕ : $\Phi_h \subset H^1(\Omega)$ generado por \mathbb{P}_r ($r \geq 1$). Entonces, se considera el siguiente esquema genérico de segundo orden en tiempo asociado al modelo de Allen-Cahn:

- **Inicialización:** Se considera $\phi^0 \in \Phi_h$ (aproximación apropiada de ϕ_0 cuando $h \rightarrow 0$).
- **Primer paso:** Dada ϕ^0 , encuentre ϕ^1 usando un esquema de un paso.
- **Paso $n + 1$ ($n \geq 1$):** Dado $[\phi^{n-1}, \phi^n] \in \Phi_h \times \Phi_h$, encontrar $\phi^{n+1} \in \Phi_h$ tal que

$$(\delta_t \phi^{n+1}, \bar{\phi}) + \gamma \left(\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \bar{\phi} \right) + \gamma \left(f \left(\phi^{n+\frac{1}{2}} \right), \bar{\phi} \right) = 0, \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h, \quad (19)$$

donde $\phi^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\phi^n + \phi^{n+1}}{2}$ y $\delta_t \phi^{n+1} = \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k}$.

Para conseguir esquemas de segundo orden en el tiempo, se usarán aproximaciones $f(\phi^{n+\frac{1}{2}}) \approx f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1})$ (dependiendo de $[\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}]$), tales que $f^k(\phi(t^{n+1}), \phi(t^n), \phi(t^{n-1}))$ sean conocidas aproximaciones de segundo orden de $f\left(\phi\left(t^{n+\frac{1}{2}}\right)\right)$, con $t^{n+\frac{1}{2}} := \frac{t^{n+1} + t^n}{2}$. En el caso de esquemas de un solo paso, $f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1})$ dependerá sólo de $[\phi^{n+1}, \phi^n]$. Adicionalmente, la escogencia de las aproximaciones $f^k(\phi(t^{n+1}), \phi(t^n), \phi(t^{n-1}))$ se realizará teniendo en cuenta que los esquemas numéricos verifiquen una ley de energía discreta análoga a la que se obtiene en el problema continuo (ver (8)). Para esto, observe que, tomando como función test $\bar{\phi} = \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1}$ en (19), se obtiene

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\delta_t \phi^{n+1}, \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} \right) + \gamma \left(\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} \right) + \gamma \left(f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}), \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} \right) \\ &= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \int_{\Omega} \nabla \left(\frac{\phi^{n+1} + \phi^n}{2} \right) \nabla \left(\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k} \right) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) \delta_t \phi^{n+1} d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (\nabla \phi^{n+1} + \nabla \phi^n) (\nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) \delta_t \phi^{n+1} d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Si sumamos y restamos el término $\delta_t \left(\int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) d\mathbf{x} \right)$, se tiene que

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (|\nabla \phi^{n+1}|^2 - |\nabla \phi^n|^2) d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Omega} f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) \cdot \delta_t \phi^{n+1} d\mathbf{x} + \delta_t \left(\int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) d\mathbf{x} \right) - \delta_t \left(\int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) d\mathbf{x} \right), \end{aligned}$$

de lo cual, usando la definición de la derivada discreta δ_t (ver (19)), agrupando términos y teniendo en cuenta la definición de la energía $E(\phi)$ dada en (3), se llega

a

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (|\nabla \phi^{n+1}|^2 - |\nabla \phi^n|^2) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) \cdot \delta_t \phi^{n+1} d\mathbf{x} \\
&\quad + \frac{1}{k} \left(\int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) d\mathbf{x} - \int_{\Omega} F(\phi^n) d\mathbf{x} \right) - \delta_t \left(\int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) d\mathbf{x} \right) \\
&= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{k} \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla \phi^{n+1}|^2 + F(\phi^{n+1}) \right) d\mathbf{x} - \frac{1}{k} \int_{\Omega} \left(F(\phi^n) + \frac{1}{2} |\nabla \phi^n|^2 \right) d\mathbf{x} \\
&\quad + \int_{\Omega} f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) \cdot \delta_t \phi^{n+1} d\mathbf{x} - \delta_t \left(\int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) d\mathbf{x} \right) \\
&= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{E(\phi^{n+1}) - E(\phi^n)}{k} + \int_{\Omega} f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) \cdot \delta_t \phi^{n+1} d\mathbf{x} \\
&\quad - \delta_t \left(\int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) d\mathbf{x} \right) \\
&= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \delta_t E(\phi^{n+1}) + \int_{\Omega} f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) \cdot \delta_t \phi^{n+1} d\mathbf{x} - \delta_t \left(\int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) d\mathbf{x} \right).
\end{aligned}$$

Por lo tanto, denotando por

$$ND = \int_{\Omega} f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) \cdot \delta_t \phi^{n+1} d\mathbf{x} - \delta_t \left(\int_{\Omega} F(\phi^{n+1}) d\mathbf{x} \right), \quad (20)$$

se tendrán en cuenta aproximaciones de $f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1})$ de segundo orden tales que $ND \geq 0$ (disipación numérica), y de esta manera los esquemas numéricos veriquen una ley de energía discreta del tipo

$$\delta_t E(\phi^{n+1}) + \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 \leq 0.$$

A continuación, se presenta la definición de esquema energéticamente estable.

Definición 3.1.1. *El esquema numérico (19) es energéticamente estable si cumple que*

$$\delta_t E(\phi^{n+1}) + \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 \leq 0, \quad \forall n \geq 1. \quad (21)$$

En particular, los esquemas energéticamente estables satisfacen la propiedad de energía decreciente en el tiempo:

$$E(\phi^{n+1}) \leq E(\phi^n), \quad \forall n \geq 1.$$

3.2. Esquema no lineal 1 (NL1)

Con el objetivo de obtener un primer esquema no lineal de segundo orden y energéticamente estable asociado a (9), se descompone $F(\phi)$ en una parte convexa $F_+(\phi)$ y otra cóncava $F_-(\phi)$ de la siguiente manera

$$F(\phi) = \frac{1}{4\varepsilon^2}(\phi^2 - 1)^2 = \frac{1}{4\varepsilon^2}\phi^4 - \frac{1}{2\varepsilon^2}\phi^2 + \frac{1}{4\varepsilon^2} := F_+(\phi) + F_-(\phi), \quad (22)$$

donde

$$F_+(\phi) = \frac{1}{4\varepsilon^2}(\phi^4 + 1) \quad \text{y} \quad F_-(\phi) = -\frac{1}{2\varepsilon^2}\phi^2. \quad (23)$$

Para aproximar $F'_-(\phi)$ se usará la siguiente fórmula explícita de diferencias de segundo orden de dos pasos:

$$f_-^k(\phi^n, \phi^{n-1}) = \frac{3}{2}F'_-(\phi^n) - \frac{1}{2}F'_-(\phi^{n-1}),$$

lo cual, teniendo en cuenta que $F'_-(\phi) = -\frac{1}{\varepsilon^2}\phi$, se llega a

$$f_-^k(\phi^n, \phi^{n-1}) = \frac{3}{2}\left(-\frac{1}{\varepsilon^2}\phi^n\right) - \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{\varepsilon^2}\phi^{n-1}\right) = -\frac{1}{2\varepsilon^2}(3\phi^n - \phi^{n-1}).$$

Por su parte, $F'_+(\phi)$ será aproximado usando la siguiente aproximación de punto medio:

$$\begin{aligned}
f_+^k(\phi^{n+1}, \phi^n) &= \frac{F_+(\phi^{n+1}) - F_+(\phi^n)}{\phi^{n+1} - \phi^n} \\
&= \frac{1}{4\varepsilon^2} \frac{(\phi^{n+1})^4 + 1 - (\phi^n)^4 - 1}{\phi^{n+1} - \phi^n} \\
&= \frac{1}{4\varepsilon^2} \left((\phi^{n+1})^3 + (\phi^{n+1})^2 \phi^n + (\phi^n)^2 \phi^{n+1} + (\phi^n)^3 \right).
\end{aligned} \tag{24}$$

Así, será considerada la siguiente aproximación del término de potencial:

$$\begin{aligned}
f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) &= f_+^k(\phi^{n+1}, \phi^n) + f_-^k(\phi^n, \phi^{n-1}) \\
&= \frac{1}{4\varepsilon^2} \left[(\phi^{n+1})^3 + (\phi^{n+1})^2 \phi^n + (\phi^n)^2 \phi^{n+1} + (\phi^n)^3 \right] - \frac{1}{2\varepsilon^2} (3\phi^n - \phi^{n-1}).
\end{aligned} \tag{25}$$

Teorema 3.2.1. (Estabilidad energética) *El esquema (19), usando la aproximación de potencial $f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1})$ dada en (25), es energéticamente estable incondicionalmente para una energía modificada. De hecho se satisface la siguiente ley de energía discreta:*

$$\delta_t \tilde{E}(\phi^{n+1}) + \widetilde{ND}(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) + \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 = 0, \tag{26}$$

donde

$$\tilde{E}(\phi^{n+1}) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla \phi^{n+1}|^2 + F(\phi^{n+1}) + \frac{k^2}{4\varepsilon^2} |\delta_t \phi^{n+1}|^2 \right) d\mathbf{x}$$

y

$$\widetilde{ND}(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) = \frac{k^3}{4\varepsilon^2} \|\delta_{tt} \phi^{n+1}\|_{L^2}^2,$$

con

$$\delta_{tt} \phi^{n+1} = \delta_t(\delta_t \phi^{n+1}) = \frac{\delta_t \phi^{n+1} - \delta_t \phi^n}{k}$$

y

$$\delta_t \tilde{E}(\phi^{n+1}) = \frac{\tilde{E}(\phi^{n+1}) - \tilde{E}(\phi^n)}{k}.$$

Demostración. Tomando como función test $\bar{\phi} = \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1}$ en (19), se tiene

$$\left(\delta_t \phi^{n+1}, \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} \right) + \gamma \left(\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} \right) + \gamma \left(f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}), \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} \right) = 0. \quad (27)$$

1. Del primer término se llega a

$$\left(\delta_t \phi^{n+1}, \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} \right) = \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2. \quad (28)$$

2. Del segundo término se tiene

$$\begin{aligned} \gamma \left(\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} \right) &= \int_{\Omega} \nabla \left(\frac{\phi^{n+1} + \phi^n}{2} \right) \cdot \nabla \left(\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k} \right) dx \\ &= \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (\nabla \phi^{n+1} + \nabla \phi^n) (\nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n) dx \\ &= \frac{1}{2k} \int_{\Omega} [(\nabla \phi^{n+1})^2 - (\nabla \phi^n)^2] dx = \delta_t \left(\int_{\Omega} \frac{1}{2} |\nabla \phi^{n+1}|^2 dx \right). \end{aligned} \quad (29)$$

3. Del tercer término se obtiene

$$\begin{aligned} \gamma \left(f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}), \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} \right) &= \gamma \int_{\Omega} f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1}) \cdot \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} dx \\ &= \int_{\Omega} (f_+^k(\phi^{n+1}, \phi^n) + f_-^k(\phi^n, \phi^{n-1})) \delta_t \phi^{n+1} dx. \end{aligned} \quad (30)$$

■ Por un lado,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} f_+^k(\phi^{n+1}, \phi^n) \cdot \delta_t \phi^{n+1} dx &= \int_{\Omega} \frac{F_+(\phi^{n+1}) - F_+(\phi^n)}{\phi^{n+1} - \phi^n} \cdot \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k} dx \\ &= \int_{\Omega} \frac{F_+(\phi^{n+1}) - F_+(\phi^n)}{k} dx \\ &= \delta_t \left(\int_{\Omega} F_+(\phi^{n+1}) dx \right). \end{aligned} \quad (31)$$

- Por otro lado,

$$\begin{aligned}
f_-^k(\phi^n, \phi^{n-1}) &= \frac{1}{2\varepsilon^2} (-3\phi^n + \phi^{n-1}) \\
&= \frac{1}{\varepsilon^2} \left(-\frac{\phi^n}{2} - \frac{\phi^n}{2} - \frac{\phi^n}{2} + \frac{\phi^{n-1}}{2} + \frac{\phi^{n+1}}{2} - \frac{\phi^{n+1}}{2} \right) \\
&= \frac{1}{\varepsilon^2} \left(\frac{-\phi^{n+1} - \phi^n}{2} + \frac{(\phi^{n+1} - \phi^n)}{2} - \frac{(\phi^n - \phi^{n-1})}{2} \right) \\
&= \frac{1}{\varepsilon^2} \left(-\frac{(\phi^{n+1} + \phi^n)}{2} + \frac{k(\phi^{n+1} - \phi^n)}{2k} - \frac{k(\phi^n - \phi^{n-1})}{2k} \right) \\
&= \frac{1}{\varepsilon^2} \left(-\phi^{n+\frac{1}{2}} + \frac{k}{2}\delta_t\phi^{n+1} - \frac{k}{2}\delta_t\phi^n \right) \\
&= \frac{1}{\varepsilon^2} \left(-\phi^{n+\frac{1}{2}} + \frac{k^2}{2} \left(\frac{\delta_t\phi^{n+1} - \delta_t\phi^n}{k} \right) \right) \\
&= \frac{1}{\varepsilon^2} \left(-\phi^{n+\frac{1}{2}} + \frac{k^2}{2} \delta_{tt}\phi^{n+1} \right).
\end{aligned}$$

Así,

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} f_-^k(\phi^n, \phi^{n-1}) \delta_t\phi^{n+1} d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \frac{1}{\varepsilon^2} \left(-\phi^{n+\frac{1}{2}} + \frac{k^2}{2} \delta_{tt}\phi^{n+1} \right) \cdot \delta_t\phi^{n+1} d\mathbf{x} \\
&= -\frac{1}{\varepsilon^2} \int_{\Omega} \phi^{n+\frac{1}{2}} \cdot \delta_t\phi^{n+1} d\mathbf{x} + \frac{k^2}{2\varepsilon^2} \int_{\Omega} \delta_{tt}\phi^{n+1} \cdot \delta_t\phi^{n+1} d\mathbf{x} \quad (32)
\end{aligned}$$

Note que

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\varepsilon^2} \int_{\Omega} -\phi^{n+\frac{1}{2}} \delta_t \phi^{n+1} d\mathbf{x} &= \frac{1}{\varepsilon^2} \int_{\Omega} \frac{-(\phi^{n+1} + \phi^n)}{2} \cdot \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k} d\mathbf{x} \\
&= \frac{1}{2\varepsilon^2} \int_{\Omega} -\frac{((\phi^{n+1})^2 - (\phi^n)^2)}{k} d\mathbf{x} \\
&= -\frac{1}{2\varepsilon^2} \cdot \frac{1}{k} \left(\int_{\Omega} (\phi^{n+1})^2 d\mathbf{x} - \int_{\Omega} (\phi^n)^2 d\mathbf{x} \right) \\
&= -\frac{1}{2\varepsilon^2} \delta_t \left(\int_{\Omega} (\phi^{n+1})^2 d\mathbf{x} \right) \\
&= \delta_t \left(\int_{\Omega} -\frac{(\phi^{n+1})^2}{2\varepsilon^2} d\mathbf{x} \right) = \delta_t \left(\int_{\Omega} F_-(\phi^{n+1}) d\mathbf{x} \right).
\end{aligned} \tag{33}$$

Así mismo,

$$\begin{aligned}
\frac{k^2}{2\varepsilon^2} \int_{\Omega} \delta_{tt} \phi^{n+1} \delta_t \phi^{n+1} d\mathbf{x} &= \frac{k^2}{2\varepsilon^2} \int_{\Omega} \left(\frac{\delta_t \phi^{n+1} - \delta_t \phi^n}{k} \right) (\delta_t \phi^{n+1}) d\mathbf{x} \\
&= \frac{k^2}{2\varepsilon^2} \int_{\Omega} \frac{(\delta_t \phi^{n+1})^2 - \delta_t \phi^n \delta_t \phi^{n+1}}{k} d\mathbf{x} \\
&= \frac{k^2}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} \frac{2(\delta_t \phi^{n+1})^2 - 2\delta_t \phi^n \delta_t \phi^{n+1}}{k} d\mathbf{x} \\
&= \frac{k^2}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} \frac{2(\delta_t \phi^{n+1})^2 - 2\delta_t \phi^n \delta_t \phi^{n+1} + (\delta_t \phi^n)^2 - (\delta_t \phi^n)^2}{k} d\mathbf{x} \\
&= \frac{k^2}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} \frac{(\delta_t \phi^{n+1})^2 - 2\delta_t \phi^n \delta_t \phi^{n+1} + (\delta_t \phi^n)^2}{k} d\mathbf{x} \\
&\quad + \frac{k^2}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} \frac{((\delta_t \phi^{n+1})^2 - (\delta_t \phi^n)^2)}{k} d\mathbf{x} \\
&= \frac{k^2}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} \frac{(\delta_t \phi^{n+1} - \delta_t \phi^n)^2}{k} d\mathbf{x} + \frac{k^2}{4\varepsilon^2} \delta_t \left(\int_{\Omega} (\delta_t \phi^{n+1})^2 d\mathbf{x} \right) \\
&= \frac{k^3}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} \left(\frac{\delta_t \phi^{n+1} - \delta_t \phi^n}{k} \right)^2 d\mathbf{x} + \frac{k^2}{4\varepsilon^2} \delta_t \left(\int_{\Omega} (\delta_t \phi^{n+1})^2 d\mathbf{x} \right).
\end{aligned} \tag{34}$$

Por lo tanto, de (27)-(34), se deduce

$$\delta_t \left[\int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla \phi^{n+1}|^2 + F(\phi^{n+1}) + \frac{k^2}{4\varepsilon^2} (\delta_t \phi^{n+1})^2 \right) d\mathbf{x} \right] + \frac{k^3}{4\varepsilon^2} \|\delta_{tt} \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 = 0,$$

lo cual prueba (26). \square

Observación 3.2.2. Note que $\tilde{E}(\phi^{n+1}) = E(\phi^{n+1}) + E_{pert}(\phi^{n+1})$, donde

$$E_{pert}(\phi^{n+1}) = \frac{k^2}{4\varepsilon^2} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2$$

es una perturbación de la energía exacta $E(\phi^{n+1})$.

Teorema 3.2.3. (Existencia de solución incondicional) Existe, por lo menos, una solución $\phi^{n+1} \in \Phi_h$ del esquema (19) con la aproximación (25).

Demostración. Para esta prueba, se utilizará el teorema del punto fijo de Leray-Schauder (ver Teorema 1.3.6). Para esto, considere el operador $R : \Phi_h \rightarrow \Phi_h$ dado por $R(\tilde{\phi}) = \phi$, donde ϕ resuelve el siguiente esquema lineal

$$\begin{aligned} \frac{1}{k}(\phi, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2}(\nabla \phi, \nabla \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\tilde{\phi})^2 \phi, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^2 \phi, \bar{\phi}) &= \frac{1}{k}(\phi^n, \bar{\phi}) - \frac{\gamma}{2}(\nabla \phi^n, \nabla \bar{\phi}) \\ - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\tilde{\phi})^2 \phi^n, \bar{\phi}) - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^3, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2\varepsilon^2}(3\phi^n - \phi^{n-1}, \bar{\phi}), &\quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h. \end{aligned} \quad (35)$$

A continuación, se verificará que se cumplen las hipótesis del Teorema de punto fijo de Leray-Schauder.

1. R está bien definida. Para esto, considere los operadores $a : \Phi_h \times \Phi_h \rightarrow \mathbb{R}$ (bilineal) y $l : \Phi_h \rightarrow \mathbb{R}$ (lineal) dados por

$$a(\phi, \bar{\phi}) = \frac{1}{k}(\phi, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2}(\nabla \phi, \nabla \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\tilde{\phi})^2 \phi, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^2 \phi, \bar{\phi}) \quad (36)$$

y

$$l(\bar{\phi}) = \frac{1}{k}(\phi^n, \bar{\phi}) - \frac{\gamma}{2}(\nabla\phi^n, \nabla\bar{\phi}) - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\tilde{\phi})^2\phi^n, \bar{\phi}) - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^3, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2\varepsilon^2}(3\phi^n - \phi^{n-1}, \bar{\phi}). \quad (37)$$

Entonces, dados $[\phi^{n-1}, \phi^n]$, el problema (35) se puede reescribir de la siguiente manera: Encontrar $\phi \in \Phi_h$ tal que

$$a(\phi, \bar{\phi}) = l(\bar{\phi}), \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h. \quad (38)$$

Ahora, se verificarán las hipótesis del Teorema de Lax-Milgram (ver Teorema 1.3.5). En primer lugar, es claro que la aplicación a (definida en (36)) es bilineal; así, basta ver que es continua y coerciva:

- a es continua:

$$\begin{aligned} |a(\phi, \bar{\phi})| &\leq \frac{1}{k} \int_{\Omega} |\phi| |\bar{\phi}| d\mathbf{x} + \frac{\gamma}{2} \int_{\Omega} |\nabla\phi| |\nabla\bar{\phi}| d\mathbf{x} + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} |\tilde{\phi}|^2 |\phi| |\bar{\phi}| d\mathbf{x} \\ &\quad + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} |\phi^n|^2 |\phi| |\bar{\phi}| d\mathbf{x} \\ &\leq \frac{1}{k} \|\phi\|_{L^2} \|\bar{\phi}\|_{L^2} + \frac{\gamma}{2} \|\nabla\phi\|_{L^2} \|\nabla\bar{\phi}\|_{L^2} + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\tilde{\phi}\|_{L^4}^2 \|\phi\|_{L^4} \|\bar{\phi}\|_{L^4} \\ &\quad + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi^n\|_{L^4}^2 \|\phi\|_{L^4} \|\bar{\phi}\|_{L^4} \\ &\leq \mathbf{C} \|\phi\|_{H^1} \|\bar{\phi}\|_{H^1}, \end{aligned} \quad (39)$$

donde, en la última estimación, se ha usado la inmersión continua $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^4(\Omega)$.

- a es coerciva:

$$\begin{aligned}
a(\phi, \phi) &= \frac{1}{k}(\phi, \phi) + \frac{\gamma}{2}(\nabla\phi, \nabla\phi) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\tilde{\phi})^2\phi, \phi) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^2\phi, \phi) \\
&= \frac{1}{k}\|\phi\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2}\|\nabla\phi\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}\|\tilde{\phi}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}\|\phi^n\phi\|_{L^2}^2 \\
&\geq \mathbf{C}\|\phi\|_{H^1}^2.
\end{aligned} \tag{40}$$

Por otra parte, $l \in (\Phi_h)'$. En efecto, l es lineal y continuo. La linealidad de l es clara y la continuidad se sigue de la siguiente estimación

$$\begin{aligned}
|l(\bar{\phi})| &\leq \frac{1}{k} \int_{\Omega} |\phi^n| |\bar{\phi}| d\mathbf{x} + \frac{\gamma}{2} \int_{\Omega} |\nabla\phi^n| |\nabla\bar{\phi}| d\mathbf{x} + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} |\tilde{\phi}|^2 |\phi^n| |\bar{\phi}| d\mathbf{x} \\
&\quad + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} |\phi^n|^3 |\bar{\phi}| d\mathbf{x} + \frac{\gamma}{2\varepsilon^2} \int_{\Omega} 3|\phi^n| |\bar{\phi}| d\mathbf{x} + \frac{\gamma}{2\varepsilon^2} \int_{\Omega} |\phi^{n-1}| |\bar{\phi}| d\mathbf{x} \\
&\leq \frac{1}{k} \|\phi^n\|_{L^2} \|\bar{\phi}\|_{L^2} + \frac{\gamma}{2} \|\nabla\phi^n\|_{L^2} \|\nabla\bar{\phi}\|_{L^2} + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\tilde{\phi}\|_{L^4}^2 \|\phi^n\|_{L^4} \|\bar{\phi}\|_{L^4} \\
&\quad + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi^n\|_{L^4}^3 \|\bar{\phi}\|_{L^4} + \frac{3\gamma}{2\varepsilon^2} \|\phi^n\|_{L^2} \|\bar{\phi}\|_{L^2} + \frac{\gamma}{2\varepsilon^2} \|\phi^{n-1}\|_{L^2} \|\bar{\phi}\|_{L^2} \\
&\leq \mathbf{C}\|\bar{\phi}\|_{H^1}.
\end{aligned} \tag{41}$$

Por lo tanto, usando el Teorema de Lax-Milgram se concluye que existe un único $\phi \in \Phi_h$ que resuelve (35).

2. Ahora se demostrará que todos los posibles puntos fijos de αR (con $\alpha \in (0, 1]$) están acotados. En efecto, si ϕ es un punto fijo de αR , entonces $R(\phi) = \frac{1}{\alpha}\phi$; por lo tanto, ϕ satisface

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\alpha k}(\phi, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2\alpha}(\nabla\phi, \nabla\bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\alpha\varepsilon^2}(\phi^3, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\alpha\varepsilon^2}((\phi^n)^2\phi, \bar{\phi}) &= \frac{1}{k}(\phi^n, \bar{\phi}) \\
- \frac{\gamma}{2}(\nabla\phi^n, \nabla\bar{\phi}) - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}(\phi^2\phi^n, \bar{\phi}) - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^3, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2\varepsilon^2}(3\phi^n - \phi^{n-1}, \bar{\phi}), &\quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h,
\end{aligned} \tag{42}$$

de lo cual, tomando como función test $\bar{\phi} = \phi \in \Phi_h$ y multiplicando por α , se

obtiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{k} \|\phi\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi\|_{L^4}^4 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi^n \phi\|_{L^2}^2 &= \frac{\alpha}{k} \int_{\Omega} \phi^n \phi \, d\mathbf{x} - \frac{\gamma\alpha}{2} \int_{\Omega} \nabla \phi^n \nabla \phi \, d\mathbf{x} \\ &- \frac{\gamma\alpha}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} \phi^3 \phi^n \, d\mathbf{x} - \frac{\gamma\alpha}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} (\phi^n)^3 \phi \, d\mathbf{x} + \frac{\gamma\alpha}{2\varepsilon^2} \int_{\Omega} (3\phi^n - \phi^{n-1}) \phi \, d\mathbf{x} := I. \end{aligned} \quad (43)$$

Usando las desigualdades de Hölder y Young y teniendo en cuenta que $\alpha \in (0, 1]$, se deduce que

$$\begin{aligned} |I| &\leq \frac{1}{k} \|\phi^n\|_{L^2} \|\phi\|_{L^2} + \frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi^n\|_{L^2} \|\nabla \phi\|_{L^2} + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi\|_{L^4}^2 \|\phi^n \phi\|_{L^2} + \mathbf{C} \|\phi^n\|_{L^6}^3 \|\phi\|_{L^2} \\ &\quad + \mathbf{C} \|\phi^n\|_{L^2} \|\phi\|_{L^2} + \mathbf{C} \|\phi^{n-1}\|_{L^2} \|\phi\|_{L^2} \\ &\leq \frac{1}{8k} \|\phi\|_{L^2}^2 + \frac{\mathbf{C}}{k} \|\phi^n\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4} \|\nabla \phi\|_{L^2}^2 + \mathbf{C}\gamma \|\nabla \phi^n\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{8\varepsilon^2} \|\phi\|_{L^4}^4 + \frac{\gamma}{8\varepsilon^2} \|\phi^n \phi\|_{L^2}^2 \\ &\quad + \frac{1}{8k} \|\phi\|_{L^2}^2 + k\mathbf{C} \|\phi^n\|_{L^6}^6 + \frac{1}{8k} \|\phi\|_{L^2}^2 + k\mathbf{C} \|\phi^n\|_{L^2}^2 + \frac{1}{8k} \|\phi\|_{L^2}^2 + \mathbf{C}k \|\phi^{n-1}\|_{L^2}^2. \end{aligned} \quad (44)$$

Por lo tanto, de (43)-(44), se llega a

$$\frac{1}{2k} \|\phi\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4} \|\nabla \phi\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{8\varepsilon^2} \|\phi\|_{L^4}^4 \leq \mathbf{C}(k, \|\phi^n\|_{H^1}, \|\phi^{n-1}\|_{L^2}). \quad (45)$$

Así, $\|\phi\|_{H^1} \leq \mathbf{C}$, donde $\mathbf{C} > 0$ depende de $[k, \|\phi^n\|_{H^1}, \|\phi^{n-1}\|_{L^2}]$, pero es independiente de α ; lo cual demuestra que todos los posible puntos fijos de αR están acotados.

3. R es continuo. Sea $\{\tilde{\phi}^l\}_{l \in \mathbb{N}} \subset \Phi_h \hookrightarrow W^{1,\infty}(\Omega)$ una sucesión tal que

$$\tilde{\phi}^l \rightarrow \tilde{\phi} \text{ en } \Phi_h, \quad \text{cuando } l \rightarrow +\infty. \quad (46)$$

En particular, al estar en dimensión finita, $\{\tilde{\phi}^l\}_{l \in \mathbb{N}}$ es acotada en $W^{1,\infty}(\Omega)$. Denotando por $\{R(\tilde{\phi}^l)\}_{l \in \mathbb{N}} = \{\phi^l\}_{l \in \mathbb{N}}$ y $R(\tilde{\phi}) = \phi$, hay que probar que $\phi^l \rightarrow \phi$. En efecto, note que ϕ^l verifica, para todo $\bar{\phi} \in \Phi_h$,

$$\begin{aligned} \frac{1}{k}(\phi^l, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2}(\nabla \phi^l, \nabla \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\tilde{\phi}^l)^2 \phi^l, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^2 \phi^l, \bar{\phi}) &= \frac{1}{k}(\phi^n, \bar{\phi}) \\ - \frac{\gamma}{2}(\nabla \phi^n, \nabla \bar{\phi}) - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\tilde{\phi}^l)^2 \phi^n, \bar{\phi}) - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^3, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2\varepsilon^2}(3\phi^n - \phi^{n-1}, \bar{\phi}). \end{aligned} \quad (47)$$

Entonces, tomando como función test $\bar{\phi} = \phi^l$ y procediendo análogamente como (42)-(45), se tiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{2k} \|\phi^l\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4} \|\nabla \phi^l\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\tilde{\phi}^l \phi^l\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi^n \phi^l\|_{L^2}^2 \\ \leq \frac{\mathbf{C}}{k} \|\phi^n\|_{L^2}^2 + \mathbf{C}\gamma \|\nabla \phi^n\|_{L^2}^2 + \mathbf{C}k \|\tilde{\phi}^l\|_{L^6}^4 \|\phi^n\|_{L^6}^2 + \mathbf{C}k \|\phi^n\|_{L^6}^6 \\ + \mathbf{C}k \|\phi^n\|_{L^2}^2 + \mathbf{C}k \|\phi^{n-1}\|_{L^2}^2 \\ \leq \mathbf{C}, \end{aligned} \quad (48)$$

donde \mathbf{C} es una constante que depende de $[k, \|\phi^n\|_{H^1}, \|\tilde{\phi}^l\|_{L^6}, \|\phi^{n-1}\|_{L^2}]$ y es independiente de l . Así, $\{\phi^l = R(\tilde{\phi}^l)\}_{l \in \mathbb{N}}$ es limitada en $\Phi_h \hookrightarrow W^{1,\infty}(\Omega)$, y se concluye que existe una subsucesión de $\{R(\tilde{\phi}^l)\}_{l \in \mathbb{N}}$, denotada igualmente por $\{R(\tilde{\phi}^l)\}_{l \in \mathbb{N}}$, y un elemento $\phi' \in \Phi_h$, tal que

$$R(\tilde{\phi}^l) \rightarrow \phi' \text{ en } W^{1,\infty}(\Omega), \quad \text{cuando } l \rightarrow +\infty. \quad (49)$$

Por lo tanto, usando (46) y (49), es posible pasar el límite en (47) cuando $l \rightarrow +\infty$. A manera de ejemplo, se mostrará el paso al límite en el término más delicado de (47):

$$\begin{aligned}
\left| \int_{\Omega} (\tilde{\phi}^l)^2 \phi^l \bar{\phi} d\mathbf{x} - \int_{\Omega} (\tilde{\phi})^2 \phi' \bar{\phi} d\mathbf{x} \right| &\leq \int_{\Omega} |(\tilde{\phi}^l)^2 \phi^l \bar{\phi} - (\tilde{\phi})^2 \phi' \bar{\phi}| d\mathbf{x} \\
&\leq \int_{\Omega} [(\tilde{\phi}^l)^2 - (\tilde{\phi})^2] \phi^l \bar{\phi} + (\tilde{\phi})^2 (\phi^l - \phi') \bar{\phi} d\mathbf{x} \\
&\leq \|\tilde{\phi}^l - \tilde{\phi}\|_{L^2} \|\tilde{\phi}^l + \tilde{\phi}\|_{L^6} \|\phi^l\|_{L^6} \|\bar{\phi}\|_{L^6} \\
&\quad + \|\phi^l - \phi'\|_{L^2} \|\tilde{\phi}\|_{L^6}^2 \|\bar{\phi}\|_{L^6} \rightarrow 0 \quad \text{cuando } l \rightarrow \infty.
\end{aligned} \tag{50}$$

Procediendo análogamente como en (50) para cada uno de los términos en (47), se deduce que $R(\tilde{\phi}) = \phi'$. Así, cualquier subsucesión convergente de $R(\tilde{\phi}^l)$ converge a $\phi' = R(\tilde{\phi})$, y por la unicidad de $R(\tilde{\phi})$ se concluye que toda la sucesión $R(\tilde{\phi}^l) \rightarrow R(\tilde{\phi})$; entonces, R es continua.

Por lo tanto, se satisfacen todas las hipótesis del teorema de punto fijo de Leray-Schauder (en dimensión finita), y se concluye que R tiene un punto fijo ϕ (esto es, $R(\phi) = \phi$) el cual es solución del esquema (19) con la aproximación (25). \square

Teorema 3.2.4. (Unicidad de solución incondicional) *La solución del esquema (NL1) es única.*

Demostración. Sean $\phi_1^{n+1}, \phi_2^{n+1} \in \Phi_h$ soluciones del esquema (19) con la aproximación (25) correspondientes al dato $[\phi^n, \phi^{n-1}] \in \Phi_h \times \Phi_h$. Entonces, $\phi^{n+1} = \phi_1^{n+1} - \phi_2^{n+1} \in \Phi_h$ verifica

$$\begin{aligned}
\frac{1}{k}(\phi^{n+1}, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2}(\nabla \phi^{n+1}, \nabla \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi_1^{n+1})^3 - (\phi_2^{n+1})^3, \bar{\phi}) \\
+ \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}(((\phi_1^{n+1})^2 - (\phi_2^{n+1})^2)\phi^n, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^2 \phi^{n+1}, \bar{\phi}) = 0, \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h. \tag{51}
\end{aligned}$$

Así, tomando la función test $\bar{\phi} = \phi^{n+1} \in \Phi_h$, se tiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{k} \|\phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi^n \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 &= -\frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} (\phi^{n+1})^2 \phi^n (\phi_1^{n+1} + \phi_2^{n+1}) d\mathbf{x} \\ &\quad - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} (\phi^{n+1})^2 ((\phi_1^{n+1})^2 + (\phi_1^{n+1})(\phi_2^{n+1}) + (\phi_2^{n+1})^2) d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (52)$$

y por lo tanto,

$$\begin{aligned} \frac{1}{k} \|\phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi^n \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi^{n+1} \phi_1^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi^{n+1} \phi_2^{n+1}\|_{L^2}^2 &= \\ - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} (\phi^{n+1})^2 \phi_1^{n+1} \phi_2^{n+1} d\mathbf{x} - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} (\phi^{n+1})^2 \phi^n (\phi_1^{n+1} + \phi_2^{n+1}) d\mathbf{x} &:= J_1 + J_2. \end{aligned} \quad (53)$$

Usando las desigualdades de Hölder y Young, se controlan los términos J_1 y J_2 de la siguiente manera:

$$|J_1| \leq \frac{\gamma}{8\varepsilon^2} \|\phi^{n+1} \phi_1^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{8\varepsilon^2} \|\phi^{n+1} \phi_2^{n+1}\|_{L^2}^2 \quad (54)$$

y

$$|J_2| \leq \frac{\gamma}{8\varepsilon^2} \|\phi^{n+1} \phi^n\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{8\varepsilon^2} \|\phi^{n+1} \phi_1^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{8\varepsilon^2} \|\phi^{n+1} \phi^n\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{8\varepsilon^2} \|\phi^{n+1} \phi_2^{n+1}\|_{L^2}^2. \quad (55)$$

Así, de (53)-(55) se llega a

$$\frac{1}{k} \|\phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 \leq 0,$$

lo cual implica que $\phi^{n+1} = 0$ y $\phi_1^{n+1} = \phi_2^{n+1}$. □

3.3. Esquema no lineal 2 (NL2)

Con el propósito de obtener un segundo esquema numérico asociado al modelo (9), se hará una aproximación de punto medio para el término de potencial en (19), de

la siguiente manera:

$$f^k(\phi^{n+1}, \phi^n) = \frac{F(\phi^{n+1}) - F(\phi^n)}{\phi^{n+1} - \phi^n}. \quad (56)$$

Esta aproximación ha sido ampliamente estudiada y usada para diseñar esquemas numéricos de segundo orden de un solo paso, que sean incondicionalmente estables en energía y que preserven una ley de energía discreta (ver ^{14, 15, 16}). Entonces, usando (22) en (56), se obtiene que

$$\begin{aligned} f^k(\phi^{n+1}, \phi^n) &= \frac{F_+(\phi^{n+1}) - F_+(\phi^n)}{\phi^{n+1} - \phi^n} + \frac{F_-(\phi^{n+1}) - F_-(\phi^n)}{\phi^{n+1} - \phi^n} \\ &:= f_+^k(\phi^{n+1}, \phi^n) + f_-^k(\phi^{n+1}, \phi^n). \end{aligned}$$

Note que $f_+^k(\phi^{n+1}, \phi^n)$ es la misma aproximación deducida en (24); mientras que $f_-^k(\phi^{n+1}, \phi^n)$ está dada ahora por

$$\begin{aligned} f_-^k(\phi^{n+1}, \phi^n) &= \frac{F_-(\phi^{n+1}) - F_-(\phi^n)}{\phi^{n+1} - \phi^n} = \frac{-\frac{1}{2\varepsilon^2}(\phi^{n+1})^2 + \frac{1}{2\varepsilon^2}(\phi^n)^2}{\phi^{n+1} - \phi^n} \\ &= -\frac{1}{2\varepsilon^2} \frac{(\phi^{n+1} - \phi^n)(\phi^{n+1} + \phi^n)}{\phi^{n+1} - \phi^n} = -\frac{1}{2\varepsilon^2}(\phi^{n+1} + \phi^n) = -\frac{1}{\varepsilon^2}\phi^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Por lo tanto, la aproximación del potencial es

$$f^k(\phi^{n+1}, \phi^n) = \frac{1}{4\varepsilon^2} \left[(\phi^{n+1})^3 + (\phi^{n+1})^2 \phi^n + (\phi^n)^2 \phi^{n+1} + (\phi^n)^3 \right] - \frac{1}{\varepsilon^2} \phi^{n+\frac{1}{2}}. \quad (57)$$

-
- ¹⁴ R. Nicolaides Q. Du. "Numerical analysis of a continuum model of phase transition". En: *SIAM J. Numer. Anal.* 28.5 (1991), págs. 1310-1322.
- ¹⁵ F. Milner C. Elliott D. French. "A second order splitting method for the Cahn-Hilliard equation". En: *Numer. Math* 54.5 (1989), págs. 575-590.
- ¹⁶ H Zhang P. Lin C. Liu. "An energy law preserving C^0 finite element scheme for simulating the kinematic effects in liquid crystal dynamics". En: *J. Comput. Phys.* 227.2 (2007), págs. 1411-1427.

Teorema 3.3.1. (Estabilidad energética) *El esquema (19), con la aproximación del potencial dada en (57), es energéticamente estable incondicionalmente. En particular, se cumple la siguiente ley de energía discreta*

$$\delta_t E(\phi^{n+1}) + \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 = 0. \quad (58)$$

Demostración. Usando $\bar{\phi} = \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1}$ en (19), se tiene que

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\delta_t \phi^{n+1}, \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} \right) + \gamma \left(\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} \right) + \gamma \left(f^k(\phi^{n+1}, \phi^n), \frac{1}{\gamma} \delta_t \phi^{n+1} \right) \\ &= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} \nabla(\phi^{n+1} + \phi^n) \cdot \nabla(\phi^{n+1} - \phi^n) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} f^k(\phi^{n+1} - \phi^n) \cdot \delta_t \phi^{n+1} d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Usando la aproximación dada en (56), se deduce que

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} \nabla(\phi^{n+1} + \phi^n) \nabla(\phi^{n+1} - \phi^n) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{F(\phi^{n+1}) - F(\phi^n)}{\phi^{n+1} - \phi^n} \delta_t \phi^{n+1} d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (\nabla \phi^{n+1} + \nabla \phi^n) \cdot (\nabla \phi^{n+1} - \nabla \phi^n) d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Omega} \left(\frac{F(\phi^{n+1}) - F(\phi^n)}{\phi^{n+1} - \phi^n} \right) \left(\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{k} \right) d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2k} \int_{\Omega} (|\nabla \phi^{n+1}|^2 - |\nabla \phi^n|^2) d\mathbf{x} + \frac{1}{k} \int_{\Omega} (F(\phi^{n+1}) - F(\phi^n)) d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Agrupando términos, se obtiene lo siguiente

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{k} \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla \phi^{n+1}|^2 + F(\phi^{n+1}) \right) d\mathbf{x} - \frac{1}{k} \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla \phi^n|^2 + F(\phi^n) \right) d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{k} (E(\phi^{n+1}) - E(\phi^n)), \end{aligned}$$

de lo cual se concluye la ley de energía discreta (58). □

Teorema 3.3.2. (Existencia y unicidad de solución condicional) *Bajo la condición $k < \frac{2\varepsilon^2(1-\delta)}{\gamma}$ (siendo δ un parámetro suficientemente pequeño), existe una solu-*

ción única $\phi^{n+1} \in \Phi_h$ para el esquema (19) con la aproximación del potencial dada en (57).

Observación 3.3.3. En⁹ se demostró un resultado análogo a este bajo la condición $k < \frac{2\varepsilon^2}{\gamma}$. Así, la condición del Teorema 3.3.2 es ligeramente más restrictiva que la propuesta en⁹, dado que $\delta > 0$ es un número arbitrariamente pequeño.

Demostración. En primer lugar, se probará la existencia de solución del esquema **(NL2)**, para lo cual se usará de nuevo el teorema de punto fijo de Leray-Schauder. Con este propósito, se considere el operador $R : \Phi_h \rightarrow \Phi_h$ dado por $R(\tilde{\phi}) = \phi$, donde ϕ resuelve el siguiente esquema lineal

$$\begin{aligned} \frac{1}{k}(\phi, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2}(\nabla\phi, \nabla\bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\tilde{\phi})^2\phi, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^2\phi, \bar{\phi}) &= \frac{1}{k}(\phi^n, \bar{\phi}) - \frac{\gamma}{2}(\nabla\phi^n, \nabla\bar{\phi}) \\ - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\tilde{\phi})^2\phi^n, \bar{\phi}) - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^3, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2\varepsilon^2}(\tilde{\phi} + \phi^n, \bar{\phi}), \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h. \end{aligned} \tag{59}$$

A continuación, se verificará que se cumplen las hipótesis del Teorema de punto fijo de Leray-Schauder.

1. R está bien definida. Para esto, considere el mismo operador $a : \Phi_h \times \Phi_h \rightarrow \mathbb{R}$ (bilineal) definido en (36) y el operador $l : \Phi_h \rightarrow \mathbb{R}$ (lineal) dado por

$$l(\bar{\phi}) = \frac{1}{k}(\phi^n, \bar{\phi}) - \frac{\gamma}{2}(\nabla\phi^n, \nabla\bar{\phi}) - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\tilde{\phi})^2\phi^n, \bar{\phi}) - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^3, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2\varepsilon^2}(\tilde{\phi} + \phi^n, \bar{\phi}).$$

Así, dado $\phi^n \in \Phi_h$, el problema (59) se puede reescribir de la siguiente manera:

Encontrar $\phi \in \Phi_h$ tal que

$$a(\phi, \bar{\phi}) = l(\bar{\phi}), \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h.$$

Entonces, procediendo como en (39)-(41), se verifican las hipótesis del Teorema de Lax-Milgram (ver Teorema 1.3.5), y se concluye que existe un único $\phi \in \Phi_h$ que resuelve (59).

2. Ahora se demostrará que todos los posibles puntos fijos de αR (con $\alpha \in (0, 1]$) están acotados. En efecto, si ϕ es un punto fijo de αR , procediendo como en (42)-(43) se llega a

$$\begin{aligned} \frac{1}{k} \|\phi\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi\|_{L^4}^4 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi^n \phi\|_{L^2}^2 &= \frac{\alpha}{k} \int_{\Omega} \phi^n \phi \, d\mathbf{x} - \frac{\gamma\alpha}{2} \int_{\Omega} \nabla \phi^n \nabla \phi \, d\mathbf{x} \\ &- \frac{\gamma\alpha}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} \phi^3 \phi^n \, d\mathbf{x} - \frac{\gamma\alpha}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} (\phi^n)^3 \phi \, d\mathbf{x} + \frac{\gamma\alpha}{2\varepsilon^2} \int_{\Omega} (\phi + \phi^{n-1}) \phi \, d\mathbf{x} := I. \end{aligned} \quad (60)$$

Usando las desigualdades de Hölder y Young y teniendo en cuenta que $\alpha \in (0, 1]$, se deduce que

$$\begin{aligned} |I| &\leq \frac{1}{k} \|\phi^n\|_{L^2} \|\phi\|_{L^2} + \frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi^n\|_{L^2} \|\nabla \phi\|_{L^2} + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi\|_{L^4}^2 \|\phi^n \phi\|_{L^2} + \mathbf{C} \|\phi^n\|_{L^6}^3 \|\phi\|_{L^2} \\ &\quad + \mathbf{C} \|\phi^{n-1}\|_{L^2} \|\phi\|_{L^2} + \frac{\gamma}{2\varepsilon^2} \|\phi\|_{L^2}^2 \\ &\leq \frac{\delta}{3k} \|\phi\|_{L^2}^2 + \frac{\mathbf{C}\delta}{k} \|\phi^n\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4} \|\nabla \phi\|_{L^2}^2 + \mathbf{C}\gamma \|\nabla \phi^n\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{8\varepsilon^2} \|\phi\|_{L^4}^4 + \frac{\gamma}{8\varepsilon^2} \|\phi^n \phi\|_{L^2}^2 \\ &\quad + \frac{\delta}{3k} \|\phi\|_{L^2}^2 + k\mathbf{C}\delta \|\phi^n\|_{L^6}^6 + \frac{\delta}{3k} \|\phi\|_{L^2}^2 + \mathbf{C}\delta k \|\phi^{n-1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2\varepsilon^2} \|\phi\|_{L^2}^2. \end{aligned} \quad (61)$$

Por lo tanto, de (60)-(61), tomando δ suficientemente pequeño, se llega a

$$\left(\frac{1-\delta}{k} - \frac{\gamma}{2\varepsilon^2} \right) \|\phi\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4} \|\nabla \phi\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{8\varepsilon^2} \|\phi\|_{L^4}^4 \leq \mathbf{C}(k, \|\phi^n\|_{H^1}, \|\phi^{n-1}\|_{L^2}). \quad (62)$$

Así, si $k < \frac{2\varepsilon^2(1-\delta)}{\gamma}$, se concluye que $\|\phi\|_{H^1} \leq \mathbf{C}$, donde $\mathbf{C} > 0$ es independiente de α ; lo cual demuestra que todos los posibles puntos fijos de αR están acotados.

3. R es continuo. La prueba sigue las mismas líneas del inciso 3 de la prueba del Teorema 3.2.3.

Por lo tanto, se satisfacen todas las hipótesis del teorema de punto fijo de Leray-

Schauder (en dimensión finita), y se concluye que R tiene un punto fijo ϕ (esto es, $R(\phi) = \phi$) el cual es solución del esquema (19) con la aproximación (57).

En segundo lugar, para probar la unicidad de la solución, considere $\phi_1^{n+1}, \phi_2^{n+1} \in \Phi_h$ soluciones del esquema (19) con la aproximación (57), correspondientes al dato $\phi^n \in \Phi_h$. Entonces, $\phi^{n+1} = \phi_1^{n+1} - \phi_2^{n+1} \in \Phi_h$ verifica, para todo $\bar{\phi} \in \Phi_h$,

$$\begin{aligned} \frac{1}{k}(\phi^{n+1}, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2}(\nabla \phi^{n+1}, \nabla \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi_1^{n+1})^3 - (\phi_2^{n+1})^3, \bar{\phi}) \\ + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}(((\phi_1^{n+1})^2 - (\phi_2^{n+1})^2)\phi^n, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2}((\phi^n)^2 \phi^{n+1}, \bar{\phi}) - \frac{\gamma}{2\varepsilon^2}(\phi^{n+1}, \bar{\phi}) = 0. \end{aligned}$$

Así, tomando la función test $\bar{\phi} = \phi^{n+1} \in \Phi_h$ y procediendo como en (52)-(53), se llega a

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{k} - \frac{\gamma}{2\varepsilon^2}\right) \|\phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi^n \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi^{n+1} \phi_1^{n+1}\|_{L^2}^2 \\ + \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|\phi^{n+1} \phi_2^{n+1}\|_{L^2}^2 = -\frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} (\phi^{n+1})^2 \phi_1^{n+1} \phi_2^{n+1} d\mathbf{x} - \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} (\phi^{n+1})^2 \phi^n (\phi_1^{n+1} + \phi_2^{n+1}) d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (63)$$

de lo cual, estimando el lado derecho como en (54)-(55), se deduce

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

Por lo tanto, si $k < \frac{2\varepsilon^2}{\gamma}$, se concluye que $\phi^{n+1} = 0$; y así, $\phi_1^{n+1} = \phi_2^{n+1}$. \square

3.4. Esquema lineal de dos pasos

Con el objetivo de obtener un esquema numérico lineal asociado a (9), se reescribe el potencial de Ginzburg-Landau de la siguiente forma

$$f(\phi) = r\phi, \quad \text{con} \quad r = \frac{1}{\varepsilon^2}(\phi^2 - 1),$$

de lo cual, tomando la derivada en tiempo en la ecuación para la variable r , se llega a

$$r_t = \frac{2\phi \cdot \phi_t}{\varepsilon^2} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\varepsilon^2}{2} r_t = \phi \cdot \phi_t,$$

con la condición inicial $r_0 = \frac{1}{\varepsilon^2}(\phi_0^2 - 1)$. Teniendo en cuenta lo anterior, se considera el siguiente esquema lineal asociado a (9):

- **Inicialización:** Sea $[\phi^0, r^0] \in \Phi_h \times R_h$ (aproximación apropiada de $[\phi_0, \frac{1}{\varepsilon^2}(\phi_0^2 - 1)]$ cuando $h \rightarrow 0$).
- **Paso $n+1$ ($n \geq 1$):** Dado $[\phi^{n-1}, \phi^n, r^n]$, encuentre $[\phi^{n+1}, r^{n+1}] \in \Phi_h \times R_h$ tal que

$$\begin{cases} \frac{1}{\gamma} (\delta_t \phi^{n+1}, \bar{\phi}) + (\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \bar{\phi}) + (r^{n+\frac{1}{2}} \tilde{\phi}, \bar{\phi}) = 0, & \forall \bar{\phi} \in \Phi_h, \\ \frac{\varepsilon^2}{2} (\delta_t r^{n+1}, \bar{r}) - (\tilde{\phi} \cdot \delta_t \phi^{n+1}, \bar{r}) = 0, & \forall \bar{r} \in R_h, \end{cases} \quad (64)$$

donde $\phi^{n+\frac{1}{2}} := (\phi^{n+1} + \phi^n)/2$, $r^{n+\frac{1}{2}} := (r^{n+1} + r^n)/2$ y $\tilde{\phi} = (3\phi^n - \phi^{n-1})/2$, usando una aproximación explícita de segundo orden. Además, estamos considerando el espacio de elementos finitos para la variable r como $R_h \subset L^2(\Omega)$ generado por \mathbb{P}_l -continuo ($l \geq 1$).

Teorema 3.4.1. (Estabilidad energética) *El esquema (64) es energéticamente estable incondicionalmente con respecto a la energía modificada*

$$\bar{E}(\phi, r) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{\varepsilon^2}{4} |r|^2 \right) dx; \quad (65)$$

de hecho, se cumple que

$$\delta_t \bar{E}(\phi^{n+1}, r^{n+1}) + \frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 = 0. \quad (66)$$

Demostración. Tomando $[\bar{\phi}, \bar{r}] = [\delta_t \phi^{n+1}, r^{n+\frac{1}{2}}]$ en el esquema (64) y sumando ambas ecuaciones, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{\gamma} (\delta_t \phi^{n+1}, \delta_t \phi^{n+1}) + (\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \delta_t \phi^{n+1}) + (r^{n+\frac{1}{2}} \tilde{\phi}, \delta_t \phi^{n+1}) \\ + \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{r^{n+1} - r^n}{k}, r^{n+\frac{1}{2}} \right) - (\tilde{\phi} \delta_t \phi^{n+1}, r^{n+\frac{1}{2}}) = 0. \end{aligned} \quad (67)$$

Note que los términos tercero y quinto de (67) son iguales, por lo tanto se sigue que

$$\frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2k} (\nabla(\phi^{n+1} + \phi^n), \nabla(\phi^{n+1} - \phi^n)) + \frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{r^{n+1} - r^n}{k}, \frac{r^{n+1} + r^n}{2} \right) = 0,$$

de lo cual, se deduce que

$$\frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{k} \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla \phi^{n+1}|^2 - \frac{1}{2} |\nabla \phi^n|^2 \right) d\mathbf{x} + \frac{1}{k} \int_{\Omega} \left(\frac{\varepsilon^2}{4} |r^{n+1}|^2 - \frac{\varepsilon^2}{4} |r^n|^2 \right) d\mathbf{x} = 0,$$

y reagrupando de manera conveniente (usando (65)), se llega a

$$\frac{1}{\gamma} \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 + \frac{1}{k} [\bar{E}(\phi^{n+1}, r^{n+1}) - \bar{E}(\phi^n, r^n)] = 0,$$

lo cual implica (66). □

Teorema 3.4.2. (Existencia y unicidad de solución incondicional) *El esquema (64) tiene única solución.*

Demostración. Multiplicando $(64)_2$ por $\frac{k}{2}$ y sumando la expresión resultante con $(64)_1$, se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{1}{k\gamma} (\phi^{n+1} - \phi^n, \bar{\phi}) + \frac{1}{2} (\nabla(\phi^{n+1} + \phi^n), \nabla \bar{\phi}) + \frac{1}{2} ((r^{n+1} + r^n) \tilde{\phi}, \bar{\phi}) \\ + \frac{\varepsilon^2}{4} (r^{n+1} - r^n, \bar{r}) - \frac{1}{2} (\tilde{\phi}(\phi^{n+1} - \phi^n), \bar{r}) = 0, \end{aligned}$$

de lo cual, agrupando al lado derecho de la igualdad los términos que contienen

solo datos del esquema, se llega a

$$\begin{aligned} \frac{1}{k\gamma}(\phi^{n+1}, \bar{\phi}) + \frac{1}{2}(\nabla\phi^{n+1}, \nabla\bar{\phi}) + \frac{1}{2}(r^{n+1}\tilde{\phi}, \bar{\phi}) + \frac{\varepsilon^2}{4}(r^{n+1}, \bar{r}) - \frac{1}{2}(\tilde{\phi}\phi^{n+1}, \bar{r}) = \\ \frac{1}{k\gamma}(\phi^n, \bar{\phi}) - \frac{1}{2}(\nabla\phi^n, \nabla\bar{\phi}) - \frac{1}{2}(r^n\tilde{\phi}, \bar{\phi}) + \frac{\varepsilon^2}{4}(r^n, \bar{r}) - \frac{1}{2}(\phi^n\tilde{\phi}, \bar{r}). \end{aligned} \quad (68)$$

Con el objetivo de usar el Teorema de Lax-Milgram en (68), se considera el espacio de Hilbert $\Phi_h \times R_h$ y las siguientes aplicaciones

$$\begin{aligned} a : (\Phi_h \times R_h) \times (\Phi_h \times R_h) &\rightarrow \mathbb{R} \\ [[\phi_1, r_1], [\phi_2, r_2]] &\mapsto a([\phi_1, r_1], [\phi_2, r_2]), \end{aligned}$$

siendo

$$a([\phi, r], [\bar{\phi}, \bar{r}]) = \frac{1}{k\gamma}(\phi, \bar{\phi}) + \frac{1}{2}(\nabla\phi, \nabla\bar{\phi}) + \frac{1}{2}(r\tilde{\phi}, \bar{\phi}) + \frac{\varepsilon^2}{4}(r, \bar{r}) - \frac{1}{2}(\tilde{\phi}\phi, \bar{r}), \quad (69)$$

y

$$\begin{aligned} l : \Phi_h \times R_h &\rightarrow \mathbb{R} \\ [\bar{\phi}, \bar{r}] &\mapsto l(\bar{\phi}, \bar{r}), \end{aligned}$$

siendo

$$l(\bar{\phi}, \bar{r}) = \frac{1}{k\gamma}(\phi^n, \bar{\phi}) - \frac{1}{2}(\nabla\phi^n, \nabla\bar{\phi}) - \frac{1}{2}(r^n\tilde{\phi}, \bar{\phi}) + \frac{\varepsilon^2}{4}(r^n, \bar{r}) - \frac{1}{2}(\phi^n\tilde{\phi}, \bar{r}). \quad (70)$$

Entonces, dados $[\phi^{n-1}, \phi^n, r^n]$, el problema (68) se puede reescribir de la siguiente manera: Encontrar $[\phi^{n+1}, r^{n+1}] \in \Phi_h \times R_h$ tal que

$$a([\phi^{n+1}, r^{n+1}], [\bar{\phi}, \bar{r}]) = l(\bar{\phi}, \bar{r}), \quad \forall (\bar{\phi}, \bar{r}) \in \Phi_h \times R_h. \quad (71)$$

A continuación, se verificarán las hipótesis del Teorema de Lax-Milgram. En primer lugar, es claro que la aplicación a (definida en (69)) es bilineal; así, basta ver que es continua y coerciva:

- a es continua:

$$\begin{aligned}
|a([\phi, r], [\bar{\phi}, \bar{r}])| &\leq \frac{1}{k\gamma} \int_{\Omega} |\phi| |\bar{\phi}| d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla \phi| |\nabla \bar{\phi}| d\mathbf{x} \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |r \tilde{\phi}| |\bar{\phi}| d\mathbf{x} + \frac{\varepsilon^2}{4} \int_{\Omega} |r| |\bar{r}| d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\tilde{\phi} \phi| |\bar{r}| d\mathbf{x} \\
&\leq \frac{1}{k\gamma} \|\phi\|_{L^2} \|\bar{\phi}\|_{L^2} + \frac{1}{2} \|\nabla \phi\|_{L^2} \|\nabla \bar{\phi}\|_{L^2} \\
&\quad + \frac{1}{2} \|\tilde{\phi}\|_{L^4} \|r\|_{L^2} \|\bar{\phi}\|_{L^4} + \frac{\varepsilon^2}{4} \|r\|_{L^2} \|\bar{r}\|_{L^2} + \frac{1}{2} \|\tilde{\phi}\|_{L^4} \|\phi\|_{L^4} \|\bar{r}\|_{L^2} \\
&\leq C \|[\phi, r]\|_{H^1 \times L^2} \|[\bar{\phi}, \bar{r}]\|_{H^1 \times L^2},
\end{aligned}$$

donde, en la última estimación, se han usado las inmersiones continuas $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$ y $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^4(\Omega)$.

- a es coerciva:

$$\begin{aligned}
a([\phi, r], [\phi, r]) &= \frac{1}{k\gamma} (\phi, \phi) + \frac{1}{2} (\nabla \phi, \nabla \phi) + \frac{1}{2} (r \tilde{\phi}, \phi) + \frac{\varepsilon^2}{4} (r, r) - \frac{1}{2} (\tilde{\phi} \phi, r) \\
&= \frac{1}{k\gamma} \|\phi\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|\nabla \phi\|_{L^2}^2 + \frac{\varepsilon^2}{4} \|r\|_{L^2}^2 \\
&\geq C \|[\phi, r]\|_{H^1 \times L^2}^2,
\end{aligned}$$

donde $C_1 = \min\{\frac{1}{k\gamma}, \frac{1}{2}\}$ y $C = \min\{C_1, \frac{\varepsilon^2}{4}\}$.

Por otra parte, $l \in (\Phi_h \times R_h)'$. En efecto, l es lineal y continuo. La linealidad de l es

clara y la continuidad se sigue de la siguiente estimación

$$\begin{aligned}
l(\bar{\phi}, \bar{r}) &\leq \frac{1}{k\gamma} \int_{\Omega} |\phi^n| |\bar{\phi}| d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla \phi^n| |\nabla \bar{\phi}| d\mathbf{x} \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |r^n \tilde{\phi}| |\bar{\phi}| d\mathbf{x} + \frac{\varepsilon^2}{4} \int_{\Omega} |r^n| |\bar{r}| d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\tilde{\phi} \phi^n| |\bar{r}| d\mathbf{x} \\
&\leq \frac{1}{k\gamma} \|\phi^n\|_{L^2} \|\bar{\phi}\|_{L^2} + \frac{1}{2} \|\nabla \phi^n\|_{L^2} \|\nabla \bar{\phi}\|_{L^2} \\
&\quad + \frac{1}{2} \|\tilde{\phi}\|_{L^4} \|r^n\|_{L^2} \|\bar{\phi}\|_{L^4} + \frac{\varepsilon^2}{4} \|r^n\|_{L^2} \|\bar{r}\|_{L^2} + \frac{1}{2} \|\tilde{\phi}\|_{L^4} \|\phi^n\|_{L^4} \|\bar{r}\|_{L^2} \\
&\leq C \|[\bar{\phi}, \bar{r}]\|_{H^1 \times L^2}.
\end{aligned}$$

Por lo tanto, usando el Teorema de Lax-Milgram se concluye que existe un único $[\phi, r] \in \Phi_h \times R_h$ que resuelve (71). Finalmente, tomando primero $\bar{r} = 0$ en (68), y luego $\bar{\phi} = 0$ en (68), se concluye que existe un único $[\phi, r] \in \Phi_h \times R_h$ que resuelve (64). \square

4. Métodos de Newton y simulaciones

En este capítulo, se consideran algunos métodos de Newton asociados a los esquemas no lineales 1 y 2 estudiados en el capítulo anterior. Es importante recordar que el método iterativo de Newton asociado a un sistema $G(\phi) = 0$ puede formularse como sigue: dado ϕ^l , encontrar ϕ^{l+1} resolviendo

$$G'(\phi^l)(\phi^{l+1} - \phi^l) = -G(\phi^l), \quad (72)$$

y se itera hasta que se cumpla un criterio de convergencia. La convergencia de este proceso iterativo se entiende como: $\phi^l \rightarrow \phi^{n+1}$ cuando $l \rightarrow +\infty$. Así mismo, se realizan algunas simulaciones numéricas con el objetivo de ilustrar la dinámica de separación de fases descrita por el modelo (9), usando uno de los esquemas numéricos estudiados en este trabajo.

4.1. Método de Newton para el esquema no lineal 1 (NL1)

Para aproximar la solución ϕ^{n+1} del esquema no lineal 1 (ver Subsección 3.2), se usará el algoritmo de Newton. Para esto, se considera la siguiente función

$$\langle G(\phi^{n+1}), \bar{\phi} \rangle = (\delta_t \phi^{n+1}, \bar{\phi}) + \gamma \left(\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \bar{\phi} \right) + \gamma (f_+^k(\phi^{n+1}, \phi^n) + f_-^k(\phi^n, \phi^{n-1}), \bar{\phi}), \quad (73)$$

para todo $\bar{\phi} \in \Phi_h$. Haciendo uso del algoritmo de Newton (72), se obtiene el siguiente esquema lineal:

- **Inicialización:** $\phi^0 = \phi^n$.
- **Iteración $l + 1$ ($l \geq 0$):** Dado $\phi^l \in \Phi_h$, encontrar $\phi^{l+1} \in \Phi_h$ tal que, para todo

$\bar{\phi} \in \Phi_h$:

$$\begin{cases} \frac{1}{k} (\phi^{l+1}, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2} (\nabla \phi^{l+1}, \nabla \bar{\phi}) + \gamma \left(\frac{\partial f_+^k}{\partial \phi^{n+1}} (\phi^l, \phi^n) \cdot \phi^{l+1}, \bar{\phi} \right) = \frac{1}{k} (\phi^n, \bar{\phi}) \\ -\frac{\gamma}{2} (\nabla \phi^n, \nabla \bar{\phi}) + \gamma \left(\frac{\partial f_+^k}{\partial \phi^{n+1}} (\phi^l, \phi^n) \cdot \phi^l, \bar{\phi} \right) - \gamma (f_+^k (\phi^l, \phi^n) + f_-^k (\phi^n, \phi^{n-1}), \bar{\phi}), \end{cases} \quad (74)$$

hasta que se verifique el siguiente *test de parada*: $\|\phi^{l+1} - \phi^l\|_{H^1} \leq tol$ (con $tol > 0$ siendo un parámetro de tolerancia) y donde

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_+^k (\phi^l, \phi^n)}{\partial \phi^{n+1}} &= \frac{\partial}{\partial \phi^{n+1}} \left(\frac{1}{4\varepsilon^2} \left[(\phi^{n+1})^3 + (\phi^{n+1})^2 \phi^n + (\phi^n)^2 \phi^{n+1} + (\phi^n)^3 \right] \right) \Big|_{\phi^{n+1}=\phi^l} \\ &= \frac{1}{4\varepsilon^2} \left[3(\phi^l)^2 + 2\phi^l \phi^n + (\phi^n)^2 \right] \\ &= \frac{1}{4\varepsilon^2} \left[2(\phi^l)^2 + (\phi^l + \phi^n)^2 \right] \geq 0, \end{aligned} \quad (75)$$

y

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_+^k}{\partial \phi^{n+1}} (\phi^l, \phi^n) \cdot \phi^l, \bar{\phi} \right) - (f_+^k (\phi^l, \phi^n), \bar{\phi}) &= \frac{1}{4\varepsilon^2} \left(2(\phi^l)^3 + |\phi^l + \phi^n|^2 \phi^l, \bar{\phi} \right) \\ &\quad - \frac{1}{4\varepsilon^2} \left((\phi^l)^3 + (\phi^l)^2 \phi^n + (\phi^n)^2 \phi^l + (\phi^n)^3, \bar{\phi} \right) \\ &= \frac{1}{4\varepsilon^2} \left(2(\phi^l)^3 + (\phi^l)^2 \phi^n - (\phi^n)^3, \bar{\phi} \right). \end{aligned} \quad (76)$$

Teorema 4.1.1. (Existencia y unicidad de solución) *Existe una única solución $\phi^{l+1} \in \Phi_h$ solución del método de Newton (74).*

Demostración. Teniendo en cuenta que el sistema (74) es lineal (en dimensión finita), es suficiente probar la unicidad de solución. Con este objetivo, considere $\phi_1^{l+1}, \phi_2^{l+1} \in \Phi_h$ dos soluciones de (74) correspondientes a los datos $\phi^l, \phi^n \in \Phi_h$. Entonces, $\phi^{l+1} = \phi_1^{l+1} - \phi_2^{l+1} \in \Phi_h$ verifica el siguiente sistema

$$\frac{1}{k} (\phi^{l+1}, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2} (\nabla \phi^{l+1}, \nabla \bar{\phi}) + \gamma \left(\frac{1}{4\varepsilon^2} \left[2(\phi^l)^2 + (\phi^l + \phi^n)^2 \right] \cdot \phi^{l+1}, \bar{\phi} \right) = 0, \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h,$$

de lo cual, tomando como función test $\bar{\phi} = \phi^{l+1} \in \Phi_h$ y teniendo en cuenta que $[2(\phi^l)^2 + (\phi^l + \phi^n)^2] \geq 0$, se obtiene

$$\frac{1}{k} \|\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi^{l+1}\|_{L^2}^2 = -\frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} \left([2(\phi^l)^2 + (\phi^l + \phi^n)^2] (\phi^{l+1})^2 \right) d\mathbf{x} \leq 0,$$

y se concluye que $\phi^{l+1} = 0$; esto es, $\phi_1^{l+1} = \phi_2^{l+1}$. □

Teorema 4.1.2. (Convergencia del método de Newton) Bajo la condición

$$\lim_{[k,h] \rightarrow 0} \frac{k}{h^2} = 0,$$

la sucesión $\{\phi^l\}_{l \geq 0}$ del algoritmo iterativo (74) converge en la norma $H^1(\Omega)$ a la solución ϕ^{n+1} del esquema (19) (con la aproximación del potencial $f^k(\phi^{n+1}, \phi^n, \phi^{n-1})$ dada en (25)) de forma cuadrática.

Demostración. Teniendo en cuenta la función $G(\phi^{n+1})$ definida en (73), se reescribe el esquema **(NL1)** de la siguiente manera:

$$\langle G(\phi^{n+1}), \bar{\phi} \rangle = 0, \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h, \quad (77)$$

y por lo tanto, el método de Newton (74) se escribe como

$$\langle G'(\phi^l)(\phi^{l+1} - \phi^l), \bar{\phi} \rangle + \langle G(\phi^l), \bar{\phi} \rangle = 0, \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h. \quad (78)$$

Aplicando la fórmula de Taylor a $G(\phi^{n+1})$ centrada en ϕ^l y usando (77), se tiene que

$$\begin{aligned} 0 &= \langle G(\phi^{n+1}), \bar{\phi} \rangle \\ &= \langle G(\phi^l), \bar{\phi} \rangle + \langle G'(\phi^l)(\phi^{n+1} - \phi^l), \bar{\phi} \rangle + \frac{1}{2} \langle G''(\phi^l)(\phi^{n+1} - \phi^l)^2, \bar{\phi} \rangle, \end{aligned} \quad (79)$$

donde $\phi_l^{n+1} = (1 - \theta)\phi^{n+1} + \theta\phi^l$ (para algún $\theta \in [0, 1]$). Así, denotando por $e_{\phi}^{l+1} =$

$\phi^{n+1} - \phi^{l+1}$, de (78) y (79) se deduce que

$$\langle G'(\phi^l)(\phi^{n+1} - \phi^{l+1}), \bar{\phi} \rangle = -\frac{1}{2} \langle G''(\phi_l^{n+1})(\phi^{n+1} - \phi^l)^2, \bar{\phi} \rangle,$$

de lo cual, se llega a

$$\langle G'(\phi^l)e_\phi^{l+1}, \bar{\phi} \rangle = -\frac{1}{2} \langle G''(\phi_l^{n+1})(e_\phi^l)^2, \bar{\phi} \rangle, \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h. \quad (80)$$

Entonces, de (80) se deduce

$$\frac{1}{k} \langle e_\phi^{l+1}, \bar{\phi} \rangle + \frac{\gamma}{2} \langle \nabla e_\phi^{l+1}, \nabla \bar{\phi} \rangle + \gamma \left(\frac{\partial f_+^k}{\partial \phi^{n+1}}(\phi^l, \phi^n) e_\phi^{l+1}, \bar{\phi} \right) = -\frac{\gamma}{2} \left(\frac{\partial^2 f_+^k}{\partial^2 \phi^{n+1}}(\phi_l^{n+1}, \phi^n) |e_\phi^l|^2, \bar{\phi} \right), \quad (81)$$

con

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_+^k}{\partial \phi^{n+1}}(\phi^l, \phi^n) &= \frac{1}{4\varepsilon^2} \left[2(\phi^l)^2 + (\phi^l + \phi^n)^2 \right] \geq 0, \\ \frac{\partial^2 f_+^k}{\partial^2 \phi^{n+1}}(\phi^{n+1}, \phi^n) &= \frac{1}{2\varepsilon^2} (3\phi_l^{n+1} + \phi^n). \end{aligned}$$

Tomando como función test $\bar{\phi} = e_\phi^{l+1}$ en (81), se tiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{k} \langle e_\phi^{l+1}, e_\phi^{l+1} \rangle + \frac{\gamma}{2} \langle \nabla e_\phi^{l+1}, \nabla e_\phi^{l+1} \rangle \\ + \gamma \left(\frac{\partial f_+^k}{\partial \phi^{n+1}}(\phi^l, \phi^n) e_\phi^{l+1}, e_\phi^{l+1} \right) = -\frac{\gamma}{2} \left(\frac{\partial^2 f_+^k}{\partial^2 \phi^{n+1}}(\phi_l^{n+1}, \phi^n) |e_\phi^l|^2, e_\phi^{l+1} \right), \end{aligned}$$

lo que implica que

$$\begin{aligned} \frac{1}{k} \|e_\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla e_\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 \\ + \gamma \int_\Omega \frac{\partial f_+^k}{\partial \phi^{n+1}}(\phi^l, \phi^n) |e_\phi^{l+1}|^2 dx = -\frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_\Omega (3\phi_l^{n+1} + \phi^n) |e_\phi^l|^2 e_\phi^{l+1} dx \end{aligned} \quad (82)$$

Teniendo en cuenta que $\frac{\partial f_+^k}{\partial \phi^{n+1}}(\phi^l, \phi^n) \geq 0$ y usando las desigualdades de Hölder y

Young en (82), se obtiene

$$\begin{aligned} \|e_\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma k}{2} \|\nabla e_\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 &\leq \frac{\gamma k}{4\varepsilon^2} \|3\phi_l^{n+1} + \phi^n\|_{L^6} \|e_\phi^l\|_{L^6}^2 \|e_\phi^{l+1}\|_{L^2} \\ &\leq \frac{1}{2} \|e_\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 + \frac{(\gamma k)^2}{32\varepsilon^4} \|3\phi_l^{n+1} + \phi^n\|_{L^6}^2 (\|e_\phi^l\|_{L^6}^2)^2, \end{aligned}$$

de lo cual, teniendo en cuenta que $\|\phi\|_{L^6} \leq C\|\phi\|_{H^1}$, se encuentra que

$$\|e_\phi^{l+1}\|_{H^1}^2 \leq C \|3\phi_l^{n+1} + \phi^n\|_{H^1}^2 \left(\|e_\phi^l\|_{H^1}^2 \right)^2. \quad (83)$$

En particular, teniendo en cuenta que $3\phi_l^{n+1} + \phi^n = 3(\phi^{n+1} - \theta e_\phi^l) + \phi^n$, usando la desigualdad triangular se llega a

$$\|3\phi_l^{n+1} + \phi^n\|_{H^1}^2 \leq C(\|3\phi^{n+1} + \phi^n\|_{H^1}^2 + \|3\theta e_\phi^l\|_{H^1}^2) \leq C(\|3\phi^{n+1} + \phi^n\|_{H^1}^2 + 9\|e_\phi^l\|_{H^1}^2), \quad (84)$$

y así, de (83)-(84), se obtiene

$$\|e_\phi^{l+1}\|_{H^1}^2 \leq C(\|3\phi^{n+1} + \phi^n\|_{H^1}^2 + 9\|e_\phi^l\|_{H^1}^2) \left(\|e_\phi^l\|_{H^1}^2 \right)^2. \quad (85)$$

Con el objetivo de aplicar el Lema 1.4.3, se usará una estrategia inductiva. Si se asume la hipótesis

$$\|e_\phi^l\|_{H^1}^2 \leq \delta_0, \quad (86)$$

donde $\delta_0 > 0$ es una constante suficientemente pequeña que será determinada más adelante, de (85)-(86), se tiene

$$\|e_\phi^{l+1}\|_{H^1}^2 \leq C \left(\|3\phi^{n+1} + \phi^n\|_{H^1}^2 + 9\delta_0 \right) \delta_0^2.$$

Por ello, si se escoge $\|e_\phi^0\|_{H^1}^2 \leq \delta_0$, con δ_0 lo suficientemente pequeño como para

que

$$C \left(\|3\phi^{n+1} + \phi^n\|_{H^1}^2 + 9\delta_0 \right) \delta_0 \leq 1, \quad (87)$$

se obtiene la siguiente expresión de recurrencia

$$\|e_\phi^{l+1}\|_{H^1}^2 \leq \|e_\phi^l\|_{H^1}^2 \leq \dots \leq \|e_\phi^0\|_{H^1}^2 \leq \delta_0.$$

Entonces, a partir de (85) se deduce que

$$\|e_\phi^{l+1}\|_{H^1}^2 \leq C(\delta_0) \left(\|e_\phi^l\|_{H^1}^2 \right)^2, \quad (88)$$

donde $C(\delta_0)$ está acotada para δ_0 suficientemente pequeño. Por último, solo resta encontrar la siguiente cota del error inicial

$$\|e_\phi^0\|_{H^1}^2 = \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_{H^1}^2 \leq \delta_0.$$

En efecto, utilizando la ley de energía discreta (26) multiplicada por k , y la desigualdad inversa $\|\phi\|_{H^1} \leq \frac{C}{h} \|\phi\|_{L^2}$ para toda $\phi \in \Phi_h$ (ver Lema 1.4.2), se encuentra que

$$\|e_\phi^0\|_{H^1}^2 = \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_{H^1}^2 \leq \frac{C}{h^2} \|\phi^{n+1} - \phi^n\|_{L^2}^2 \leq C \frac{k}{h^2} k \|\delta_t \phi^{n+1}\|_{L^2}^2 \leq C \frac{\gamma k}{h^2} \tilde{E}(\phi^n). \quad (89)$$

Por lo tanto, tomando $\delta_0 = O\left(\frac{k}{h^2}\right)$, entonces la restricción (87) se cumple si se impone la hipótesis

$$\lim_{[k,h] \rightarrow 0} \frac{k}{h^2} = 0.$$

Por tanto, combinando (88) y (89) estamos bajo las hipótesis del Lemma 1.4.3, por lo que se concluye la convergencia cuadrática de ϕ^{l+1} a ϕ^{n+1} en la norma $H^1(\Omega)$. \square

4.2. Método de Newton para el esquema no lineal 2 (NL2)

Procediendo de manera análoga a la Sección 4.1, consideramos el siguiente algoritmo de Newton para aproximar el esquema no lineal 2 (NL2): Dado $\phi^l \in \Phi_h$ (suponiendo que $\phi^0 = \phi^n$ en el primer paso de iteración), encontrar $\phi^{l+1} \in \Phi_h$ tal que, para todo $\bar{\phi} \in \Phi_h$, se verifique

$$\begin{cases} \frac{1}{k} (\phi^{l+1}, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2} (\nabla \phi^{l+1}, \nabla \bar{\phi}) + \gamma \left(\frac{\partial f^k(\phi^l, \phi^n)}{\partial \phi^{n+1}} \phi^{l+1}, \bar{\phi} \right) = \frac{1}{k} (\phi^n, \bar{\phi}) \\ -\frac{\gamma}{2} (\nabla \phi^n, \nabla \bar{\phi}) + \gamma \left(\frac{\partial f^k(\phi^l, \phi^n)}{\partial \phi^{n+1}} \phi^l, \bar{\phi} \right) - \gamma (f^k(\phi^l, \phi^n), \bar{\phi}), \end{cases} \quad (90)$$

hasta que se verifique el *test de parada*: $\|\phi^{l+1} - \phi^l\|_{H^1} \leq tol$, donde

$$\frac{\partial f^k(\phi^l, \phi^n)}{\partial \phi^{n+1}} = \frac{1}{4\varepsilon^2} (3(\phi^l)^2 + 2\phi^l \phi^n + (\phi^n)^2 - 2) = \frac{\partial f_+^k(\phi^l, \phi^n)}{\partial \phi^{n+1}} - \frac{1}{2\varepsilon^2}$$

y

$$\left(\frac{\partial f^k(\phi^l, \phi^n)}{\partial \phi^{n+1}} \phi^l, \bar{\phi} \right) - (f^k(\phi^l, \phi^n), \bar{\phi}) = \frac{1}{4\varepsilon^2} (2(\phi^l)^3 + (\phi^l)^2 \phi^n - (\phi^n)^3 + 2\phi^n, \bar{\phi}).$$

Teorema 4.2.1. (Existencia y unicidad de solución) Si $k < \frac{2\varepsilon^2}{\gamma}$, entonces existe una única solución $\phi^{l+1} \in \Phi_h$ solución del método de Newton (90).

Observación 4.2.2. La condición establecida en el Teorema 4.2.1, es decir, $k < \frac{2\varepsilon^2}{\gamma}$, es la misma que la que se requiere en⁹ para probar este resultado.

Demostración. Teniendo en cuenta que el sistema (90) es lineal (en dimensión finita), es suficiente probar la unicidad de solución. Con este objetivo, considere $\phi_1^{l+1}, \phi_2^{l+1} \in \Phi_h$ dos soluciones de (90) correspondientes a los datos $\phi^l, \phi^n \in \Phi_h$. Entonces, $\phi^{l+1} = \phi_1^{l+1} - \phi_2^{l+1} \in \Phi_h$ verifica el siguiente sistema

$$\frac{1}{k} (\phi^{l+1}, \bar{\phi}) + \frac{\gamma}{2} (\nabla \phi^{l+1}, \nabla \bar{\phi}) + \gamma \left(\left(\frac{\partial f_+^k(\phi^l, \phi^n)}{\partial \phi^{n+1}} - \frac{1}{2\varepsilon^2} \right) \cdot \phi^{l+1}, \bar{\phi} \right) = 0, \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h,$$

de lo cual, tomando como función test $\bar{\phi} = \phi^{l+1} \in \Phi_h$ y usando que $\frac{\partial f_+^k}{\partial \phi^{n+1}}(\phi^l, \phi^n) \geq 0$, se obtiene

$$\left(\frac{1}{k} - \frac{\gamma}{2\varepsilon^2}\right) \|\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla \phi^{l+1}\|_{L^2}^2 = -\gamma \int_{\Omega} \left(\frac{\partial f_+^k}{\partial \phi^{n+1}}(\phi^l, \phi^n) (\phi^{l+1})^2\right) d\mathbf{x} \leq 0,$$

y por lo tanto, si $k < \frac{2\varepsilon^2}{\gamma}$, se concluye que $\phi^{l+1} = 0$; esto es, $\phi_1^{l+1} = \phi_2^{l+1}$. \square

Teorema 4.2.3. (Convergencia del método de Newton) Bajo las restricciones

$$k < \frac{2\varepsilon^2(1-\delta)}{\gamma} \quad \text{y} \quad \lim_{[k,h] \rightarrow 0} \frac{k}{h^2} = 0,$$

(siendo δ un parámetro suficientemente pequeño), la sucesión $\{\phi^l\}_{l \geq 0}$ del algoritmo iterativo (90) converge en la norma $H^1(\Omega)$ a la solución ϕ^{n+1} del esquema (19) (con la aproximación del potencial $f^k(\phi^{n+1}, \phi^n)$ dada en (57)) de forma cuadrática.

Demostración. Considere la función

$$\langle G(\phi^{n+1}), \bar{\phi} \rangle = (\delta_t \phi^{n+1}, \bar{\phi}) + \gamma \left(\nabla \phi^{n+\frac{1}{2}}, \nabla \bar{\phi} \right) + \gamma \left(f^k(\phi^{n+1}, \phi^n), \bar{\phi} \right), \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h, \quad (91)$$

con $f^k(\phi^{n+1}, \phi^n)$ dada en (57); entonces, el esquema **(NL2)** se puede reescribir de la siguiente manera

$$\langle G(\phi^{n+1}), \bar{\phi} \rangle = 0, \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h.$$

Procediendo igual que en (77)-(80), se llega a

$$\langle G'(\phi^l) e_{\phi}^{l+1}, \bar{\phi} \rangle = -\frac{1}{2} \langle G''(\phi_l^{n+1}) (e_{\phi}^l)^2, \bar{\phi} \rangle, \quad \forall \bar{\phi} \in \Phi_h,$$

lo cual se traduce en

$$\frac{1}{k} \langle e_{\phi}^{l+1}, \bar{\phi} \rangle + \frac{\gamma}{2} \langle \nabla e_{\phi}^{l+1}, \nabla \bar{\phi} \rangle + \gamma \left\langle \frac{\partial f^k(\phi^l, \phi^n)}{\partial \phi^{n+1}} e_{\phi}^{l+1}, \bar{\phi} \right\rangle = -\frac{\gamma}{2} \left\langle \frac{\partial^2 f^k(\phi_l^{n+1}, \phi^n)}{\partial^2 \phi^{n+1}} |e_{\phi}^l|^2, \bar{\phi} \right\rangle, \quad (92)$$

donde

$$\begin{aligned}\frac{\partial f^k}{\partial \phi^{n+1}}(\phi^l, \phi^n) &= \frac{1}{4\varepsilon^2} [3(\phi^l)^2 + 2\phi^l \phi^n + (\phi^n)^2] - \frac{1}{2\varepsilon^2} = \frac{\partial f_+^k(\phi^l, \phi^n)}{\partial \phi^{n+1}} - \frac{1}{2\varepsilon^2}, \\ \frac{\partial^2 f^k}{\partial^2 \phi^{n+1}}(\phi_l^{n+1}, \phi^n) &= \frac{1}{2\varepsilon^2} [3(\phi_l^{n+1}) + \phi^n].\end{aligned}$$

Tomando como función test $\bar{\phi} = e_\phi^{l+1}$ en (92), se tiene que

$$\begin{aligned}\left(\frac{1}{k} - \frac{\gamma}{2\varepsilon^2}\right) \|e_\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla e_\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 \\ + \gamma \int_{\Omega} \left(\frac{\partial f_+^k(\phi^l, \phi^n)}{\partial \phi^{n+1}}\right) |e_\phi^{l+1}|^2 dx = -\frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \int_{\Omega} (3(\phi_l^{n+1}) + \phi^n) |e_\phi^l|^2 e_\phi^{l+1} dx.\end{aligned}\quad (93)$$

Teniendo en cuenta que $\frac{\partial f_+^k}{\partial \phi^{n+1}}(\phi^l, \phi^n) \geq 0$ y usando las desigualdades de Hölder y Young en (93), se obtiene

$$\begin{aligned}\left(\frac{1}{k} - \frac{\gamma}{2\varepsilon^2}\right) \|e_\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla e_\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 &\leq \frac{\gamma}{4\varepsilon^2} \|3\phi_l^{n+1} + \phi^n\|_{L^6} \|e_\phi^l\|_{L^6}^2 \|e_\phi^{l+1}\|_{L^2} \\ &\leq \frac{\delta}{k} \|e_\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 + \mathbf{C}k \|3\phi_l^{n+1} + \phi^n\|_{L^6}^2 (\|e_\phi^l\|_{L^6}^2)^2,\end{aligned}$$

de lo cual, teniendo en cuenta que $\|\phi\|_{L^6} \leq C\|\phi\|_{H^1}$, se deduce

$$\left(\frac{1-\delta}{k} - \frac{\gamma}{2\varepsilon^2}\right) \|e_\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla e_\phi^{l+1}\|_{L^2}^2 \leq C \|3\phi_l^{n+1} + \phi^n\|_{H^1}^2 \left(\|e_\phi^l\|_{H^1}\right)^2. \quad (94)$$

Por lo tanto, si $k < \frac{2\varepsilon^2(1-\delta)}{\gamma}$, de (94) se llega a

$$\|e_\phi^{l+1}\|_{H^1}^2 \leq C \|3\phi_l^{n+1} + \phi^n\|_{H^1}^2 \left(\|e_\phi^l\|_{H^1}\right)^2. \quad (95)$$

Así, siguiendo las mismas líneas de (83)-(89), pero en este caso usando la ley de energía discreta (58) (asociada al esquema **(NL2)**), e imponiendo la hipótesis $\lim_{[k,h] \rightarrow 0} \frac{k}{h^2} = 0$, se puede asegurar la convergencia cuadrática de ϕ^{l+1} a ϕ^{n+1} en la norma $H^1(\Omega)$. \square

4.3. Simulaciones numéricas

El objetivo de esta sección es mostrar los resultados de algunas simulaciones numéricas realizadas con el objetivo de ilustrar la dinámica de separación de fases descrita por el modelo (9), usando uno de los esquemas numéricos estudiados en este trabajo. Específicamente, se consideró el método de Newton para el esquema **(NL1)**.

Con respecto a la discretización espacial, se aproximó el espacio Φ_h por elementos finitos $\mathbb{P}_1 - \text{continuos}$, y se consideró el dominio $\Omega = (0, 1)^2$, utilizando una malla estructurada, con parámetro espacial $h = \frac{1}{90}$ y parámetro temporal $k = 0.0025$. Se tomaron los siguientes valores para los parámetros: $\gamma = 0.0001$, $\varepsilon = 0.01$ y se consideró el dato inicial ϕ_0 correspondiente a un dato aleatorio con valores entre -10^{-2} y 10^{-2} , con el objetivo de simular una descomposición espinodal (ver Figura 2). Las simulaciones se realizaron usando el software FreeFem++.

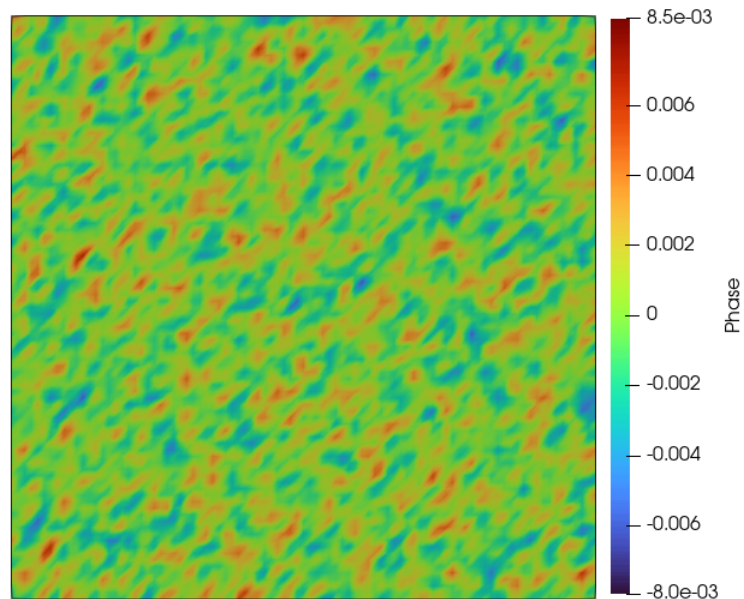


Figura 2. Dato inicial ϕ_0 .

En la Figura 3 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.

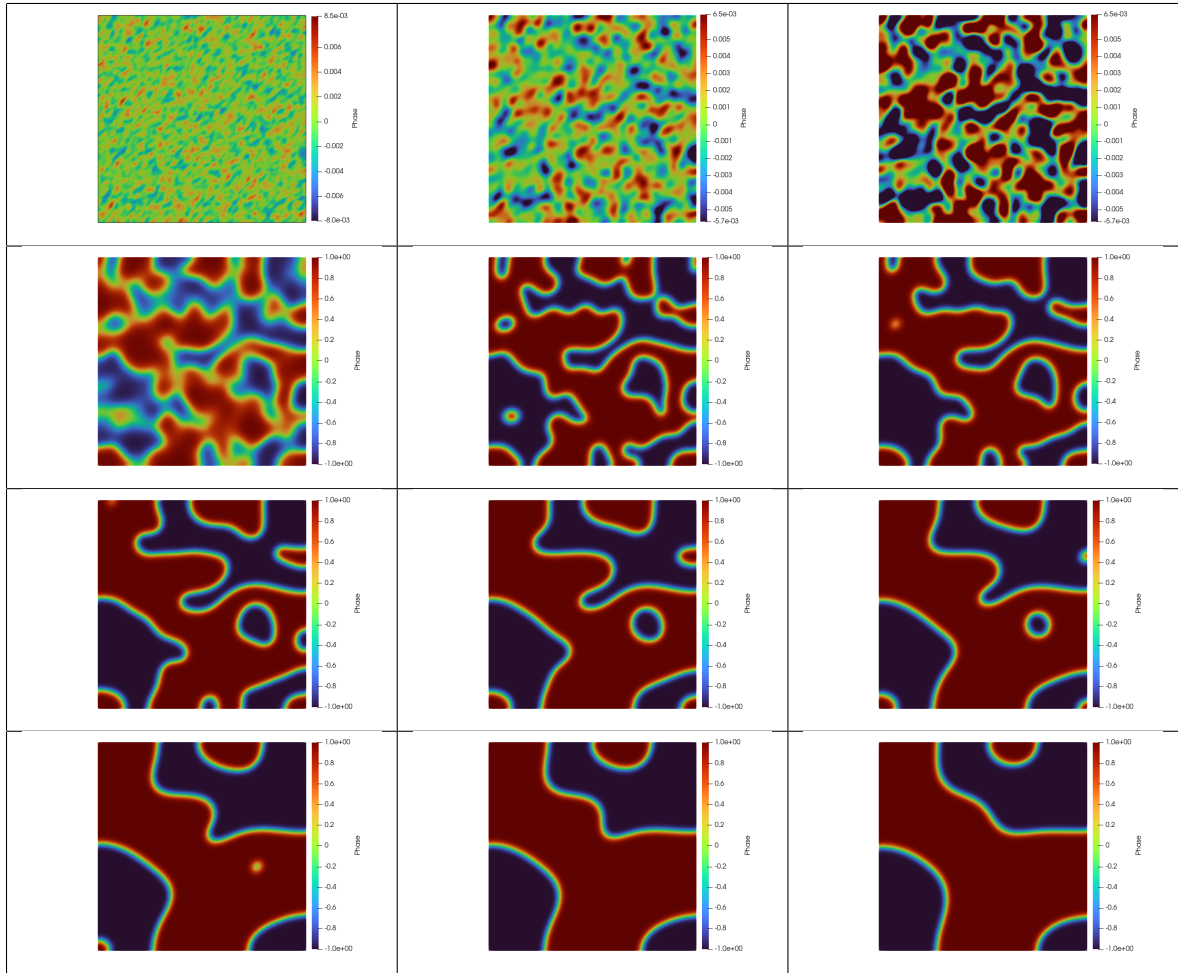


Figura 3. Dinámica de las fases.

Con respecto a la estabilidad energética, en las Figuras 4 - 6, se muestra la evolución de la energía $E(\phi)$ (definida en (3)) en 3 intervalos de tiempo diferentes, donde se verifica una energía decreciente en tiempo.

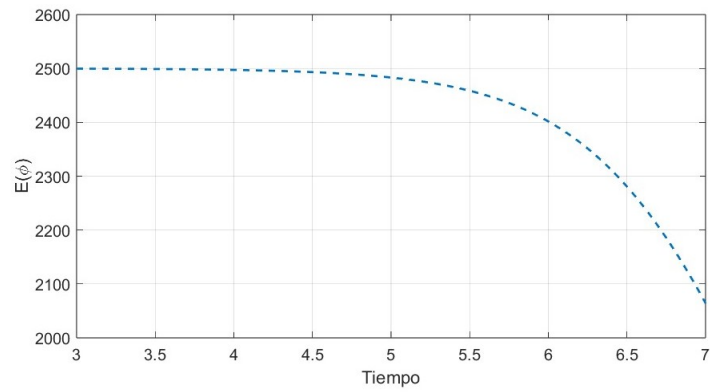


Figura 4. Energía $E(\phi)$ en el intervalo $[3, 7]$.

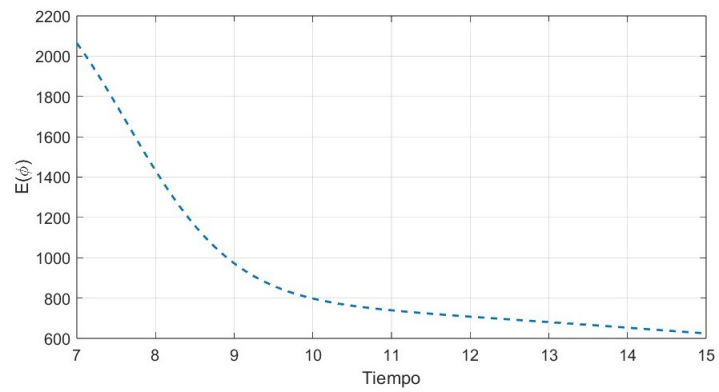


Figura 5. Energía $E(\phi)$ en el intervalo $[7, 15]$.

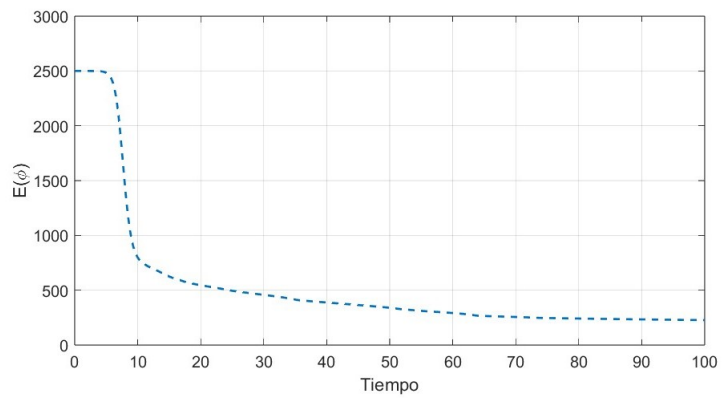


Figura 6. Energía $E(\phi)$ en el intervalo $[0, 100]$.

BIBLIOGRAFÍA

- A. Shah M. Sabir, B. Peter. "An efficient time-stepping scheme for numerical simulation of dendritic crystal growth". En: *European Journal of Computational Mechanics* 25.6 (2017), págs. 475-488 (vid. pág. 11).
- Brezis, H. *Análisis funcional. Teoría y aplicaciones*. Alianza Editorial, 1984 (vid. págs. 19, 21).
- C. Elliott D. French, F. Milner. "A second order splitting method for the Cahn-Hilliard equation". En: *Numer. Math* 54.5 (1989), págs. 575-590 (vid. pág. 46).
- C. Liu, J. Shen. "A phase field model for the mixture of two incompressible fluids and its approximation by a Fourier-spectral method". En: *Physica D* 179.3 (2003), págs. 211-228 (vid. pág. 11).
- F. Guillén-González, 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. págs. 12, 13, 22, 48, 62).
- Fernández-Cara, E. "A review of basic theoretical results concerning the Navier-Stokes and other similar equations". En: *Bol. Soc. Esp. Mat. Apl. SeMA* 32 (2005), págs. 45-73 (vid. pág. 28).
- G. Karali, Y. Nagase. "On the existence of solution for a Cahn-Hilliard/Allen-Cahn equation". En: *Discrete Contin. Dyn. Syst.* 7 (2014), págs. 127-137 (vid. págs. 12, 30).

- Galdi, G. P. *An Introduction to the Mathematical Theory of the Navier-Stokes Equations*. Springer, 2011 (vid. pág. 19).
- J.-L. Lions, J. Peetre. “Sur une classe d’espaces d’interpolation”. En: *Inst. Hautes Etudes* 19 (1964), págs. 5-68 (vid. pág. 21).
- J. W. Cahn, S. M. Allen. “A Microscopic Theory of Domain Wall Motion and Its Experimental Verification in Fe-Al Alloy Domain Growth Kinetics”. En: *Journal de Physique* (1977), págs. 51-54 (vid. pág. 11).
- M. Bene V. Chalupecky, K. Mikula. “Geometrical image segmentation by the Allen Cahn equation”. En: *Appl. Numer. Math.* 51.3 (2004), págs. 187-205 (vid. pág. 11).
- P. Lin C. Liu, H Zhang. “An energy law preserving C^0 finite element scheme for simulating the kinematic effects in liquid crystal dynamics”. En: *J. Comput. Phys.* 227.2 (2007), págs. 1411-1427 (vid. pág. 46).
- P. Yue C. Zhou, J. J. Feng C. F. Olliviergouch H. Hu. “Phase-field simulations of interfacial dynamics in viscoelastic fluids using finite elements with adaptive meshing”. En: *J. Comput. Phys.* 219.1 (2006), págs. 47-67 (vid. pág. 11).
- Q. Du, R. Nicolaides. “Numerical analysis of a continuum model of phase transition”. En: *SIAM J. Numer. Anal.* 28.5 (1991), págs. 1310-1322 (vid. pág. 46).
- S. C. Brenner, L. R. Scott. *The mathematical theory of finite element methods*. Springer, 2011 (vid. pág. 22).
- S. M. Allen, J. W. Cahn. “A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening”. En: *Acta Metall* 27.6 (1979), págs. 1085-1095 (vid. pág. 11).

S. M. Allen, J. W. Cahn. "Coherent and Incoherent Equilibria in Iron-Rich Iron-Aluminum Alloys". En: *Acta Metall* 23.9 (1975), págs. 1017-1026 (vid. pág. 10).