

TRABAJO MONOGRÁFICO

CRISTALES LÍQUIDOS Y EL MÉTODO DE
ELEMENTOS FINITOS PARA MAPAS
ARMÓNICOS.

AUTOR:

NAHUEL DE LEÓN

SEPTIEMBRE 2023

ORIENTADOR:

JUAN PABLO BORTHAGARAY
FACULTAD DE INGENIERÍA, UDELAR

LICENCIATURA EN MATEMÁTICA
UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA
MONTEVIDEO, URUGUAY

Resumen

La fase nemática de un cristal líquido se presenta en sustancias con moléculas alargadas, que no presentan un orden posicional de largo rango pero sí cierto orden orientacional. El modelo más sencillo para representar la orientación media de las moléculas de cristales líquidos nemáticos es el de Oseen-Frank. Éste se basa en la idea de que las moléculas se alinean preferentemente en una dirección común, que todas tienen la misma longitud y que la interacción electromagnética entre moléculas alejadas es despreciable. Por lo tanto, modelamos la orientación media de las moléculas en un punto como un campo con imagen en la esfera que minimiza cierta energía. En su formulación más simple (la llamada energía a una constante), el modelo corresponde a minimizar una energía de Dirichlet bajo una restricción de largo. Esto lleva a la búsqueda de mapas armónicos con imagen en la esfera. En este trabajo exploramos los algoritmos de descenso por gradiente dados en [1], [2] y [3], con el objetivo de hallar soluciones numéricas, mediante el método de elementos finitos, del problema de buscar mapas armónicos con imagen en la esfera.

El capítulo 1 es un capítulo de preliminares, en él asentamos la notación, damos algunas de las definiciones necesarias para el resto del texto, probamos algunos resultados de análisis sobre espacios de Sobolev y damos una introducción al método de elementos finitos.

En el capítulo 2 nos basamos en las ideas de [7] para introducir el modelo de Oseen-Frank como motivación principal de nuestro problema y deducir la expresión de la energía de Oseen-Frank.

El capítulo 3 está enfocado en el análisis de los mapas armónicos. Planteamos el problema que nos interesa, probamos resultados de existencia y mostramos algunos ejemplos. Además damos caracterizaciones sobre mapas armónicos que nos serán útiles. Por último, damos el marco de lo que será nuestra aproximación de mapas armónicos y probamos el pasaje de las caracterizaciones antes mencionadas al contexto numérico.

En el capítulo 4 hacemos el análisis numérico de nuestro problema. Presentamos dos algoritmos y, usando lo visto en los capítulos 1 y 3, probamos la convergencia de ambos. Por último mostramos algunos experimentos numéricos en los que comparamos estos algoritmos y observamos algunas de sus propiedades, la implementación fue realizada en el lenguaje *FreeFem++*[6].

Capítulo 1

Preliminares

En este capítulo introducimos definiciones y resultados clásicos que serán utilizados en el texto.

1.1. Definiciones y notación.

Definición 1.1.1. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio Lipschitz acotado, dados $p \geq 1$ y $k \geq 1$ definimos el espacio de Sobolev

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

que es un espacio de Banach con la norma $\|v\|_{W^{1,p}}^p := \|v\|_{L^p}^p + \sum_{i \leq k} \|D^i v\|_{L^p(\Omega)}^p$, donde las derivadas son en sentido débil.

Sea $m \in \mathbb{N}$ definimos:

- $W^{k,p}(\Omega; \mathbb{R}^m) := (W^{k,p}(\Omega))^m$
- $H^k(\Omega) := W^{k,2}(\Omega)$
- $H^k(\Omega; \mathbb{R}^m) := (H^k(\Omega))^m$.

También dado $\Gamma_D \subset \partial\Omega$ definimos

$$W_D^{k,p}(\Omega) := \{v \in W^{k,p}(\Omega) : v|_{\Gamma_D} = 0\},$$

en el caso $\Gamma_D = \partial\Omega$ lo notaremos $W_0^{k,p}(\Omega)$. Análogamente se definen $H_D^k(\Omega)$ y $H_0^k(\Omega)$.

Observación 1.1.2 (Teorema de las trazas). Observar que por definición $v \in W_D^{1,p}(\Omega) \subset L^p(\Omega)$ es una clase de equivalencia de funciones y Γ_D tiene medida cero respecto a la medida de Lebesgue en \mathbb{R}^d , por lo que $v|_{\Gamma_D}$ en el sentido usual podría tener valores arbitrarios.

El teorema de las trazas nos dice que dado $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ Lipschitz, existe un operador lineal acotado $T : W^{1,p}(\Omega) \rightarrow L^p(\partial\Omega)$ tal que si $v \in C^0(\bar{\Omega}) \cap W^{1,p}(\Omega)$ entonces $Tv = v|_{\partial\Omega}$, es decir, generaliza la noción de extender al borde. Entonces con $v|_{\Gamma_D} = 0$ estamos diciendo $(Tv)|_{\Gamma_D} = 0$.

Definición 1.1.3. Dados $x, y \in \mathbb{R}^d$ definimos el **producto interno usual** como

$$x \cdot y := x^T y,$$

con respectiva norma inducida (la norma euclídea)

$$|x| := \sqrt{x \cdot x}.$$

Dadas $B, C \in \mathbb{R}^{d \times d}$ definimos el **producto de Fobrenius** como

$$B \cdot C := \text{tr}(B^T C)$$

con respectiva norma inducida (llamada **norma de Frobenius**)

$$|B| := \sqrt{B \cdot B}.$$

Notaremos a los dos de igual manera y salvo que se diga lo contrario para $d \geq 1$ consideraremos a \mathbb{R}^d y $\mathbb{R}^{d \times d}$ munidos con esos productos. También, salvo que se diga lo contrario, $\|\cdot\|$ y $\langle \cdot, \cdot \rangle$ notarán la norma y producto interno en L^2 respectivamente.

Enunciamos ahora algunos resultados clásicos sobre los espacios de Sobolev que vamos a utilizar. Las demostraciones pueden ser encontradas en [5, Capítulo 5].

Teorema 1.1.4 (Desigualdad de Poincaré). *Sea $1 \leq p < \infty$ y $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio Lipschitz acotado, entonces existe una constante $c > 0$, que depende solo de p y Ω , tal que*

$$\|v\|_{L^p(\Omega)} \leq c \|\nabla v\|_{L^p(\Omega)}$$

para toda $v \in W_D^{1,p}(\Omega)$.

Teorema 1.1.5 (Encajes de Sobolev). *Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio acotado con borde C^1 . Supongamos que $u \in W^{k,p}(\Omega)$.*

1. *Si $k < \frac{d}{p}$, entonces $u \in L^q(\Omega)$ para $q \geq 1$ tal que $\frac{1}{q} = \frac{1}{p} - \frac{k}{d}$. Además,*

$$\|u\|_{L^q(\Omega)} \leq C \|u\|_{W^{k,p}(\Omega)},$$

donde C depende solo de k, p, d y Ω .

2. *Si $k > \frac{d}{p}$, entonces $u \in C^{k - [\frac{d}{p}] - 1}(\bar{\Omega})$. Además,*

$$\|u\|_{C^{k - [\frac{d}{p}] - 1}(\bar{\Omega})} \leq C \|u\|_{W^{k,p}(\Omega)},$$

donde C depende solo de k, p, d y Ω .

Lema 1.1.6. *Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio acotado con borde C^1 . Supongamos que $1 \leq p < d$, entonces el encaje*

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

es compacto, i.e., toda sucesión acotada en $W^{k,p}(\Omega)$ tiene una subsucesión convergente en $L^p(\Omega)$.

Observación 1.1.7. ■ *El general el teorema 1.1.5 se enuncia en una forma más fuerte, donde el segundo encaje es en un espacio de Hölder [5, Sección 5.6, teorema 6].*

■ *El lema 1.1.6 es un caso particular del Teorema de Compacidad de Rellich-Kondrachov [5, Sección 5.7, teorema 1].*

1.2. Análisis

Sea $(X, \|\cdot\|)$ un espacio de Banach con dual X' y $(H, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ un espacio de Hilbert con dual H' .

Definición 1.2.1. Sea $\{x_n\} \subset X$ una sucesión, decimos que **converge débilmente** a cierto $x_0 \in X$ y lo denotamos $x_n \rightharpoonup x_0$ sii $\varphi(x_n) \rightarrow \varphi(x_0)$ para toda $\varphi \in X'$.

Observación 1.2.2. Consideramos $X = L^2(\mathbb{R}^{\mathbb{N}})$ y $\{\delta_n\}_n$ tal que

$$\delta_n(j) = \begin{cases} 0 & \text{si } j \neq n \\ 1 & \text{si } j = n \end{cases}$$

Entonces $\|\delta_n\| = 1$ para todo $n \in \mathbb{N}$, luego $(\delta_n)_n \not\rightarrow 0$. Pero sí converge débilmente a 0 pues si $f = (f_1, \dots, f_k, \dots) \in X'$ tenemos que $\|f(\delta_n)\| = |f_n(1)|$ pero como $f \in X'$ se tiene $\|f(\delta_n)\| = |f_n(1)| \rightarrow 0$.

Ahora, para $F : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ damos dos definiciones que van a ser de interés.

Definición 1.2.3. Decimos que $F : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ es **débilmente semi continua por abajo** si para toda sucesión x_n débilmente convergente a x se tiene que

$$F(x) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} F(x_n).$$

Decimos que F es **coerciva** si para toda sucesión x_n tal que $\|x_n\| \rightarrow +\infty$ se tiene $F(x_n) \rightarrow \infty$.

Observación 1.2.4. Dado $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, sea $I : H^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$I(u) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx.$$

Por la igualdad

$$|\nabla u|^2 - |\nabla u_n|^2 + |\nabla(u - u_n)|^2 = 2\nabla u \cdot \nabla(u - u_n),$$

tenemos que

$$\int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx - \int_{\Omega} |\nabla u_n|^2 dx + \int_{\Omega} |\nabla(u - u_n)|^2 dx = 2 \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla(u - u_n) dx.$$

Luego si, $u_n \rightharpoonup u$,

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla(u - u_n) dx \rightarrow 0.$$

Entonces $I(u) - \liminf_{n \rightarrow \infty} I(u_n) \leq 0$, de donde I es débilmente semi continua por abajo.

Además es coerciva en $H_D^1(\Omega)$. En efecto, sea u_n tal que $\|u_n\|_{H_D^1(\Omega)} \rightarrow \infty$, por la desigualdad de Poincaré

$$\|u_n\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C I(u_n),$$

lo que implica la afirmación.

Análogamente se definen convergencia débil, semicontinuidad por abajo débil y coercividad para H con la norma inducida. Pero por el teorema de Riesz en este caso tenemos la siguiente caracterización.

Proposición 1.2.5. Sea $\{u_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subset H$ una sucesión. Entonces $u_n \rightharpoonup u$ si y solo si para todo $v \in H$ $\langle u_n, v \rangle \rightarrow \langle u, v \rangle$.

Ahora vamos a enunciar algunos resultados de convergencia débil para los espacios que aparecerán en el texto.

Proposición 1.2.6. *Consideremos $\{u_j\}_{j \in \mathbb{N}}, \{v_j\}_{j \in \mathbb{N}} \subset L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)$ tales que $v_j \rightharpoonup v$ y $u_j \rightarrow u$ en $L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)$ entonces $u_j \cdot v_j \rightharpoonup u \cdot v$ en $L^2(\Omega)$.*

Demostración. Sea $f \in L^2(\Omega)$, queremos probar que $\langle u_j \cdot v_j, f \rangle_{L^2(\Omega)} \rightarrow \langle u \cdot v, f \rangle_{L^2(\Omega)}$.

En efecto,

$$\begin{aligned} |\langle u_j \cdot v_j - u \cdot v, f \rangle_{L^2(\Omega)}| &= |\langle u_j \cdot v_j - u \cdot v_j + u \cdot v_j - u \cdot v, f \rangle_{L^2(\Omega)}| \\ &\leq |\langle u_j - u, v_j f \rangle_{L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)}| + |\langle v_j - v, u f \rangle_{L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)}| \\ &\leq \|u_j - u\|_{L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)} \|v_j f\|_{L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)} + |\langle v_j - v, u f \rangle_{L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)}| \\ &\rightarrow 0 \quad \text{cuando } j \rightarrow \infty, \end{aligned}$$

ya que como $\{v_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ converge débilmente y $f \in L^2(\Omega)$ entonces $\{v_j f\}_{j \in \mathbb{N}}$ está acotada en $L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)$, y por otro lado $\|u_j - u\|_{L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)} \rightarrow 0$ si $j \rightarrow \infty$. Por último como $\{v_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ converge débilmente a v entonces $|\langle v_j - v, u f \rangle_{L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)}| \rightarrow 0$ si $j \rightarrow \infty$. \square

Proposición 1.2.7. *Sean $1 \leq p \leq \infty$ y $\{u_j\}_{j \in \mathbb{N}} \subset W^{1,p}(\Omega; \mathbb{R}^m)$ una sucesión. Entonces $u_j \rightarrow u$ en $L^p(\Omega; \mathbb{R}^m)$ y $\nabla u_j \rightharpoonup \nabla u$ en $L^p(\Omega; \mathbb{R}^{d \times m})$ si i. $u_j \rightharpoonup u$ en $W^{1,p}(\Omega; \mathbb{R}^m)$.*

Demostración. El directo es claro por definición.

Para el recíproco, tenemos que $\nabla u_j \rightharpoonup \nabla u$ en $L^p(\Omega; \mathbb{R}^{d \times m})$ y que $u_j \rightharpoonup u$ en $L^p(\Omega; \mathbb{R}^m)$. Supongamos que existe una subsucesión $\{u_{j_n}\}$ tal que $u_{j_n} \not\rightharpoonup u$ en $L^p(\Omega; \mathbb{R}^m)$. Como $\{u_{j_n}\}$ es acotada, por el lema 1.1.6, $u_{j_n} \rightharpoonup v \neq u$ en $L^p(\Omega; \mathbb{R}^m)$, pero esto es absurdo pues $u_j \rightharpoonup u$ en $W^{1,p}(\Omega; \mathbb{R}^m)$. Luego, $u_j \rightarrow u$ en $L^p(\Omega; \mathbb{R}^m)$. \square

1.3. Método de Elementos Finitos.

El método de elementos finitos (MEF) es una técnica utilizada para aproximar soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. La idea básica del MEF es cambiar la formulación variacional a espacios de dimensión finita (*métodos de Galerkin*) y para estos espacios de dimensión finita se utilizan funciones polinómicas a trozos, dividiendo el dominio del problema en finitos subdominios más pequeños y más manejables llamados elementos finitos.

En esta sección vamos a dar una introducción al método en un contexto más particular (el problema de Poisson) y presentaremos el método brevemente en un contexto más general.

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio Lipschitz acotado y $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ donde Γ_D es cerrado y tiene medida (de superficie) positiva. También consideramos $u_D \in C^0(\Gamma_D)$ y asumimos que admite una extensión a una función $\tilde{u}_D \in H^1(\Omega)$, $g \in L^2(\Gamma_N)$ y $f \in L^2(\Omega)$. Consideramos el problema de Poisson con condición de Dirichlet u_D y condición de Neumann g :

$$\begin{cases} \Delta u = -f \\ u|_{\Gamma_D} = u_D \\ \partial_n u|_{\Gamma_N} = g \end{cases} \quad (1.1)$$

Observar que si \tilde{u} satisface (1.1) entonces $u := \tilde{u} - \tilde{u}_D$ cumple $\Delta u = -f - \Delta \tilde{u}_D$, $u|_{\Gamma_D} = 0$ y $\partial_n u|_{\Gamma_N} = g - \partial_n \tilde{u}_D$, por lo que reemplazando f y g por $f + \Delta \tilde{u}_D$ y $g - \partial_n \tilde{u}_D$ respectivamente, podemos suponer $u_D = 0$.

Formulación débil.

Recordamos que si $u \in C^2(\Omega) \cap C^0(\bar{\Omega})$ cumple las tres igualdades en (1.1) entonces integrando por partes en la primer igualdad de (1.1) obtenemos que:

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx + \int_{\Gamma_N} g v \, ds \quad \text{para toda } v \in H_D^1(\Omega), \quad (\text{V})$$

que es la forma débil del problema de Poisson. Equivalentemente, la solución de (V) es el minimizante en $H_D^1(\Omega)$ de la energía

$$I(u) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla u|^2 \, dx - \int_{\Omega} f u \, dx - \int_{\Gamma_N} g u \, ds.$$

Esta es la formulación débil de (1.1) y tenemos:

Teorema 1.3.1 (Existencia y unicidad). *Existe un único minimizante $u \in H_D^1(\Omega)$ de I , es solución de (V) y cumple*

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \leq c(\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|g\|_{L^2(\Gamma_N)}).$$

donde $c > 0$ es una constante que depende solo de Ω .

Aproximación numérica.

Vamos a usar la formulación débil (V) para hallar una aproximación numérica u_h en $H_D^1(\Omega)$ de u para $h > 0$. Para esto vamos a seguir la idea que dimos en la introducción a la sección. Supongamos ahora que Ω es poligonal.

Definición 1.3.2. *Una triangulación de Ω es un conjunto $\mathcal{T}_h = T_1, \dots, T_R$ de d -símplices (intervalos cerrados, triángulos o tetraedros para $d = 1, 2, 3$, respectivamente) que llamamos elementos, tales que $\bar{\Omega} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} T$ y la intersección del interior de dos distintos es vacía.*

Para un elemento T definimos $h_T := \text{diam}(T)$ y $\rho_T > 0$ como el diámetro de la bola más grande inscrita en T .

También podemos considerar una familia de triangulaciones $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$, y el índice h lo definimos como $h = \max_{T \in \mathcal{T}_h} h_T$.

Nos van a interesar las familias de triangulaciones que no sean arbitrariamente agudas, es decir, que los ángulos de los elementos estén uniformemente acotados por debajo.

Definición 1.3.3. *Decimos que una familia de triangulaciones $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ es regular si existe una constante $c > 0$ tal que $\sup_{h>0} \max_{T \in \mathcal{T}_h} \frac{h_T}{\rho_T} \leq c$.*

Definición 1.3.4. *Para una triangulación \mathcal{T}_h , definimos \mathcal{N}_h como el conjunto de los vértices de los elementos, a los que llamamos nodos.*

Vamos a aproximar una solución de (V) mediante funciones lineales a trozos continuas (lineales en los elementos) en subespacios de $H^1(\Omega)$ de dimensión finita.

Definición 1.3.5. *Definimos el espacio de funciones lineales a trozos asociado a la triangulación \mathcal{T}_h como*

$$\mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h) = \{v_h \in C^0(\bar{\Omega}) : v_h|_T \in P_1(T) \text{ para todo } T \in \mathcal{T}_h\}.$$

A su vez, definimos el subconjunto de $\mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)$ que satisfacen condición de Dirichlet homogénea en Γ_D como

$$\mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h) = \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h) \cap H_D^1(\Omega).$$

Consideramos la familia de funciones $\{\varphi_z : z \in \mathcal{N}_h\} \subset \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)$ tales que

$$\varphi_z(y) = \begin{cases} 1 & \text{si } y = z \\ 0 & \text{si } y \neq z \end{cases}$$

para todos $z, y \in \mathcal{N}_h$.

Como una función lineal queda determinada por cuanto vale en los vértices de un símlice, tenemos que $\{\varphi_z : z \in \mathcal{N}_h\}$ es una base de $\mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)$, y se cumple

$$v_h = \sum_{z \in \mathcal{N}_h} v_h(z) \varphi_z$$

para toda $v_h \in \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)$. Además, dada $v \in C^0(\bar{\Omega})$ definimos su interpolación nodal como

$$\mathcal{I}_h v = \sum_{z \in \mathcal{N}_h} v(z) \varphi_z.$$

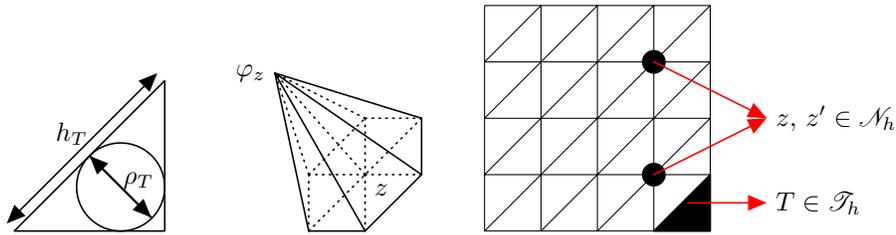


Figura 1.1: Primero definición de h_T y ρ_T , a la derecha la función base en z y al final un ejemplo de triangulación.

Ahora consideremos la siguiente aproximación de (V): hallar $u_h \in \mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)$ tal que

$$\int_{\Omega} \nabla u_h \cdot \nabla v_h \, dx = \int_{\Omega} f v_h \, dx + \int_{\Gamma_N} g v_h \, ds \quad \text{para toda } v_h \in \mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h). \quad (\text{V}_h)$$

Esto es equivalente a que

$$\int_{\Omega} \nabla u_h \cdot \nabla \varphi_y \, dx = \int_{\Omega} f \varphi_y \, dx + \int_{\Gamma_N} g \varphi_y \, ds \quad \text{para toda } \varphi_y \in \{\varphi_z : z \in \mathcal{N}_h\}.$$

Tenemos que $u_h = \sum_{z \in \mathcal{N}_h} u_h(z) \varphi_z$, entonces

$$\sum_{z \in \mathcal{N}_h} u_h(z) \int_{\Omega} \nabla \varphi_z \cdot \nabla \varphi_y \, dx = \int_{\Omega} f \varphi_y \, dx + \int_{\Gamma_N} g \varphi_y \, ds \quad \text{para toda } \varphi_y \in \{\varphi_z : z \in \mathcal{N}_h\},$$

equivalentemente,

$$\sum_{z \in \mathcal{N}_h} \langle \nabla \varphi_z, \nabla \varphi_y \rangle_{L^2(\Omega)} u_h(z) = \langle f, \varphi_y \rangle_{L^2(\Omega)} + \langle g, \varphi_y \rangle_{L^2(\Gamma_D)} \quad \text{para toda } \varphi_y \in \{\varphi_z : z \in \mathcal{N}_h\}.$$

Entonces si tomamos la matriz $(A)_{yz} = \langle \nabla \varphi_z, \nabla \varphi_y \rangle_{L^2(\Omega)}$, que llamamos la *matriz de rigidez*, y el vector $b_y = \langle f, \varphi_y \rangle_{L^2(\Omega)} + \langle g, \varphi_y \rangle_{L^2(\Gamma_D)}$ entonces $(U_h)_z = u_h(z)$ resuelve el sistema de ecuaciones

$$AU_h = b.$$

Observar que A es simétrica y es la matriz asociada en $\{\varphi_z : z \in \mathcal{N}_h\}$ a la forma bilineal $a : \mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h) \times \mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h) \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$a(w_h, v_h) = \int_{\Omega} \nabla w_h \cdot \nabla v_h \, dx$$

y tenemos, por la desigualdad de Poincaré, que $a(v_h, v_h) = |v_h|_{H^1(\Omega)}^2 \geq c|v_h|_{H^1(\Omega)}^2$. Luego a es definida positiva, y por lo tanto A definida positiva. Entonces el sistema tiene solución y es única, de donde existe un único $u_h \in \mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)$ que resuelve (V_h) .

Observación 1.3.6. *Análogamente, u_h es el mínimo de I en el espacio $\mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)$.*

De (V) y (V_h) obtenemos que

$$\int_{\Omega} \nabla(u - u_h) \cdot \nabla v_h \, dx = 0$$

para toda $v_h \in \mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)$. Entonces la aproximación numérica u_h es la proyección en H^1 al subespacio $\mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)$ de la solución exacta $u \in H_D^1(\Omega)$.

Se puede probar que dada una familia de triangulaciones regulares, $u_h \rightarrow u$ en $H_D^1(\Omega)$ cuando $h \rightarrow 0$, además si $u \in H^2(\Omega)$ entonces

$$|u_h - u|_{H^1(\Omega)} \leq ch|u|_{H^2(\Omega)},$$

esto es consecuencia del teorema 1.3.13.

En general, el método consiste en buscar soluciones de la forma variacional en subespacios de funciones de dimensión finita. Pueden ser otros tipos de elementos (cubos, formas curvas, en general conjuntos cerrados) y también polinomios de mayor grado en los elementos.

1.3.1. Elementos finitos abstractos.

En esta sección vamos a dar marco más general del método y enunciamos algunas estimaciones de error. Luego volvemos a los elementos con polinomios de grado 1 vistos en la sección anterior para probar algunas estimaciones que utilizaremos en el resto del texto.

Sea $T \subset \mathbb{R}^d$ cerrado, notamos como $P_k(T)$ a los polinomios de grado menor o igual a k en T .

Definición 1.3.7. *Un elemento finito es una 3-upla (T, P_T, K_T) donde P_T es un espacio de polinomios de $\dim P_T = R$ y $K_T = \{\chi_1, \dots, \chi_R\}$ es un conjunto de funcionales lineales en $C^\infty(T)$ tales que:*

- a. Si $q \in P_T$ cumple $\chi_i(q) = 0$ para todo $\chi_i \in K_T$ entonces $q = 0$.
- b. Existe un $m \geq 1$ tal que $P_{m-1}(T) \subset P_T$.
- c. Existe $p \in [1, \infty]$ tal que todo $\chi_i \in K_T$ se extiende a un operador lineal en $W^{m,p}(T)$.

Como $\dim(P_T) = R$ y por (a.), existe una única base $\{\varphi_i\}_{i=1}^R \subset P_T$ tal que $\chi_j(\varphi_i) = \delta_{ji}$ para $i, j \in \{1, \dots, R\}$. Ahora dada $v \in W^{m,p}(T)$, usando (c.), definimos el interpolado $I_T v$ de v como

$$I_T v := \sum_{j=1}^R \chi_j(v) \varphi_j.$$

Observar que $I_T v$ es el único polinomio en P_T tal que $\chi(I_T v) = \chi(v)$ para toda $\chi \in K_T$.

Observación 1.3.8. Consideramos el símplex $T = \text{conv}\{z_0, \dots, z_d\} \subset \mathbb{R}^d$, $P_T = P_1(T)$ y $K_T = \{\chi_i\}_{i \in \{0, \dots, d\}}$ tal que $\chi_i(v) = v(z_i)$ para $v \in C^\infty(T)$. Entonces con $m = 2$, $p = 2$ y $d \leq 3$ (esto último asegura el encaje $H^2(T) \subset C^0(T)$, recordar el teorema 1.1.5), (T, P_T, K_T) es un elemento finito y corresponde al definido en la sección anterior.

Además, dada $v \in C^\infty(T)$ la función definida en la sección anterior

$$\mathcal{I}_h v|_T = \sum_{i=0}^d v(z_i) \varphi_{z_i},$$

cumple $\mathcal{I}_h v|_T = v(z_i) = \chi_i(v)$ entonces $\mathcal{I}_h v|_T = I_T v$. Luego, el interpolado definido es exactamente el de la sección anterior.

Enunciamos sin demostración un resultado sobre la estabilidad respecto a semi normas, el cual permite probar la estabilidad del interpolado.

Teorema 1.3.9 (Lema de Bramble-Hilbert). Sea $1 \leq p < \infty$ y $F : W^{k,p}(T) \rightarrow \mathbb{R}$ una funcional tal que existen $c_1, c_2 > 0$ tales que para toda $v, w \in W^{k,p}(T)$ tenemos $|F(v)| \leq c_1 \|v\|_{W^{k,p}(T)}$ y $|F(v+w)| \leq c_2(|F(v)| + |F(w)|)$, y supongamos que F se anula en $P_{k-1}(T)$. Entonces existe $c_0 > 0$ tal que

$$|F(v)| \leq c_0 c_1 c_2 \|D^k v\|_{L^p(T)} = c_0 c_1 c_2 |v|_{W^{k,p}(T)}$$

para toda $v \in W^{k,p}(T)$.

Demostración. [3, Teorema 3.1] □

Proposición 1.3.10. Sea (T, P_T, K_T) un elemento finito y $|\cdot|_S$ una semi norma en $W^{k,p}(T)$ con $|v|_S \leq c_S \|v\|_{W^{k,p}(T)}$ para toda $v \in W^{k,p}(T)$. Entonces

$$|v - I_T v|_S \leq c_S |v|_{W^{k,p}(T)}$$

para toda $v \in W^{k,p}(T)$.

Demostración. Definimos $F(v) = |v - I_T v|_S$, veamos que F está en las hipótesis del Lema de Bramble-Hilbert.

Tenemos $I_T v = \sum_{j=1}^R \chi_j(v) \varphi_j$ y por definición existe una constante $c_b > 0$ tal que $|\chi_j(v)| \leq c_b \|v\|_{W^{k,p}(T)}$ para toda $v \in W^{k,p}(T)$, entonces

$$|F(v)| \leq |v|_S + |I_T v|_S \leq (c_S + c_b \max_{j \in \{1, \dots, R\}} |\varphi_j|_S) \|v\|_{W^{k,p}(T)},$$

entonces F está acotada. Por otro lado, como I_T es lineal $|F(v+w)| \leq |F(v)| + |F(w)|$. □

Lineales a trozos.

En adelante consideramos los elementos finitos dados por las definiciones 1.3.2, 1.3.3, 1.3.4 y 1.3.5.

Proposición 1.3.11 (Elemento modelo). *Sea $\hat{T} = \text{conv}\{0, e_1, \dots, e_d\}$ donde $\{e_i\}$ denota la base canónica en \mathbb{R}^d , denotamos al conjunto de sus vértices como $\widehat{\mathcal{N}}$, y sea $1 \leq p \leq \infty$.*

Para una triangulación \mathcal{T}_h de Ω y cada $T \in \mathcal{T}_h$, existe una transformación afín invertible $\phi_T : \hat{T} \rightarrow T$ dado por $\phi_T(x) = Bx + b$ tal que

$$\max_{i,j=1,\dots,d} |b_{ij}| \leq ch_T, \quad \max_{i,j=1,\dots,d} |b_{ij}^{(-1)}| \leq c\rho_T^{-1},$$

donde b_{ij} y $b_{ij}^{(-1)}$ denotan las entradas de B y B^{-1} respectivamente. Además para $v \in W^{k,p}(T)$ y $\hat{v} = v \circ \phi_T \in W^{k,p}(\hat{T})$, tenemos

$$|v|_{W^{k,p}(T)} \leq c\rho_T^{-k} |\det B|^{\frac{1}{p}} |\hat{v}|_{W^{k,p}(\hat{T})}, \quad |\hat{v}|_{W^{k,p}(T)} \leq ch_T^k |\det B|^{-\frac{1}{p}} |v|_{W^{k,p}(T)}.$$

Si $p = \infty$, entonces

$$|v|_{W^{k,\infty}(T)} \leq c\rho_T^{-k} |\hat{v}|_{W^{k,\infty}(\hat{T})}, \quad |\hat{v}|_{W^{k,\infty}(T)} \leq ch_T^k |v|_{W^{k,\infty}(T)}.$$

También para todo $m \leq k$,

$$|v - I_T v|_{W^{m,p}(T)} \leq c_I \frac{h_T^k}{\rho_T^m} |v|_{W^{k,p}(T)}.$$

Demostración. La matriz B queda definida por $Be_i = z_i - z_0$ para todo $i = 1, \dots, d$, y definiendo $\phi_T(x) = Bx + z_0$ tenemos la primera parte.

Ahora sea $v \in W^{k,p}(T)$. Entonces, por el teorema del cambio de variable y la igualdad $D^\alpha(v \circ \phi_T) = (D^\alpha v) \circ \phi_T B^k$ para un multi-índice de orden k , tenemos

$$\begin{aligned} \int_T |D^\alpha v|^p dx &= \int_{\phi_T^{-1}(T)} |(D^\alpha v) \circ \phi_T|^p |\det B| dx = \int_{\hat{T}} |D^\alpha \hat{v} B^{-k}|^p |\det B| dx \\ &\leq c_1 |B^{-kp}| |\det B| \int_{\hat{T}} |D^\alpha \hat{v}|^p dx \leq c_1 |B^{-1}|^{kp} |\det B| \int_{\hat{T}} |D^\alpha \hat{v}|^p dx \\ &\leq c_2 \rho_T^{-kp} |\det B| \int_{\hat{T}} |D^\alpha \hat{v}|^p dx \end{aligned}$$

y la segunda desigualdad es análoga. Como T y \hat{T} tienen medida finita, esto también prueba el caso $p = \infty$.

Por último, usando la proposición 1.3.10 para la semi norma $|\cdot|_{W^{k,p}(T)}$ y las estimaciones de arriba, deducimos

$$\begin{aligned} |v - I_T v|_{W^{m,p}(T)} &\leq c\rho_T^{-m} |\det B|^{\frac{1}{p}} |\hat{v} - \widehat{I_T v}|_{W^{m,p}(\hat{T})} \\ &\leq c_2 \rho_T^{-m} |\det B|^{\frac{1}{p}} |\hat{v}|_{W^{k,p}(\hat{T})} \\ &\leq c_3 \frac{h_T^k}{\rho_T^m} |\det B|^{\frac{1}{p}} |\det B|^{-\frac{1}{p}} |v|_{W^{k,p}(T)} \\ &= c_3 \frac{h_T^k}{\rho_T^m} |v|_{W^{k,p}(T)} \end{aligned}$$

□

Observación 1.3.12. 1. En la prueba anterior usamos que $I_{\hat{T}}\hat{v} = \widehat{I_T v}$. En efecto, si $\widehat{\mathcal{N}} \subset \hat{T}$ son los vértices de \hat{T} y $\{\psi_{\hat{z}}\}_{\hat{z} \in \widehat{\mathcal{N}}}$ son las funciones base, entonces $\psi_{\hat{z}} = \varphi_{\phi_T(\hat{z})} \circ \phi_T$ para todo $\hat{z} \in \widehat{\mathcal{N}} \subset \hat{T}$. Por lo tanto, como ϕ_T define biyección entre $\widehat{\mathcal{N}}$ y $\mathcal{N}_h \cap T$, tenemos

$$I_{\hat{T}}\hat{v} = \sum_{\hat{z} \in \widehat{\mathcal{N}}} \hat{v}(\hat{z}) \psi_{\hat{z}} = \sum_{\hat{z} \in \widehat{\mathcal{N}}} (v \circ \phi_T)(\hat{z}) \varphi_{\phi_T(\hat{z})} \circ \phi_T = \sum_{z \in \mathcal{N}_h \cap T} v(z) \varphi_z \circ \phi_T = \widehat{I_T v}.$$

Propiedad que en otro tipo de elementos finitos no es tan obvia.

2. Sea $A = \max_{T \in \mathcal{T}_h} \frac{h_T}{\rho_T}$. Usando la desigualdad $|\det B| \leq c|B|^d \leq ch_T^d$, tenemos

$$\begin{aligned} |v|_{W^{k,p}(T)} &\leq c' \rho_T^{-k} |\det B|^{\frac{1}{p}} |\hat{v}|_{W^{k,p}(\hat{T})} \\ &\leq c' h_T^k \rho_T^{-k} h_T^{-k} ch_T^{\frac{d}{p}} |\hat{v}|_{W^{k,p}(\hat{T})} \\ &\leq c' A^k c h_T^{-k+\frac{d}{p}} |\hat{v}|_{W^{k,p}(\hat{T})} = C_1 h_T^{-k+\frac{d}{p}} |\hat{v}|_{W^{k,p}(\hat{T})}, \end{aligned}$$

donde C_1 depende de $p, d, k \in \mathbb{N}$ y de la triangulación. También usando la desigualdad

$$|\det B^{-1}| \leq c|B^{-1}|^d \leq c\rho_T^{-d} = \frac{h_T^d}{\rho_T^d} \frac{c}{h_T^d} \leq \frac{A^d c}{h_T^d},$$

deducimos

$$\begin{aligned} |\hat{v}|_{W^{k,p}(\hat{T})} &\leq c' h_T^k |\det B|^{-\frac{1}{p}} |v|_{W^{k,p}(T)} \\ &\leq c' h_T^k \frac{c''}{h_T^{\frac{d}{p}}} |v|_{W^{k,p}(T)} = C_2 h_T^{k-\frac{d}{p}} |v|_{W^{k,p}(T)}, \end{aligned}$$

donde C_2 depende de $p, d, k \in \mathbb{N}$ y de la triangulación.

En resumen, obtenemos las estimaciones

$$|v|_{W^{k,p}(T)} \leq C h_T^{-k+\frac{d}{p}} |\hat{v}|_{W^{k,p}(\hat{T})}, \quad |\hat{v}|_{W^{k,p}(\hat{T})} \leq C h_T^{k-\frac{d}{p}} |v|_{W^{k,p}(T)},$$

donde C depende de $p, d, k \in \mathbb{N}$ y de la triangulación. En particular, si $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ es una familia de triangulaciones regular entonces C solo depende de $p, d, k \in \mathbb{N}$.

La proposición permite deducir que

$$|v - \mathcal{I}_h v|_{W^{m,p}(T)} \leq c_I \frac{h_T^k}{\rho_T^m} |v|_{W^{k,p}(T)},$$

para toda $v \in W^{k,p}(\Omega)$ y $T \in \mathcal{T}_h$. En particular, si $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ es una familia de triangulaciones regular y $\max_{T \in \mathcal{T}_h} h_T \leq ch$, entonces

$$|v - \mathcal{I}_h v|_{W^{m,p}(T)} \leq c_I \frac{h_T^k}{\rho_T^m} |v|_{W^{k,p}(T)} = c_I h_T^{k-m} \frac{h_T^m}{\rho_T^m} |v|_{W^{k,p}(T)} \leq c' h^{k-m} |v|_{W^{k,p}(T)}, \quad (1.2)$$

donde c' depende de la dimensión d y la constante en la definición 1.3.3.

Teorema 1.3.13 (Estabilidad de la interpolación nodal.). Sean $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ una familia de triangulaciones regular tal que $\max_{T \in \mathcal{T}_h} h_T \leq ch$ y $v \in W^{2,p}(\Omega)$. Entonces para todo $\frac{d}{2} < p \leq \infty$ tenemos

$$\|v - \mathcal{I}_h v\|_{L^p(\Omega)} \leq ch^2 |v|_{W^{2,p}(\Omega)}, \quad \|\nabla(v - \mathcal{I}_h v)\|_{L^p(\Omega)} \leq ch |v|_{W^{2,p}(\Omega)}$$

Demostración. Sean $h > 0$ y $T \in \mathcal{T}_h$, veamos que

$$h^{-1} \|v - \mathcal{I}_h v\|_{L^p(\Omega)} + \|\nabla(v - \mathcal{I}_h v)\|_{L^p(\Omega)} \leq ch |v|_{W^{2,p}(\Omega)}$$

para todo $\frac{d}{2} < p \leq \infty$. En efecto, usando (1.2),

$$h^{-1} \|v - \mathcal{I}_h v\|_{L^p(T)} + \|\nabla(v - \mathcal{I}_h v)\|_{L^p(T)} \leq h^{-1} c' h^{2-0} |v|_{W^{2,p}(T)} + c' h^{2-1} |v|_{W^{2,p}(T)} = ch |v|_{W^{2,p}(T)},$$

elevando a la p y sumando en todos los T tenemos las desigualdades para $1 \leq p < \infty$. Si $p = \infty$, entonces usando

$$\|v - \mathcal{I}_h v\|_{L^\infty(\Omega)} = \max_{T \in \mathcal{T}_h} \|v - \mathcal{I}_h v\|_{L^\infty(T)}, \quad \|\nabla(v - \mathcal{I}_h v)\|_{L^\infty(\Omega)} = \max_{T \in \mathcal{T}_h} \|\nabla(v - \mathcal{I}_h v)\|_{L^\infty(T)},$$

tenemos la desigualdad. \square

Observación 1.3.14. *La necesidad de $p > \frac{d}{2}$ es para asegurar que las evaluaciones nodales de v tengan sentido, pues en tal caso $v \in C^0(\overline{\Omega})$.*

Terminamos la sección con un resultado de estimaciones de normas que será útil más adelante.

Definición 1.3.15. *Decimos que una familia de triangulaciones $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ es quasi-uniforme si existe $c > 0$ tal que $c^{-1}h \leq h_T \leq ch$ para todo $h > 0$ y todo $T \in \mathcal{T}_h$.*

Teorema 1.3.16 (Estimaciones inversas). *Sean $v_h \in \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)$ y $r, p \in [1, \infty]$. Se tiene*

$$\|\nabla v_h\|_{L^p(T)} \leq ch_T^{-1} \|v_h\|_{L^p(T)}, \quad \|v_h\|_{L^p(T)} \leq ch_T^{d(r-p)/rp} \|v_h\|_{L^r(T)},$$

donde c depende de p, r y d . Si además $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ es quasi-uniforme, entonces

$$\|\nabla v_h\|_{L^p(\Omega)} \leq ch^{-1} \|v_h\|_{L^p(\Omega)}, \quad \|v_h\|_{L^p(\Omega)} \leq ch^{\min\{0, d(r-p)/rp\}} \|v_h\|_{L^r(\Omega)}.$$

Demostración. Consideremos el elemento modelo \hat{T} (Proposición 1.3.11). Consideramos el espacio $\mathcal{L}^1(\hat{T})/\mathbb{R}$, es decir, cocientamos por $v \in \mathcal{L}^1(\hat{T})$ tal que $\int_{\hat{T}} v_h dx = 0$. Entonces $\bar{v} \mapsto \|\nabla v\|_{L^p(\hat{T})}$ y $\bar{v} \mapsto \|v\|_{L^p(\hat{T})}$ son normas en $\mathcal{L}^1(\hat{T})/\mathbb{R}$ y por lo tanto equivalentes (pues $\dim(\mathcal{L}^1(\hat{T})) < \infty$) con alguna constante c que no depende de h_T . Si tomamos $\tilde{v} = |\hat{T}|^{-1} \int_{\hat{T}} v dx$ tenemos

$$\|\nabla v\|_{L^p(\hat{T})} = \|\nabla(v - \tilde{v})\|_{L^p(\hat{T})} \leq c \|v - \tilde{v}\|_{L^p(\hat{T})} \leq c \|v\|_{L^p(\hat{T})}.$$

Ahora dada $v_h \in \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)$, por la proposición 1.3.11, obtenemos

$$\|\nabla v_h\|_{L^p(T)} \leq ch_T^{-1} |\det B|^{1/p} \|\nabla \hat{v}_h\|_{L^p(\hat{T})} \leq ch_T^{-1} |\det B|^{1/p} \|\hat{v}_h\|_{L^p(\hat{T})} = ch_T^{-1} \|v_h\|_{L^p(T)},$$

probando la desigualdad.

Para la segunda estimación observar nuevamente que $\|\cdot\|_{L^p(\hat{T})}$ y $\|\cdot\|_{L^r(\hat{T})}$ son equivalentes con alguna constante c' que no depende de h_T . Entonces, por la observación 1.3.12,

$$\|v_h\|_{L^p(T)} \leq C h_T^{\frac{d}{p}} \|\hat{v}_h\|_{L^p(\hat{T})} \leq C c' h_T^{\frac{d}{p}} \|\hat{v}_h\|_{L^r(\hat{T})} \leq c h_T^{\left(\frac{d}{p} - \frac{d}{r}\right)} \|v_h\|_{L^r(T)},$$

donde c depende de $p, k, d \in \mathbb{N}$.

Supongamos ahora que $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ es quasi-uniforme. Usando la primera estimación, elevando a la p y sumando en todos los $T \in \mathcal{T}_h$, obtenemos la tercera desigualdad.

Para la ultima desigualdad dividimos en dos casos. Si $p \geq r$, usando la desigualdad $(\sum_{j=1}^L |x_j|^r)^{\frac{1}{r}} \leq (\sum_{j=1}^L |x_j|^p)^{\frac{1}{p}}$ para $(x_1, \dots, x_L) \in \mathbb{R}^L$, esto es consecuencia de como se incluyen las p -bolas en \mathbb{R}^L . Entonces, por la segunda desigualdad,

$$\begin{aligned} \|v_h\|_{L^p(\Omega)} &= \left(\sum_{T \in \mathcal{T}_h} \|v_h\|_{L^p(T)}^p \right)^{1/p} \leq \left(\sum_{T \in \mathcal{T}_h} ch_T^{d(r-p)/rp} \|v_h\|_{L^r(T)} \right)^{1/p} \\ &\leq ch^{d(r-p)/rp} \left(\sum_{T \in \mathcal{T}_h} \|v_h\|_{L^r(T)}^p \right)^{1/p} \leq ch^{d(r-p)/rp} \left(\sum_{T \in \mathcal{T}_h} \|v_h\|_{L^r(T)}^r \right)^{1/r} \\ &\leq ch^{d(r-p)/rp} \|v_h\|_{L^r(\Omega)}. \end{aligned}$$

Si $p < r$, por la desigualdad de Hölder y el hecho de que Ω tiene medida finita,

$$\int_{\Omega} |v_h|^p dx \leq |\Omega|^{1/p-1/r} \left(\int_{\Omega} |v_h|^{p\frac{r}{p}} dx \right)^{\frac{p}{r}},$$

entonces,

$$\|v_h\|_{L^p(\Omega)} \leq c \|v_h\|_{L^r(\Omega)}$$

donde c depende de Ω , p y r . Lo que concluye la última estimación. □

Capítulo 2

Cristales líquidos nemáticos y energía de Oseen-Frank

La teoría clásica para describir el comportamiento de cristales líquidos es una teoría continua basada en los trabajos de Oseen (1933), Zocher (1933) y Frank (1958). Una simplificación de este modelo lleva naturalmente al estudio de los mapas armónicos y por esto es una buena motivación para este trabajo. Un cristal líquido es un estado de la materia que presenta características de un líquido convencional y de un sólido cristalino. Sus moléculas presentan cierta correlación como un sólido pero pueden fluir y adaptarse a su recipiente como un líquido.

En un cristal líquido nemático sus moléculas se parecen a varas todas de un largo similar, y éstas presentan una fuerte correlación en su orientación pero una débil correlación en su posición en el espacio.

2.1. Modelo de Oseen-Frank

Este modelo se basa en la idea de que las moléculas en un cristal líquido nemático se alinean preferentemente en una dirección común, que todas tienen la misma longitud y el hecho de que la interacción electromagnética entre moléculas alejadas es despreciable.

Supongamos que el material ocupa un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Modelamos la orientación media de cada molécula como un campo unitario

$$n : \Omega \rightarrow \mathbb{S}^2$$

que minimiza la energía dada por

$$I(u) := \int_{\Omega} \sigma(u, \nabla u) dx,$$

donde el dominio de σ es

$$D = \{(u, N) \in \mathbb{S}^2 \times \mathbb{R}^{3 \times 3} : N^T u = 0\}. \quad (2.1)$$

Habitualmente a la energía I se le llama energía elástica.

Para modelar las propiedades físicas de un cristal líquido nemático, vamos a suponer que σ satisface ciertas hipótesis: σ debe ser **independiente del marco de referencia**, debe **respetar las simetrías del material**, debe ser **par** y **definida positiva**.

La **independencia del marco de referencia** es que σ no dependa del marco de referencia por el que estemos mirando el material. Esto es, si tenemos un mapa $Q \in O(3)$ y $x^* = Qx$, definimos

$$n^*(x^*) := Qn(x),$$

y para que σ sea independiente del marco de referencia se tiene que dar

$$\sigma(n^*, \nabla n^*) = \sigma(n, \nabla n),$$

que es equivalente a que

$$\sigma(Qn, Q\nabla nQ^T) = \sigma(n, \nabla n).$$

Luego, decimos que σ es independiente del marco de referencia sii.

$$\sigma(Qu, QNQ^T) = \sigma(u, N) \text{ para toda } Q \in O(3), u \in \mathbb{S}^2, \text{ y } N^T u = 0. \quad (2.2)$$

Modelamos las moléculas de un cristal líquido nemático como varas, luego la orientación de las moléculas no se altera por una reflexión. Es decir, queremos que para todo $(u, N) \in D$

$$\sigma(u, N) = \sigma(-u, N).$$

Como dado $u \in \mathbb{S}^2$ tenemos que la reflexión respecto al plano ortogonal a u , $Q_u = Id - 2uu^T$ cumple que Q_u es simétrica y $Q_u \in O(3)$, luego usando (2.2):

$$\sigma(u, N) = \sigma(Q_u u, Q_u N Q_u) = \sigma((-Q_u)(-u), (-Q_u)N(-Q_u)) = \sigma(-u, N)$$

Por lo tanto, σ respeta las simetrías del material y es independiente del marco de referencia sii. cumple (2.2)

Recordemos que $n(p)$ es la orientación media de las moléculas en un cierto punto $p \in \Omega$. Generalmente, no deberíamos ser capaces de distinguir la cabeza de la cola para las moléculas de un cristal nemático. Luego las propiedades físicas de n no deberían ser distintas a las de $-n$ i.e. σ es par evaluada en $(n, \nabla n)$:

$$\sigma(n, \nabla n) = \sigma(-n, -\nabla n). \quad (2.3)$$

Por último si el cristal se encuentra inalterado, naturalmente debería relajarse hacia un estado no distorsionado. Llamamos orientación natural a la orientación media de este estado. Definimos formalmente una orientación natural como un campo $n : \Omega \rightarrow \mathbb{S}^2$ tal que

$$\sigma(n, \nabla n) = 0.$$

Queremos que este estado minimice la energía. Luego, para hacer precisa esta idea de orientación natural requerimos que σ satisfaga

$$\sigma(u, N) \geq 0 \quad \text{para todos } (u, N) \in D \quad (2.4)$$

2.1.1. Energía de Oseen-Frank

Nos dirigimos a describir las funciones $\sigma(n, N)$ que son polinomios cuadráticos en N . Enunciamos dos resultados auxiliares:

Lema 2.1.1. Sean $n \in \mathbb{S}^2$ y $\varphi(n, \cdot)$ una transformación lineal real definida en $L(n, \mathbb{R}^3) := \{N \in \mathbb{R}^{3 \times 3} : N^T n = 0\}$ dada por

$$\varphi(n, N) := k(n) + K(n) \cdot N + N \cdot \Lambda(n)[N],$$

donde $k(n) \in \mathbb{R}$, $K(n) \in L(n, \mathbb{R}^3)$ y $\Lambda(n)$ es una transformación lineal simétrica definida en $L(n, \mathbb{R}^3)$. Entonces φ satisface (2.2) si. existen $\alpha_0, \alpha_1, \beta_i \in \mathbb{R}$ con $i = 1, \dots, 4$ tales que

$$\varphi(n, N) = \alpha_0 + \alpha_1 P(n) \cdot N + \beta_1 (W(n) \cdot N)^2 + \beta_2 (P(n) \cdot N)^2 + \beta_3 N \cdot N + \beta_4 P(n)N \cdot NP(n), \quad (2.5)$$

donde $P(n) := Id - nn^T$ es la proyección ortogonal en n^\perp y $W(n)$ es tal que $W(n)v = n \times v$ para todo $v \in \mathbb{R}^3$.

Demostración. [7, Teorema 2.28] □

Observación 2.1.2. Recordar que dada $A \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ antisimétrica existe un vector $a \in \mathbb{R}^3$ (llamado vector axial) tal que $Av = a \times v$ para todo $v \in \mathbb{R}^3$ y $|A|^2 = 2|a|^2$. Además si A_1, A_2 son antisimétricas con respectivos vectores axiales a_1, a_2 entonces $A_1 \cdot A_2 = 2a_1 \cdot a_2$.

Lema 2.1.3. Sea $n : \Omega \rightarrow \mathbb{S}^2$ un campo C^1 . Entonces valen las igualdades:

$$(\nabla n)n = -n \times Rot(n), \quad (2.6)$$

$$|\nabla n|^2 = tr(\nabla n^2) + (n \cdot Rot(n))^2 + |n \times Rot(n)|^2. \quad (2.7)$$

Demostración. Consideramos la descomposición de ∇n en su parte simétrica y antisimétrica, i.e

$$\nabla n = A + S \quad (2.8)$$

con $A = \frac{\nabla n - (\nabla n)^T}{2}$ y $S = \frac{\nabla n + (\nabla n)^T}{2}$.

Si $n = (n_1, n_2, n_3)$, entonces

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial n_1}{\partial y} - \frac{\partial n_2}{\partial x} & \frac{\partial n_1}{\partial z} - \frac{\partial n_3}{\partial x} \\ \frac{\partial n_2}{\partial x} - \frac{\partial n_1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial n_2}{\partial z} - \frac{\partial n_3}{\partial y} \\ \frac{\partial n_3}{\partial x} - \frac{\partial n_1}{\partial z} & \frac{\partial n_3}{\partial y} - \frac{\partial n_2}{\partial z} & 0 \end{pmatrix},$$

por lo tanto el vector axial de A es $\frac{1}{2}Rot(n)$.

Ahora, como $n \cdot n = 1$, entonces

$$0 = \nabla(n \cdot n) = (\nabla n)^T n + (\nabla n)^T n = 2(\nabla n)^T n. \quad (2.9)$$

Luego, por (2.8),

$$0 = (\nabla n)^T n = -An + Sn \Rightarrow An = Sn,$$

y por tanto deducimos

$$(\nabla n)n = 2An = Rot(n) \times n = -n \times Rot(n).$$

Para probar (2.7), recordar que $A \cdot S = 0$ y por tanto

$$|\nabla n|^2 = |A|^2 + |S|^2. \quad (2.10)$$

Ahora, como $(AS + SA)^T = -SA - AS$, tenemos

$$\text{tr}(\nabla n^2) = \text{tr}(A^2 + AS + SA + S^2) = \text{tr}(A^2) + \text{tr}(S^2) = -|A|^2 + |S|^2,$$

de donde por (2.10)

$$|\nabla n|^2 = \text{tr}(\nabla n^2) + 2|A|^2 = \text{tr}(\nabla n^2) + |\text{Rot}(n)|^2 = \text{tr}(\nabla n^2) + (n \cdot \text{Rot}(n))^2 + |n \times \text{Rot}(n)|^2.$$

Arriba, usamos la identidad $|\text{Rot}(n)|^2 = (n \cdot \text{Rot}(n))^2 + |n \times \text{Rot}(n)|^2$. \square

Ahora estamos listos para enunciar el resultado principal de este capítulo, la **fórmula de Frank**.

Teorema 2.1.4. *Sea $n : \Omega \rightarrow \mathbb{S}^2$ un campo C^1 y sea $\sigma : D \rightarrow \mathbb{R}$ (recordar (2.1)) dada por*

$$\sigma(n, \nabla n) := k(n) + K(n) \cdot \nabla n + \nabla n \cdot \Lambda(n)[\nabla n],$$

donde k, K y Λ son como en el lema 2.1.1. Entonces, σ satisface (2.2), (2.3) y (2.4) si existen $k_i \in \mathbb{R}$ con $i = 1, \dots, 4$ tales que

$$\sigma(n, \nabla n) = k_1 \text{div}(n)^2 + k_2 (n \cdot \text{Rot}(n))^2 + k_3 |n \times \text{Rot}(n)|^2 + (k_2 + k_4) (\text{tr}[(\nabla n)^2] - \text{div}(n)^2) \quad (2.11)$$

Demostración. Por el lema 2.1.1, como σ cumple (2.2), cumple (2.5). Primero, observar que usando (2.9) se tiene

$$P(n) \cdot \nabla n = (Id - n n^T) \cdot \nabla n = Id \cdot \nabla n - (n n^T) \cdot \nabla n = \text{tr}(\nabla n) - \text{tr}((\nabla n)^T n n^T) = \text{div}(n). \quad (2.12)$$

Ahora, por definición, el vector axial de $W(n)$ es n , luego por la observación 2.1.2 y (2.8) se tiene

$$W(n) \cdot \nabla n = W(n) \cdot A = n \cdot \text{Rot}(n). \quad (2.13)$$

Por último, tenemos

$$P(n) \nabla n \cdot \nabla n P(n) = (Id - n n^T) \nabla n \cdot \nabla n (Id - n n^T) = \nabla n \cdot (\nabla n - \nabla n((n n^T))) = |\nabla n|^2 - |(\nabla n)n|^2,$$

entonces, por (2.6) y (2.7), deducimos

$$P(n) \nabla n \cdot \nabla n P(n) = \text{tr}(\nabla n^2) + (n \cdot \text{Rot}(n))^2. \quad (2.14)$$

Entonces, usando (2.5), (2.12), (2.13) y (2.14), tenemos

$$\begin{aligned} \sigma(n, \nabla n) &= \alpha_0 + \alpha_1 P(n) \cdot \nabla n + \beta_1 (W(n) \cdot \nabla n)^2 + \beta_2 (P(n) \cdot \nabla n)^2 + \beta_3 |\nabla n|^2 + \beta_4 P(n) \nabla n \cdot \nabla n P(n) \\ &= \alpha_0 + \alpha_1 \text{div}(n) + \beta_1 (n \cdot \text{Rot}(n))^2 + \beta_2 \text{div}(n)^2 + \beta_3 |\nabla n|^2 + \beta_4 (\text{tr}(\nabla n^2) + (n \cdot \text{Rot}(n))^2). \end{aligned}$$

Definimos:

$$\begin{cases} k_1 := \beta_2 + \beta_3 + \beta_4 \\ k_2 := \beta_1 + \beta_3 + \beta_4 \\ k_3 := \beta_3 \\ k_4 := -\beta_1 \end{cases}.$$

Entonces, usando (2.7),

$$\begin{aligned}
\sigma(n, \nabla n) &= \alpha_0 + \alpha_1 \operatorname{div}(n) - k_4(n \cdot \operatorname{Rot}(n))^2 + (k_1 - k_2 - k_4) \operatorname{div}(n)^2 + \\
&\quad + k_3 |\nabla n|^2 + (k_2 + k_4 - k_3)(\operatorname{tr}(\nabla n^2) + (n \cdot \operatorname{Rot}(n))^2) \\
&= \alpha_0 + \alpha_1 \operatorname{div}(n) + k_1 \operatorname{div}(n)^2 + k_2(\operatorname{tr}(\nabla n^2) - \operatorname{div}(n)^2 + (n \cdot \operatorname{Rot}(n))^2) + \\
&\quad + k_3(|\nabla n|^2 - \operatorname{tr}(\nabla n^2) - (n \cdot \operatorname{Rot}(n))^2) + k_4(-\operatorname{div}(n)^2 + \operatorname{tr}(\nabla n^2)) \\
&= \alpha_0 + \alpha_1 \operatorname{div}(n) + k_1 \operatorname{div}(n)^2 + k_2(n \cdot \operatorname{Rot}(n))^2 + k_3|n \times \operatorname{Rot}(n)|^2 \\
&\quad + (k_2 + k_4)(-\operatorname{div}(n)^2 + \operatorname{tr}(\nabla n^2)).
\end{aligned}$$

Nos queda ver que $\alpha_0 = \alpha_1 = 0$. En efecto, por (2.3),

$$0 = \sigma(n, \nabla n) - \sigma(-n, \nabla - n) = 2\alpha_1 \operatorname{div}(n) \quad \forall n \Rightarrow \alpha_1 = 0.$$

Por último, σ es definida positiva, entonces las orientaciones naturales n_0 son constantes y cumplen

$$0 = \sigma(n_0, \nabla n_0) = \alpha_0.$$

□

La **energía de Oseen-Frank** es el funcional I dado por

$$I(n) := \int_{\Omega} k_1 \operatorname{div}(n)^2 + k_2(n \cdot \operatorname{Rot}(n))^2 + k_3|n \times \operatorname{Rot}(n)|^2 + (k_2 + k_4)(\operatorname{tr}(\nabla n)^2 - \operatorname{div}(n)^2) dx$$

Nos va a interesar la llamada aproximación a una constante de la energía de Oseen-Frank, que corresponde a $k_1 = k_2 = k_3, k_4 = 0$. Recordando (2.7), tenemos

$$I(n) = k_1 \int_{\Omega} \operatorname{div}(n)^2 + (n \cdot \operatorname{Rot}(n))^2 + |n \times \operatorname{Rot}(n)|^2 + \operatorname{tr}(\nabla n)^2 - \operatorname{div}(n)^2 dx = k_1 \int_{\Omega} |\nabla n|^2 dx,$$

que es la energía que minimizan los mapas armónicos, el objeto de estudio del siguiente capítulo.

Capítulo 3

Mapas armónicos

3.1. Energía de Dirichlet

Ahora vamos a considerar la aproximación a una constante de la energía de Oseen-Frank,

$$I(v) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx,$$

también llamada **energía de Dirichlet**.

Los mapas armónicos son minimizantes de la energía de Dirichlet en el espacio de campos vectoriales con imagen en alguna variedad.

Concretamente, vamos a buscar minimizantes $n \in \mathcal{A}$ de la energía I , donde dado $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ dominio Lipschitz definimos

$$\mathcal{A} := \{v \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^m) : |v(x)| = 1 \text{ para c.t. } x \in \Omega, v|_{\Gamma_D} = n_D\}.$$

Donde $\Gamma_D \subset \partial\Omega$ es tal que su medida de Hausdorff $(d-1)$ -dimensional es positiva y asumimos que $n_D \in L^2(\Gamma_D; \mathbb{R}^m)$ admite una extensión $\tilde{n}_D \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ con $|\tilde{n}_D| = 1$ para casi todo $x \in \Omega$. Asumiendo esto último podemos probar la existencia de un minimizante.

Proposición 3.1.1. *Existe un minimizante $n \in \mathcal{A}$.*

Demostración. Como n_D admite una extensión en $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$, existe una sucesión minimizante $\{n_j\} \subset \mathcal{A}$ tal que $\lim_{j \rightarrow \infty} I(n_j) = \inf_{v \in \mathcal{A}} I(v) < \infty$.

Ahora, como $n_j - \tilde{n}_D \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ y $(n_j - \tilde{n}_D)|_{\Gamma_D} = 0$, por la coercividad de I , tenemos

$$|n_j|_{H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)}^2 = 2I(n_j) \leq 2I(n_j - \tilde{n}_D) + |\tilde{n}_D|_{H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)}^2 \leq c + |\tilde{n}_D|_{H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)}^2,$$

por lo tanto $\{n_j\}$ está acotada en $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$.

Por lo tanto, existe una subsucesión que converge débilmente a cierto $n \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ con $n|_{\Gamma_D} = n_D$. Ahora queremos ver si $n \in \mathcal{A}$ y si $\inf_{v \in \mathcal{A}} I(v) \geq I(n)$. Para lo primero, como existe una subsucesión $\{n_k\}$ que converge débilmente a n entonces $n_k \rightarrow n$ en $L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)$ (recordar la proposición 1.2.7). Luego, existe otra subsucesión que converge c.t.p. a n , de donde $|n| = 1$ c.t.p., i.e $n \in \mathcal{A}$.

Por último, tenemos que I es débilmente semicontinua por abajo (observación 1.2.4), entonces como $n_k \rightarrow n$ en \mathcal{A} se tiene

$$I(n) \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} I(n_k) = \inf_{v \in \mathcal{A}} I(v).$$

□

De la prueba se desprende el siguiente resultado.

Corolario 3.1.2. *\mathcal{A} es débilmente cerrado en $H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$.*

Observación 3.1.3 (No existencia y no unicidad). *Si no existe una extensión de n_D en $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ pueden no existir minimizantes, porque $\mathcal{A} = \emptyset$.*

Tomamos $\Omega = B(0, 1) \subset \mathbb{R}^2$ y $n_D = \frac{x}{|x|}$ (esto es el campo normal saliente). Entonces, no existe una extensión $\tilde{n}_D \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^2)$ tal que $\tilde{n}_D|_{\partial\Omega} = n_D$ y $|\tilde{n}_D| = 1$ c.t.p. En efecto, tal extensión continua \tilde{n}_D tendría un punto fijo y por el teorema de Poincaré-Hopf éste tendría índice uno, por tanto existe alguna singularidad en Ω de donde $\tilde{n}_D \notin H^1(\Omega; \mathbb{R}^2)$ (mirar la observación 3.2.3).

La invariancia por rotaciones de la energía de Dirichlet implica que no tenemos unicidad.

Por ejemplo consideremos $\Omega = [0, 1]$, $d = 3$ y $n : (0, 1) \rightarrow S^2$ un minimizante en el conjunto de las funciones $v \in \mathcal{A}$ con $v(0) = e = -v(1)$ para $e \in S^2$. Entonces si tomamos una rotación $Q \in SO(3)$ tal que $Qe = e$ se tiene

$$\frac{1}{2} \int_0^1 |(Qn)'|^2 dx = \frac{1}{2} \int_0^1 |n'|^2 dx$$

y por tanto $\bar{n} := Qn$ es otro minimizante.

3.2. Ecuación de Euler-Lagrange

En esta sección damos la formulación variacional del problema de minimizar I , introduciendo la ecuación de Euler-Lagrange en su forma fuerte y débil.

Teorema 3.2.1 (Ecuación de Euler-Lagrange). *Sea $n \in \mathcal{A}$ minimizante de la energía de Dirichlet. Entonces para toda $w \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m) \cap L^\infty(\Omega)$ vale la igualdad*

$$\langle \nabla n, \nabla w \rangle = \langle |\nabla n|^2 n, w \rangle. \quad (3.1)$$

Además si $n \in C^2(\Omega; \mathbb{R}^m)$ obtenemos la forma fuerte de (3.1),

$$\begin{cases} (-\Delta)n(x) = |\nabla n(x)|^2 n(x) & x \in \Omega \\ n(x) = n_D(x) & x \in \Gamma_D \\ \partial_\nu n(x) = 0 & x \in \partial\Omega \setminus \Gamma_D \end{cases}. \quad (3.2)$$

Demostración. Sea $w \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m) \cap L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^m)$ y $\varepsilon > 0$ tal que $\varepsilon \|w\|_{L^\infty(\Omega)} < \frac{1}{2}$, entonces si $|r| < \varepsilon$ se tiene para c.t. $x \in \Omega$

$$|n(x) + rw(x)| \geq \|n(x)\| - \|rw(x)\| \geq 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$$

Por tanto el mapa

$$n_r := \frac{n + rw}{|n + rw|}$$

pertenece a $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$, $|n_r| = 1$ y $n_r|_{\Gamma_D} = n_D$, de donde $n_r \in \mathcal{A}$ para todo $|r| < \varepsilon$. Como $n_0 = n$ tenemos que $r \mapsto I(n_r)$ tiene un mínimo en $r = 0$, luego

$$\frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} I(n_r) = 0.$$

Ahora,

$$\frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} n_r = \frac{(\frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} n + rw)|n| - (\frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} |n + rw|)n}{|n|^2} = \frac{w|n|^2 - n(\frac{n}{|n|} \cdot w)}{|n|^2} = w - n(n \cdot w).$$

Por último, como $1 = |n|^2 = n \cdot n$ entonces $\partial_i n \cdot n = 0$ para todo $i \in \{1, \dots, d\}$, de donde deducimos

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} I(n_r) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} \nabla n_r \cdot \nabla n_r \, dx = \int_{\Omega} (\frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} \nabla n_r) \cdot \nabla n \, dx = \\ &= \int_{\Omega} \nabla(w - n(n \cdot w)) \cdot \nabla n \, dx = \sum_{i=1}^d \int_{\Omega} \partial_i(w - n(n \cdot w)) \cdot \partial_i n \, dx = \\ &= \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla n \, dx - \int_{\Omega} |\nabla n|^2 (n \cdot w) \, dx = \langle \nabla n, \nabla w \rangle - \langle |\nabla n|^2 n, w \rangle. \end{aligned}$$

Ahora para la segunda parte, si $n \in C^2(\Omega; \mathbb{R}^m)$ integrando por partes obtenemos

$$\int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla n \, dx = \int_{\Omega} -\Delta n w \, dx + \int_{\partial\Omega} \partial_{\nu} n w \, dx = \int_{\Omega} -\Delta n w \, dx + \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_D} \partial_{\nu} n w \, dx, \quad (3.3)$$

si w es suave y de soporte compacto

$$\int_{\Omega} (-\Delta n - |\nabla n|^2 n) \cdot w \, dx = 0 \quad \forall w \in C_0^{\infty}(\Omega) \Rightarrow \Delta n + |\nabla n|^2 n = 0 \quad \text{en } \Omega.$$

Si tomamos ahora $w \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m) \cap L^{\infty}(\Omega)$, por (3.3) tenemos

$$\int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_D} \partial_{\nu} n w \, dx = 0 \quad \forall w \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m) \cap L^{\infty}(\Omega) \Rightarrow \partial_{\nu} n = 0 \quad \text{en } \partial\Omega \setminus \Gamma_D.$$

□

Ahora sí damos una definición de mapa armónico.

Definición 3.2.2 (Mapa armónico). *Llamamos mapa armónico a todo $n \in \mathcal{A}$ solución de la ecuación de Euler-Lagrange (3.1).*

La segunda condición en el teorema anterior no es obvia. Los mapas armónicos en general no son regulares ni minimizantes de la energía de Dirichlet como muestra el siguiente ejemplo.

Observación 3.2.3. *Consideremos $\Omega = B(0, 1) \subset \mathbb{R}^d$ para $d \geq 1$, $\Gamma_D = \partial\Omega$, $n_D(x) = \frac{x}{|x|}$ y sea $n(x) = \frac{x}{|x|}$ para $x \in \Omega$. Entonces,*

$$\nabla n(x) = \frac{Id}{|x|} - \frac{x x^T}{|x|^3} = \begin{pmatrix} \nabla n_1(x) \\ \nabla n_2(x) \\ \vdots \\ \nabla n_d(x) \end{pmatrix},$$

luego

$$|\nabla n(x)|^2 = \frac{d-1}{|x|^2}.$$

Ahora $n \in L^2(\Omega)$ y tenemos,

$$\int_{\Omega} |\nabla n(x)|^2 dx = \int_{B(0,1)} \frac{d-1}{|x|^2} dx = (d-1) \omega_{d-1} \int_0^1 r^{d-3} dr = \begin{cases} < \infty & \text{si } d > 2 \\ +\infty & \text{si } d = 2 \end{cases}$$

Entonces, $n \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^d)$ cuando $d > 2$ y, por lo tanto, $n \in \mathcal{A}$ solamente para $d > 2$.

Además n es un mapa armónico para $d > 2$, pues tenemos

$$\Delta n(x) = \begin{pmatrix} \operatorname{div}(\nabla n_1(x)) \\ \operatorname{div}(\nabla n_2(x)) \\ \vdots \\ \operatorname{div}(\nabla n_d(x)) \end{pmatrix},$$

con

$$\operatorname{div}(\nabla n_i(x)) = \left(\sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^d -\frac{x_i}{|x|^3} + \frac{3x_i x_j^2}{|x|^5} \right) - \frac{x_i}{|x|^3} - \frac{2x_i}{|x|^3} + \frac{3x_i^3}{|x|^5} = -(d-1) \frac{x_i}{|x|^3},$$

de donde

$$\Delta n(x) = -\frac{d-1}{|x|^3} x = -\frac{d-1}{|x|^2} \frac{x}{|x|} = -|\nabla n(x)|^2 n(x) \quad \forall x \neq 0.$$

Ahora, sean $w \in H_0^1(\Omega; \mathbb{R}^d) \cap L^\infty(\Omega)$ y $\varepsilon > 0$, entonces integrando por partes

$$\begin{aligned} \left| \int_{\Omega \setminus B(0,\varepsilon)} \nabla n \cdot \nabla w - \int_{\Omega \setminus B(0,\varepsilon)} |\nabla n|^2 n \cdot \nabla w \right| &= \left| \int_{\Omega \setminus B(0,\varepsilon)} \nabla n \cdot \nabla w + \int_{\Omega \setminus B(0,\varepsilon)} \Delta n w \right| \\ &= \left| \int_{\partial\Omega} (\partial_\nu n) \cdot w ds - \int_{\partial B(0,\varepsilon)} (\partial_\nu n) \cdot w ds \right| \\ &\leq \int_{\partial B(0,\varepsilon)} |\nabla n| |w| ds \\ &\leq c \|w\|_{L^2(\Omega)}^2 \int_{\partial B(0,\varepsilon)} \frac{\sqrt{d-1}}{\varepsilon} ds \\ &= c_2 \|w\|_{L^2(\Omega)}^2 \varepsilon^{d-2}. \end{aligned}$$

Entonces n cumple (3.1) cuando $d > 2$.

3.2.1. Compacidad y estabilidad.

La falta de regularidad de los mapas armónicos dificulta asegurar estabilidad. Vamos a ver un resultado en esta línea, que las sucesiones débilmente convergentes de mapas casi armónicos convergen a un mapa armónico. En particular, el conjunto de mapas armónicos es un conjunto débilmente cerrado. Esto va a ser clave para probar la convergencia de las aproximaciones numéricas que vamos a obtener. Antes veamos una caracterización útil de los mapas armónicos, restrinjámonos al caso $m = 3$, aunque las pruebas son análogas.

Lema 3.2.4. Sea $n \in \mathcal{A}$. Son equivalentes:

1. n es un mapa armónico.
2. Para toda $\varphi \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3) \cap L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^3)$ vale la igualdad:

$$\sum_{j=1}^d \langle \partial_j n, n \times \partial_j \varphi \rangle = \langle \nabla n, \nabla(n \times \varphi) \rangle = 0. \quad (3.4)$$

3. Para toda $w \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3)$ tal que $n \cdot w = 0$ vale la igualdad:

$$\langle \nabla n, \nabla w \rangle = 0. \quad (3.5)$$

Demostración. Veamos (1) \Rightarrow (2). Sea $\varphi \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3) \cap L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^3)$ entonces para todo $j \in \{1, \dots, d\}$

$$\partial_j n \cdot \partial_j(n \times \varphi) = \partial_j n \cdot (\partial_j n \times \varphi) + \partial_j n \cdot (n \times \partial_j \varphi) = \partial_j n \cdot (n \times \partial_j \varphi).$$

Luego, por (3.1) y que $n \cdot (n \times \varphi) = 0$,

$$\sum_{j=1}^d \langle \partial_j n, n \times \partial_j \varphi \rangle = \sum_{j=1}^d \langle \partial_j n, \partial_j(n \times \varphi) \rangle = \langle \nabla n, \nabla(n \times \varphi) \rangle = \langle |\nabla n|^2 n, n \times \varphi \rangle = 0,$$

Lo que prueba la afirmación.

Probemos ahora (2) \Rightarrow (1), para eso veamos que n satisface (3.1).

Sen $w \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3) \cap L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^3)$ y $\varphi := n \times w$, recordando la igualdad $x \times (y \times z) = y(x \cdot z) - z(x \cdot y)$ y que $n \cdot \partial_j n = 0$ para todo $j \in \{1, \dots, d\}$, tenemos

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \nabla n, \nabla(n \times (n \times w)) \rangle = \sum_{j=1}^d \langle \partial_j n, n \times (n \times \partial_j w) + n \times (\partial_j n \times w) \rangle = \\ &= \sum_{j=1}^d \langle \partial_j n, n(n \cdot \partial_j w) - \partial_j w + \partial_j n(n \cdot w) - w(n \cdot \partial_j n) \rangle = \sum_{j=1}^d \langle \partial_j n, -\partial_j w + \partial_j n(n \cdot w) \rangle \\ &= -\langle \nabla n, \nabla w \rangle + \langle |\nabla n|^2 n, w \rangle. \end{aligned}$$

Entonces n es armónico.

(1) \Rightarrow (3) es consecuencia de (3.1), y (3) \Rightarrow (2) es inmediato pues si $\varphi \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3) \cap L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^3)$ entonces $n \times \varphi \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3)$ y $n \cdot (n \times \varphi) = 0$. \square

Definición 3.2.5 (Mapas casi armónicos.). Decimos que una sucesión $\{n_j\} \subset \mathcal{A}$ es de mapas casi armónicos si existe una sucesión de funcionales $\{\mathcal{R}_j\} \subset H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m)'$ tal que $\|\mathcal{R}_j\|_{H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m)'} \rightarrow 0$ cuando $j \rightarrow \infty$ y

$$\langle \nabla n_j, \nabla w \rangle = \langle |\nabla n_j|^2 n_j, w \rangle + \mathcal{R}_j(w), \quad (3.6)$$

para todo $j \in \mathbb{N}$ y toda $w \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m) \cap L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^m)$.

Observación 3.2.6. La sucesión de funcionales $\{\mathcal{R}_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ se puede pensar como lo que le falta a los mapas de la sucesión $\{n_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ en cada j para ser armónicos, como un modelado de la inexactitud en cada paso de un método numérico.

El lema permite probar que los mapas armónicos forman un conjunto débilmente cerrado y la estabilidad de mapas casi armónicos que buscábamos,

Teorema 3.2.7 (Compacidad). *Sea $\{n_j\} \subset \mathcal{A}$ una sucesión de mapas casi armónicos tales que $n_j \rightharpoonup n$ para $j \rightarrow \infty$ en $H^1(\Omega; \mathbb{R}^3)$, con $n \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^3)$. Entonces $n \in \mathcal{A}$ y n es un mapa armónico.*

Demostración. El corolario 3.1.2 implica que $n \in \mathcal{A}$.

Para ver que n es armónico vamos a usar la caracterización (3.5). Sea $\varphi \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3) \cap C^\infty(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^3)$, entonces $n_j \times \varphi \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3) \cap L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^3)$. Luego, por (3.6), para todo $j \in \mathbb{N}$ vale

$$\sum_{l=1}^d \langle \partial_l n_j, n_j \times \partial_l \varphi \rangle = \langle \nabla n_j, \nabla(n_j \times \varphi) \rangle = \langle |\nabla n_j|^2 n_j, n_j \times \varphi \rangle + \mathcal{R}_j(n_j \times \varphi) = \mathcal{R}_j(n_j \times \varphi).$$

Por otro lado, como (recordar la proposición 1.2.7) $n_j \rightarrow n$ en $L^2(\Omega; \mathbb{R}^3)$ y $\partial_l n_j \rightharpoonup \partial_l n$ en $L^2(\Omega; \mathbb{R}^3)$, tenemos que

$$\langle \partial_l n_j, n_j \times \partial_l \varphi \rangle = \langle \partial_l n_j, n \times \partial_l \varphi \rangle + \langle \partial_l n_j, (n_j - n) \times \partial_l \varphi \rangle \rightarrow \langle \partial_l n, n \times \partial_l \varphi \rangle,$$

ya que por la proposición 1.2.6 $\partial_l n_j \cdot (n_j \times \partial_l \varphi) \rightarrow \partial_l n \cdot (n \times \partial_l \varphi)$ en $L^2(\Omega)$.

Ahora, como $n_j \times \varphi$ está acotado en $H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3)$ y $\|\mathcal{R}_j\|_{H_D^1(\mathbb{R}^3)'} \rightarrow 0$, tenemos

$$|\mathcal{R}_j(n_j \times \varphi)| \leq \|\mathcal{R}_j\|_{H_D^1(\Omega)'} \|n_j \times \varphi\|_{H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3)} \rightarrow 0,$$

por lo tanto

$$\langle \nabla n, \nabla(n \times \varphi) \rangle = \sum_{l=1}^d \langle \partial_l n, n \times \partial_l \varphi \rangle = 0.$$

Si $\varphi \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3) \cap L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^3)$, tomamos $\{\varphi_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subset H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3) \cap C^\infty(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^3)$ tal que $\varphi_k \rightarrow \varphi$ en $H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^3)$ cuando $k \rightarrow \infty$, entonces

$$\langle \nabla n, \nabla[n \times (\varphi_k - \varphi)] \rangle = \langle \nabla n, n \times \nabla(\varphi_k - \varphi) \rangle \leq \|\nabla n\|_{L^2(\Omega; \mathbb{R}^3)} \|n\|_{L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^3)} \|\nabla(\varphi_k - \varphi)\|_{L^2(\Omega; \mathbb{R}^3)},$$

de donde $\langle \nabla n, \nabla(n \times \varphi_k) \rangle \rightarrow \langle \nabla n, \nabla(n \times \varphi) \rangle$ cuando $k \rightarrow \infty$. Por lo tanto, $\langle \nabla n, \nabla(n \times \varphi) \rangle = 0$ y entonces, por el lema 3.2.4, n es armónico. \square

3.3. Mapas armónicos discretos.

En esta sección damos el marco de lo que será la aproximación de mapas armónicos. Recordar las definiciones de la sección 1.3.

Los polinomios que tienen norma euclídea constante son los polinomios constantes, por lo que no podemos imponer la restricción a la esfera para casi todo punto en funciones polinómicas a trozos. Para solucionar esto vamos a restringir la norma solo en los nodos. La siguiente proposición asegura que esto es suficiente.

Proposición 3.3.1. *Sean $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ una familia de triangulaciones regulares de $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ (Recordar que $h = \max_{T \in \mathcal{T}_h} h_T$) y $(n_h)_{h>0} \subset H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ tales que $n_h \in \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)^m$ y $|n_h(z)| = 1$ para todo $z \in \mathcal{N}_h$ y todo $h > 0$. Si $n_h \rightharpoonup n$ en $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ cuando $h \rightarrow 0$ para algún $n \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$, entonces $|n(x)| = 1$ para casi todo $x \in \Omega$.*

Demostración. Tenemos que $D^2 n_h|_T = 0$ para todo $T \in \mathcal{T}_h$ (Elementos de grado 1) entonces $D^2 |n_h|^2 = 2\nabla n_h \otimes \nabla n_h$ en T . Por otro lado $\mathcal{F}_h |n_h|^2 = 1$ para todo $h > 0$, con estas observaciones y la proposición 1.3.16 deducimos

$$\begin{aligned} \| |n_h|^2 - 1 \|_{L^2(T)} &= \| |n_h|^2 - \mathcal{F}_h |n_h|^2 \|_{L^2(T)} \leq c_1 h_T^2 \| D^2 |n_h|^2 \|_{L^2(T)} = c_2 h_T^2 \| \nabla n_h \otimes \nabla n_h \|_{L^2(T)} \\ &\leq c_2 h_T^2 \| |\nabla n_h|^2 \|_{L^2(T)} = c_2 h_T^2 \| \nabla n_h \|_{L^4(T)}^2 \\ &\leq c_3 h_T^2 h_T^{d(1/4-0)} \| \nabla n_h \|_{L^\infty(T)} h_T^{d(1/4-1/2)} \| \nabla n_h \|_{L^2(T)} \\ &\leq c_3 h_T^2 \| \nabla n_h \|_{L^\infty(T)} \| \nabla n_h \|_{L^2(T)}, \end{aligned}$$

y nuevamente con otra estimación inversa obtenemos $\| \nabla n_h \|_{L^\infty(T)} \leq c_4 h_T^{-1} \| n_h \|_{L^\infty(T)} = c_4 h_T^{-1}$. Entonces, usando que $(\mathcal{F}_h)_{h>0}$ es regular,

$$\| |n_h|^2 - 1 \|_{L^2(\Omega)} = \left(\sum_{T \in \mathcal{T}_h} \| |n_h|^2 - 1 \|_{L^2(T)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq \left(\sum_{T \in \mathcal{T}_h} c h^2 \| \nabla n_h \|_{L^2(T)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq c h \| \nabla n_h \|_{L^2(\Omega)}.$$

Como $n_h \rightharpoonup n$ entonces $\| \nabla n_h \|_{L^2(\Omega)}$ está acotado, lo que prueba que $|n_h| \rightarrow 1$ en $L^2(\Omega)$ cuando $h \rightarrow 0$. Tomando alguna subsucesión convergente puntualmente para casi todo punto, deducimos $|n| = 1$ para casi todo $x \in \Omega$. \square

Esto motiva minimizar I en funciones que satisfacen la condición de borde y la restricción de norma 1 solo en los nodos de una triangulación.

Definición 3.3.2 (Funciones admisibles y ortogonales). *Sea \mathcal{T}_h una triangulación de Ω y $n_{D,h} := \mathcal{I}_h n_D$. Definimos el espacio de funciones admisibles como*

$$\mathcal{A}_h := \{ v_h \in \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)^m : |v_h(z)| = 1 \text{ para todo } z \in \mathcal{N}_h, v_h|_{\Gamma_D} = n_{D,h} \}.$$

Dado $n_h \in \mathcal{A}_h$ definimos

$$\mathcal{O}_h[n_h] := \{ w_h \in \mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)^m : w_h(z) \cdot n_h(z) = 0 \text{ para todo } z \in \mathcal{N}_h \}.$$

Para minimizar I en \mathcal{A}_h , basta cumplir la caracterización (3.5) solo en los nodos.

Teorema 3.3.3. *Supongamos que el interpolado de \tilde{n}_D cumple $\mathcal{I}_h \tilde{n}_D \in \mathcal{A}_h$. Entonces existe $n_h \in \mathcal{A}_h$ minimizante de I en el espacio \mathcal{A}_h .*

Además, $n_h \in \mathcal{A}_h$ es un minimizante de I en \mathcal{A}_h si y solo si

$$\langle \nabla n_h, \nabla w_h \rangle = 0$$

para toda $w_h \in \mathcal{O}_h[n_h]$.

Demostración. I es coerciva y continua en $\mathcal{A}_h \cap \mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)$. Entonces análogamente a la demostración de la proposición 3.1.1, existe un minimizante n_h . Veamos la segunda parte.

Sea $n_h \in \mathcal{A}_h$ minimizante de I y $w_h \in \mathcal{O}_h[n_h]$. Para todo $r \in \mathbb{R}$ y $z \in \mathcal{N}_h$, tenemos

$$|n_h(z) + r w_h(z)|^2 = |n_h(z)|^2 + 2n_h \cdot r w_h + r^2 |w_h(z)|^2 = |n_h(z)|^2 + r^2 |w_h(z)|^2 = 1 + r^2 \geq 1,$$

por lo que podemos definir

$$n_h^r = \mathcal{J}_h \left(\frac{n_h + rw_h}{|n_h + rw_h|} \right).$$

Dado $z \in \mathcal{N}_h$, el desarrollo de Taylor en $r = 0$ para la función

$$r \mapsto \frac{n_h(z) + rw_h(z)}{|n_h(z) + rw_h(z)|} = \frac{n_h(z) + rw_h(z)}{\sqrt{1 + r^2}},$$

muestra que

$$n_h^r(z) = n_h(z) + r \frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} n_h^r(z) + \frac{r^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \Big|_{r=0} n_h^r(z) + r^2 \varepsilon_2(r) = n_h(z) + r w_h(z) + r^2 \zeta_h(z),$$

donde $\zeta_h \in \mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)^m$. Luego,

$$\begin{aligned} I(n_h^r) &= \frac{1}{2} \langle \nabla n_h + r \nabla w_h + r^2 \nabla \zeta_h, \nabla n_h + r \nabla w_h + r^2 \nabla \zeta_h \rangle \\ &= I(n_h) + r \langle \nabla n_h, \nabla w_h \rangle + r^2 c_1 + r^3 c_2 + r^4 c_3, \end{aligned}$$

donde $c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{R}$ son constantes. Por último como n_h es un mínimo de I , tenemos

$$0 = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{r} (I(n_h^r) - I(n_h)) = \langle \nabla n_h, \nabla w_h \rangle.$$

Ahora supongamos que $\langle \nabla n_h, \nabla w_h \rangle = 0$ para toda $w_h \in \mathcal{O}_h[n_h]$. Análogamente consideramos un camino diferenciable $(n_h^r)_{r \in (-\delta, \delta)}$ en \mathcal{A}_h tal que $n_h^0 = n_h$. Entonces si $w_h = \frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} n_h^r$, por un desarrollo de Taylor de orden 1 tenemos

$$n_h^r = n_h + rw_h + \varepsilon(r) \zeta_h,$$

donde $\zeta_h \in \mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)^m$ y el resto ε tal que $\frac{\varepsilon(r)}{r} \rightarrow 0$ si $r \rightarrow 0$. Como $n_h^r(z) \cdot n_h^r(z) = |n_h^r(z)|^2 = 1$ para todo $r \in (-\delta, \delta)$ y $z \in \mathcal{N}_h$, derivando en $r = 0$ tenemos

$$0 = \frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} (n_h^r(z) \cdot n_h^r(z)) = 2 n_0(z) \cdot \frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} n_h^r(z) = 2 n_h(z) \cdot w_h(z),$$

de donde deducimos que $w_h \in \mathcal{O}_h[n_h]$ y por lo tanto $\langle \nabla n_h, \nabla w_h \rangle = 0$. Por último observar que como

$$\begin{aligned} I(n_h^r) &= \frac{1}{2} \langle \nabla n_h + r \nabla w_h + \varepsilon(r) \nabla \zeta_h, \nabla n_h + r \nabla w_h + \varepsilon(r) \nabla \zeta_h \rangle \\ &= I(n_h) + r \langle \nabla n_h, \nabla w_h \rangle + \varepsilon(r) \langle \nabla n_h, \nabla \zeta_h \rangle + I(rw_h + \varepsilon(r) \zeta_h) \\ &= I(n_h) + \varepsilon(r) \langle \nabla n_h, \nabla \zeta_h \rangle + I(rw_h + \varepsilon(r) \zeta_h), \end{aligned}$$

tenemos $I(n_h^r) - I(n_h)/r \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow 0$, i.e., n_h es un mínimo de I en \mathcal{A}_h . \square

La proposición motiva la definición de nuestras aproximaciones a mapas armónicos.

Definición 3.3.4 (Mapa armónico discreto). *Sea $n_h \in \mathcal{A}_h$. Decimos que n_h es un **mapa armónico discreto** si*

$$\langle \nabla n_h, \nabla w_h \rangle = 0 \quad \text{para toda } w_h \in \mathcal{O}_h[n_h].$$

También dada una familia de triangulaciones $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ decimos que $(u_h)_{h>0} \subset H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ es una sucesión de mapas casi armónicos discretos si para todo $h > 0$, $u_h \in \mathcal{A}_h$ y existe un funcional $\mathcal{R}_h \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m)'$ tal que

$$\langle \nabla u_h, \nabla w_h \rangle = \mathcal{R}_h(w_h)$$

para toda $w_h \in \mathcal{O}_h[u_h]$. Además la sucesión $(\mathcal{R}_h)_{h>0} \subset H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m)'$ cumple $\|\mathcal{R}_h\|_{H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m)'} \rightarrow 0$ cuando $h \rightarrow 0$.

Finalicemos la sección con un resultado de convergencia que nos será útil más adelante. El teorema 3.2.7 implica la convergencia de mapas armónicos casi armónicos a mapas armónicos cuando $h \rightarrow 0$, busquemos un análogo discreto a este teorema. Supongamos $m = 3$.

Teorema 3.3.5 (Compacidad discreta). *Sea $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ una familia de triangulaciones y $(n_h)_{h>0} \subset H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ una sucesión de mapas casi armónicos discretos. Si $n_{D,h} \rightarrow n_D$ en $L^2(\Gamma_D)$ cuando $h \rightarrow 0$, entonces todo punto de acumulación débil de $(n_h)_{h>0}$ en $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ es un mapa armónico.*

Demostración. Sea $n \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ un punto de acumulación débil de $(n_h)_{h>0}$ en $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$, sin pérdida de generalidad podemos suponer que $n_h \rightharpoonup n$ cuando $h \rightarrow 0$. La proposición 3.3.1 muestra que $|n| = 1$ c.t.p y la continuidad débil del operador de las trazas implica que

$$n_D = \lim_{h \rightarrow 0} n_{D,h} = \lim_{h \rightarrow 0} n_h|_{\Gamma_D} = n|_{\Gamma_D}.$$

Por último vamos a usar la caracterización (3.5). Sea $\varphi \in C^\infty(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^m) \cap H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ y definimos $w_h := \mathcal{I}_h(n_h \times \varphi)$, entonces $w_h \in \mathcal{O}_h[n_h]$. Por el teorema de estimaciones de la interpolación nodal 1.3.13 y la igualdad $D^2 n_h|_T = 0$ para todo $T \in \mathcal{T}_h$, tenemos

$$\begin{aligned} \|\nabla(w_h - n_h \times \varphi)\|_{L^2(T)} &\leq ch_T \|D^2(n_h \times \varphi)\|_{L^2(T)} \\ &\leq ch_T (2 \|\nabla n_h\|_{L^2(T)} \|\nabla \varphi\|_{L^\infty(T)} + \|n_h\|_{L^\infty(T)} \|D^2 \varphi\|_{L^2(T)}) \\ &\leq ch (2 \|\nabla n_h\|_{L^2(T)} \|\nabla \varphi\|_{L^\infty(T)} + \|n_h\|_{L^\infty(T)} \|D^2 \varphi\|_{L^2(T)}). \end{aligned}$$

Por lo tanto $w_h - n_h \times \varphi \rightarrow 0$ en $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ cuando $h \rightarrow 0$ y $|w_h|_{H^1(\Omega; \mathbb{R}^3)} \leq |w_h - n_h \times \varphi|_{H^1(\Omega; \mathbb{R}^3)} + |n_h \times \varphi|_{H^1(\Omega; \mathbb{R}^3)} < \infty$.

Luego,

$$\mathcal{R}_h(w_h) = \langle \nabla n_h, \nabla w_h \rangle = \langle \nabla n_h, \nabla(n_h \times \varphi) \rangle + \langle \nabla n_h, \nabla(w_h - n_h \times \varphi) \rangle,$$

entonces cuando $h \rightarrow 0$, tenemos

$$0 = \lim_{h \rightarrow 0} \langle n_h, \nabla(n_h \times \varphi) \rangle = \lim_{h \rightarrow 0} \sum_{l=1}^d \langle \partial_l n_h, \partial_l(n_h \times \varphi) \rangle = \lim_{h \rightarrow 0} \sum_{l=1}^d \langle \partial_l n_h, n_h \times \partial_l \varphi \rangle = \sum_{l=1}^d \langle \partial_l n, n \times \partial_l \varphi \rangle,$$

pues $n_h \rightarrow n$ en $L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)$ y $\nabla n_h \rightharpoonup \nabla n$ en $L^2(\Omega; \mathbb{R}^{d \times m})$ cuando $h \rightarrow 0$.

Un argumento de densidad (análogo al del teorema 3.2.7) prueba la igualdad anterior para toda $\varphi \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m) \cap L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^m)$, entonces n es un mapa armónico. \square

Capítulo 4

Análisis numérico.

Terminamos con el análisis numérico del problema de minimizar la energía de Dirichlet, con este fin presentamos dos algoritmos iterativos. Los dos están basados en buscar correcciones tangenciales, que son campos ortogonales en casi todo punto, para hallar una sucesión de mapas casi armónicos. También presentamos algunos experimentos numéricos realizados, la implementación fue realizada en la herramienta [6].

4.1. Algoritmos.

Presentamos dos algoritmos. Pueden ser pensados como una discretización del flujo de gradiente en H^1 de la energía de Dirichlet, formalmente definido como

$$\langle \nabla \partial_t n, \nabla w \rangle = -\langle \nabla n, \nabla w \rangle + \langle |\nabla n|^2 n, w \rangle, \quad (4.1)$$

para $w \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^m) \cap L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^m)$, $n \in H^1([0, T]; H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)) \cap L^\infty([0, T]; H^1(\Omega; \mathbb{R}^m))$ tal que $|n(t, x)| = 1$ para casi todo $(t, x) \in [0, T] \times \Omega$.

Si $w \cdot n = 0$ c.t.p. el segundo termino se anula. Además, como $n \cdot n = 1$ entonces $\partial_t n \cdot n = 0$. Vamos a usar una discretización semi-implícita de (4.1) para buscar aproximaciones de $\partial_t n$ y luego de una proyección nodal, hallar direcciones de decrecimiento para I , construyendo iterativamente una sucesión de mapas casi armónicos discretos. Por lo tanto, esta discretización puede ser pensada como un algoritmo de descenso por gradiente para la energía de Dirichlet.

4.1.1. Algoritmo I: Proyección en la esfera.

El primer algoritmo que presentamos utiliza la proposición 3.3.1 para en cada iteración hacer una proyección a la esfera. Esto permite pasos temporales más grandes en cada iteración y a su vez necesita ciertas condiciones geométricas en la triangularización para asegurar convergencia.

Definición 4.1.1. *Decimos que una triangulación \mathcal{T}_h es aguda si la matriz de rigidez $(A)_{i,j} := \langle \nabla \varphi_{z_i}, \nabla \varphi_{z_j} \rangle$ para $z_i, z_j \in \mathcal{N}_h$, satisface $A_{ij} \leq 0$ si $i \neq j$.*

Observar que si $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ esto es equivalente a que todos sus elementos tengan ángulos interiores agudos.

Observación 4.1.2. *Bajo estas condiciones \mathcal{T}_h admite un principio del máximo discreto.*

Antes de dar el algoritmo veamos un resultado auxiliar.

Lema 4.1.3. *Sea una triangulación \mathcal{T}_h aguda de Ω . Entonces para toda $w_h \in \mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)^m$ y $F \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^m; \mathbb{R}^\ell)$ i.e. F Lipschitz, tenemos que*

$$\|\nabla \cdot \mathcal{I}_h(F \circ w_h)\| \leq \|DF\|_{L^\infty(\mathbb{R}^m)} \|\nabla w_h\|.$$

Demostración. Sea $w_h^F := \mathcal{I}_h(F \circ w_h)$. Para todo $z_j \in \mathcal{N}$, tenemos

$$\sum_{z_i \in \mathcal{N}_h} A_{ij} = \sum_{z_i \in \mathcal{N}_h} \langle \nabla \varphi_{z_i}, \nabla \varphi_{z_j} \rangle = \langle \nabla \left(\sum_{z_i \in \mathcal{N}_h} \varphi_{z_i} \right), \nabla \varphi_{z_j} \rangle = 0, \quad (4.2)$$

pues $\sum_{z_i \in \mathcal{N}} \varphi_{z_i} = 1$ en Ω . Entonces para $w_h = \sum_{z_i \in \mathcal{N}} w_{z_i} \varphi_{z_i}$ con $w_{z_i} = w_h(z_i) \in \mathbb{R}^m$ para todo $z_i \in \mathcal{N}_h$, tenemos por (4.2),

$$\begin{aligned} \|\nabla w_h\|^2 &= \sum_{z_i, z_j \in \mathcal{N}_h} A_{ij} w_{z_i} \cdot w_{z_j} = \sum_{z_i, z_j \in \mathcal{N}_h} A_{ij} (w_{z_i} - w_{z_j}) \cdot w_{z_j} + \sum_{z_i, z_j \in \mathcal{N}_h} A_{ij} w_{z_j} \cdot w_{z_j} \\ &= \sum_{z_i, z_j \in \mathcal{N}_h} A_{ij} (w_{z_i} - w_{z_j}) \cdot w_{z_j} + \sum_{z_j \in \mathcal{N}_h} \left(\sum_{z_i \in \mathcal{N}_h} A_{ij} \right) w_{z_j} \cdot w_{z_j} \\ &= \sum_{z_i, z_j \in \mathcal{N}_h} A_{ij} (w_{z_i} - w_{z_j}) \cdot w_{z_j} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{z_i, z_j \in \mathcal{N}_h} A_{ij} (w_{z_i} - w_{z_j}) \cdot w_{z_j} + \frac{1}{2} \sum_{z_i, z_j \in \mathcal{N}_h} A_{ij} (w_{z_j} - w_{z_i}) \cdot w_{z_i} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{z_i, z_j \in \mathcal{N}_h} A_{ij} |w_{z_j} - w_{z_i}|^2. \end{aligned}$$

Entonces como F es Lipschitz y $A_{ij} \leq 0$ si $i \neq j$, concluimos

$$\begin{aligned} \|\nabla w_h^F\| &= -\frac{1}{2} \sum_{z_i, z_j \in \mathcal{N}_h} A_{ij} |F(w_{z_j}) - F(w_{z_i})|^2 \\ &\leq -\frac{1}{2} \sum_{z_i, z_j \in \mathcal{N}_h} A_{ij} \|DF\|_{L^\infty(\mathbb{R}^m)} |w_{z_j} - w_{z_i}|^2 \\ &= \|DF\|_{L^\infty(\mathbb{R}^m)} \|\nabla w_h\|. \end{aligned}$$

□

Consideremos una triangulación \mathcal{T}_h de Ω , recordar las definiciones 3.3.2 y 3.3.4.

Algoritmo 1. Sean $n_h^0 \in \mathcal{A}_h$, $\theta \in [0, 1]$, $\tau > 0$ y $\varepsilon > 0$. Entonces para $k = 1, 2, \dots$,

1. Hallamos $v_h^k \in \mathcal{O}_h[n_h^{k-1}]$ tal que

$$\langle \nabla v_h^k, \nabla w_h \rangle + \langle \nabla (n_h^{k-1} + \theta \tau v_h^k), \nabla w_h \rangle = 0, \quad (4.3)$$

para toda $w_h \in \mathcal{O}_h[n_h^{k-1}]$.

2. Definimos $n_h^k \in \mathcal{A}_h$ como

$$n_h^k := \sum_{z \in \mathcal{N}_h} \frac{n_h^{k-1}(z) + \tau v_h^k(z)}{|n_h^{k-1}(z) + \tau v_h^k(z)|} \varphi_z.$$

Hasta que $\|\nabla v_h^k\| \leq \varepsilon$.

Si $\theta = 0$ estamos haciendo una discretización explícita, que simplifica el primer paso del algoritmo pero es inestable respecto a la elección de τ . En el caso $\theta = 1$ estamos haciendo discretización implícita, esto permite elecciones del paso τ más grandes.

Proposición 4.1.4. *Supongamos que \mathcal{T}_h es aguda. Entonces los iterados $\{n_h^j\}_{j=1,2,\dots} \subset \mathcal{A}_h$ del algoritmo I están bien definidos y cumplen*

$$\frac{1}{2}\|\nabla n_h^k\|^2 + (2 + 2\theta\tau - \tau)\frac{\tau}{2}\sum_{j=1}^k\|v_h^j\|^2 \leq \frac{1}{2}\|n_h^0\|^2$$

para todo $k \geq 1$. En particular si $\tau(1 - 2\theta) \leq 2$, entonces el algoritmo termina y además el output $n_h^* \in \mathcal{A}_h$ cumple

$$\langle \nabla n_h^*, \nabla w_h \rangle = \mathcal{R}_h(w_h)$$

para toda $w_h \in \mathcal{O}_h[n_h^*]$ y $\|\mathcal{R}\|_{H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m)} \leq (1 + \theta\tau)\varepsilon$.

Demostración. Sea $n_h^{k-1} \in \mathcal{A}_h$, el conjunto $\mathcal{O}[n_h^{k-1}]$ es un subespacio cerrado de $\mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)^m$ entonces considerando la forma bilineal $a : \mathcal{O}[n_h^{k-1}] \times \mathcal{O}[n_h^{k-1}] \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$a(u_h, v_h) = \langle (1 + \theta\tau)\nabla u_h, \nabla v_h \rangle,$$

definida positiva en $H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$, tenemos que existe un único $\tilde{v}_h^k \in \mathcal{O}[n_h^{k-1}]$ tal que $\langle (1 + \theta\tau)\nabla \tilde{v}_h^k, \nabla w_h \rangle = \langle \nabla n_h^{k-1}, \nabla w_h \rangle$ para toda $w_h \in \mathcal{O}[n_h^{k-1}]$. Definimos $v_h^k = -\tilde{v}_h^k$. Ahora, para todo $z \in \mathcal{N}_h$ tenemos

$$|n_h^{k-1}(z) + \tau v_h^k(z)|^2 = |n_h^{k-1}(z)|^2 + \tau |v_h^k(z)|^2 \geq 1,$$

pues $v_h^k \in \mathcal{O}[n_h^{k-1}]$ y $|n_h^{k-1}(z)|^2 = 1$, entonces los iterados n_h^k están bien definidos. Veamos que el algoritmo termina.

El mapa

$$F(s) = \begin{cases} s & \text{si } |s| < 1 \\ \frac{s}{|s|} & \text{si } |s| \geq 1 \end{cases}$$

es Lipschitz y $\|DF\|_{L^\infty(\mathbb{R}^m)} = 1$, entonces por el lema 4.1.3,

$$\|\nabla n_h^k\| = \|\nabla \mathcal{S}_h[F(n_h^{k-1} + \tau v_h^k)]\| \leq \|\nabla(n_h^{k-1} + \tau v_h^k)\| \|DF\|_{L^\infty(\mathbb{R}^m)} = \|\nabla(n_h^{k-1} + \tau v_h^k)\|. \quad (4.4)$$

Tomando $w_h = v_h^k$ en la ecuación (4.3) y la igualdad $2\tau(a + \theta\tau b) \cdot b = |a + \tau b|^2 - |a|^2 + \tau^2(2\theta - 1)|b|^2$ para $a, b \in \mathbb{R}^m$, tenemos

$$\begin{aligned} 0 &= \|\nabla v_h^k\|^2 + \langle \nabla(n_h^{k-1} + \theta\tau v_h^k), \nabla v_h^k \rangle \\ &= \|\nabla v_h^k\|^2 + \frac{1}{2\tau}\|\nabla(n_h^{k-1} + \tau v_h^k)\|^2 - \frac{1}{2\tau}\|\nabla n_h^{k-1}\|^2 + \frac{\tau}{2}(2\theta - 1)\|\nabla v_h^k\|^2. \end{aligned}$$

Entonces usando (4.4) y multiplicando por τ , deducimos

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\|\nabla n_h^k\|^2 - \frac{1}{2}\|\nabla n_h^{k-1}\|^2 + \frac{\tau}{2}(2\theta\tau - \tau + 2)\|\nabla v_h^k\|^2 &\leq \frac{1}{2}\|\nabla(n_h^{k-1} + \tau v_h^k)\|^2 - \frac{1}{2}\|\nabla n_h^{k-1}\|^2 \\ &\quad + \frac{\tau}{2}(2\theta\tau - \tau + 2)\|\nabla v_h^k\|^2 \\ &= 0. \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\frac{1}{2}\|\nabla n_h^k\|^2 \leq \frac{1}{2}\|\nabla n_h^{k-1}\|^2 - \frac{\tau}{2}(2\theta\tau - \tau + 2)\|\nabla v_h^k\|^2 \quad \text{para todo } k = 1, 2, \dots \quad (4.5)$$

Por último, utilizando la desigualdad anterior inductivamente obtenemos

$$\frac{1}{2}\|\nabla n_h^k\|^2 \leq \frac{1}{2}\|\nabla n_h^0\|^2 - \frac{\tau}{2}(2\theta\tau - \tau + 2) \sum_{j=1}^k \|\nabla v_h^j\|^2.$$

Si $\tau(1 - 2\theta) \leq 2$ i.e. $2\theta\tau - \tau + 2 \geq 0$, tenemos que $\sum_{j=1}^k \|\nabla v_h^j\|^2$ converge cuando $k \rightarrow \infty$, entonces existe $\ell \in \mathbb{N}$ tal que $\|\nabla v_h^\ell\|^2 \leq \varepsilon$, de donde el algoritmo termina. Además, si $n_h^* = n_h^{\ell-1}$ entonces por (4.3)

$$\langle \nabla n_h^*, \nabla w_h \rangle = -(1 + \tau\theta) \langle \nabla v_h^\ell, \nabla w_h \rangle$$

para toda $w_h \in \mathcal{O}[n_h^*]$. Y el funcional $\mathcal{R}_h(w) = -(1 + \tau\theta) \langle \nabla v_h^\ell, \nabla w \rangle$ para $w \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$, cumple $\|\mathcal{R}\|_{H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m)'} = (1 + \tau\theta) \|\nabla v_h^\ell\| \leq (1 + \tau\theta)\varepsilon$. \square

La desigualdad (4.5) es clave, muestra que efectivamente el algoritmo encuentra direcciones de descenso para la energía, pues $I(n_h^k) \leq I(n_h^{k-1})$.

4.1.2. Algoritmo II: Sin proyección en la esfera.

La condición de triangulación aguda puede ser restrictiva para dimensión $d \geq 3$. En el algoritmo II no proyectamos a la esfera en cada iteración, lo que elimina la condición de triangulación aguda pero no permite pasos temporales grandes.

Algoritmo 2. Sean $n_h^0 \in \mathcal{A}_h$, $\tau > 0$ y $\varepsilon > 0$. Entonces para $k = 1, 2, \dots$,

1. Hallamos $v_h^k \in \mathcal{O}_h[n_h^{k-1}]$ tal que

$$\langle \nabla v_h^k, \nabla w_h \rangle + \langle \nabla(n_h^{k-1} + \tau v_h^k), \nabla w_h \rangle = 0, \quad (4.6)$$

para toda $w_h \in \mathcal{O}_h[n_h^{k-1}]$.

2. Definimos $n_h^k \in \mathcal{A}_h$ como

$$n_h^k := \sum_{z \in \mathcal{N}_h} [n_h^{k-1}(z) + \tau v_h^k(z)] \varphi_z.$$

Hasta que $\|\nabla v_h^k\| \leq \varepsilon$.

Veamos que el algoritmo termina. Además, la discrepancia en el largo de los iterados está controlada en L^1 y depende del tamaño del paso. Para esto último necesitamos un resultado sobre equivalencia de normas en las lineales a trozos.

Lema 4.1.5 (Equivalencia de normas). Para todo $1 \leq p < \infty$ existe $c > 0$ tal que para toda $v_h \in \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)$, tenemos

$$c^{-1} \|v_h\|_{L^p(\Omega)} \leq \left(\sum_{z \in \mathcal{N}_h} h_z^d |v_h(z)|^p \right)^{\frac{1}{p}} \leq c \|v_h\|_{L^p(\Omega)}$$

donde $h_z = \text{diam}(\text{sop}(\varphi_z))$ para todo $z \in \mathcal{N}_h$.

Demostración. Recordar el elemento modelo \hat{T} y su conjunto de nodos $\widehat{\mathcal{N}}$ (Proposición 1.3.11). Tenemos que $\|v_h\|_{L^p(\hat{T})}$ y $(\sum_{\hat{z} \in \widehat{\mathcal{N}}} |v_h(\hat{z})|^p)^{\frac{1}{p}}$ son normas en $\mathcal{L}^1(\hat{T})$ y por lo tanto equivalentes con constante c y la constante no depende de ningún $T \in \mathcal{T}_h$. Ahora sea $v_h \in \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)$, entonces por la observación 1.3.12

$$c^{-1} \|v_h\|_{L^p(T)} \leq c^{-1} h_T^{\frac{d}{p}} \|\hat{v}_h\|_{L^p(\hat{T})} \leq \left(\sum_{\hat{z} \in \widehat{\mathcal{N}}} h_T^d |v_h(\hat{z})|^p \right)^{\frac{1}{p}} = \left(\sum_{z \in \mathcal{N}_h \cap T} h_T^d |v_h(z)|^p \right)^{\frac{1}{p}}.$$

A su vez,

$$\left(\sum_{z \in \mathcal{N}_h \cap T} h_T^d |v_h(z)|^p \right)^{\frac{1}{p}} = \left(\sum_{\hat{z} \in \widehat{\mathcal{N}}} h_T^d |\hat{v}_h(\hat{z})|^p \right)^{\frac{1}{p}} \leq c h_T^{\frac{d}{p}} \|\hat{v}_h\|_{L^p(\hat{T})} \leq c h_T^{\frac{d}{p}} h_T^{-\frac{d}{p}} \|v_h\|_{L^p(T)} = c \|v_h\|_{L^p(T)},$$

por lo tanto $(\sum_{z \in \mathcal{N}_h \cap T} h_T^d |v_h(z)|^p)^{\frac{1}{p}}$ y $\|v_h\|_{L^p(T)}$ son normas equivalentes en $\mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)|_T$ con constante que no depende de T .

Por último, usando que existe una constante $C > 0$ tal que $C^{-1}h_z \leq h_T \leq Ch_z$ para todo $T \in \mathcal{T}_h$ y $z \in \mathcal{N}_h \cap T$, obtenemos, elevando a la p y sumando en todos los $T \in \mathcal{T}_h$,

$$c^{-1} \|v_h\|_{L^p(\Omega)} \leq \left(\sum_{z \in \mathcal{N}_h} h_z^d |v_h(z)|^p \right)^{\frac{1}{p}} \leq c \|v_h\|_{L^p(\Omega)} \quad \text{para toda } v_h \in \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h).$$

□

Proposición 4.1.6. *Los iterados $\{n_h^k\}_{j=1,2,\dots} \subset \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)^m$ del algoritmo II están bien definidos, satisfacen $n_h^k|_{\Gamma_D} = n_{D,h}$ para todo $k \geq 1$, y cumplen*

$$\frac{1}{2} \|\nabla n_h^k\|^2 + (2 + \tau) \frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^k \|\nabla v_h^j\|^2 = \frac{1}{2} \|\nabla n_h^0\|^2 \quad (4.7)$$

para todo $k \geq 1$. En particular el algoritmo termina, y para todo $k \geq 1$ vale

$$\|\mathcal{I}_h(|n_h^k|^2) - 1\|_{L^1(\Omega)} \leq c\tau \|\nabla n_h^0\|^2.$$

Demostración. Sean $k \geq 1$ y $n_h^{k-1} \in \mathcal{A}_h$. El conjunto $\mathcal{O}[n_h^{k-1}]$ es un subespacio cerrado de $\mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)^m$ entonces análogamente a la terminación del algoritmo I, existe un único $v_k \in \mathcal{O}_h[n_h^{k-1}]$ tal que

$$\langle \nabla v_h^k, \nabla w_h \rangle + \langle \nabla(n_h^{k-1} + \tau v_h^k), \nabla w_h \rangle = 0$$

para toda $w_h \in \mathcal{O}_h[n_h^{k-1}]$, entonces los iterados están bien definidos. También análogamente a la demostración de la proposición 4.1.4, tomando $F = Id$ y $\theta = 1$, deducimos

$$0 = \frac{1}{2} \|\nabla n_h^k\|^2 - \frac{1}{2} \|\nabla n_h^{k-1}\|^2 + (2 + \tau) \frac{\tau}{2} \|\nabla v_h^k\|^2, \quad (4.8)$$

para todo $k \geq 1$. Inductivamente obtenemos

$$\frac{1}{2} \|\nabla n_h^k\|^2 + (2 + \tau) \frac{\tau}{2} \sum_{j=1}^k \|\nabla v_h^j\|^2 = \frac{1}{2} \|\nabla n_h^0\|^2$$

para todo $k \geq 1$, en particular el algoritmo termina pues la serie $\sum_{j=1}^k \|\nabla v_h^j\|^2$ converge cuando $k \rightarrow \infty$.

Ahora, sea $z \in \mathcal{N}_h$, como $n_h^{k-1}(z) \cdot v_h^k(z) = 0$, tenemos

$$|n_h^k(z)|^2 - 1 = |n_h^{k-1}(z)|^2 + \tau^2 |v_h^k(z)|^2 - 1 = \dots = |n_h^0(z)|^2 - 1 + \tau^2 \sum_{j=1}^k |v_h^j(z)|^2 = \tau^2 \sum_{j=1}^k |v_h^j(z)|^2$$

pues $|n_h^0(z)|^2 = 1$. Entonces usando dos veces la equivalencia de normas del lema anterior, deducimos

$$\|\mathcal{I}_h(|n_h^k|^2) - 1\|_{L^1(\Omega)} \leq c \sum_{z \in \mathcal{N}_h} h_z^d \left| |n_h^k(z)|^2 - 1 \right| \leq c\tau^2 \sum_{j=1}^k \sum_{z \in \mathcal{N}_h} h_z^d |v_h^j(z)|^2 \leq c\tau^2 \sum_{j=1}^k \|v_h^j\|^2.$$

Finalmente, por la desigualdad de Poincaré 1.1.4 (recordar que por definición $\mathcal{O}_h[n_h^{k-1}] \subset H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$) y (4.7), tenemos

$$\|\mathcal{I}_h(|n_h^k|^2) - 1\|_{L^1(\Omega)} \leq c\tau^2 \sum_{j=1}^k \|v_h^j\|^2 \leq c\tau^2 \sum_{j=1}^k \|\nabla v_h^j\|^2 \leq c\tau \|\nabla n_h^0\|^2.$$

□

Análogamente al algoritmo I, la igualdad (4.8) nos asegura que la energía no crece en cada iteración.

Observación 4.1.7. *Notar que la discrepancia en la restricción de largo es siempre por exceso, pues*

$$|n_h^k(z)|^2 - 1 = \tau^2 \sum_{j=1}^k |v_h^j(z)|^2 \geq 0,$$

y que para pasos τ muy grandes no hay mucho control.

Terminamos la sección con un lema que muestra que el control de la discrepancia de la restricción implica que en el límite $(h, \tau) \rightarrow (0, 0)$ la restricción en el largo se cumple.

Lema 4.1.8. *Sea $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ una familia de triangulaciones regular. Si $\{n_h\}_{h>0} \subset H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ es una sucesión tal que $n_h \in \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)$, $n_h \rightarrow n$ en $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ cuando $h \rightarrow 0$, y*

$$\|\mathcal{I}_h(|n_h|^2) - 1\|_{L^1(\Omega)} \rightarrow 0$$

cuando $h \rightarrow 0$. Entonces $|n| = 1$ c.t.p en Ω .

Demostración. Veamos que $\| |n|^2 - 1 \|_{L^1(\Omega)} = 0$. Por la desigualdad triangular,

$$\| |n|^2 - 1 \|_{L^1(\Omega)} \leq \| |n|^2 - |n_h|^2 \|_{L^1(\Omega)} + \| |n_h|^2 - \mathcal{I}_h(|n_h|^2) \|_{L^1(\Omega)} + \| \mathcal{I}_h(|n_h|^2) - 1 \|_{L^1(\Omega)}.$$

Por hipótesis, el tercer termino se anula cuando $h \rightarrow 0$, y para el primero, usando la desigualdad de Cauchy-Schwartz, tenemos

$$\| |n|^2 - |n_h|^2 \|_{L^1(\Omega)} = \| (|n| - |n_h|)(|n| + |n_h|) \|_{L^1(\Omega)} \leq \| |n - n_h|, |n| + |n_h| \| \leq \|n - n_h\| \| |n| + |n_h| \| \rightarrow 0$$

si $h \rightarrow 0$, pues como $n_h \rightarrow n$ en $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$ cuando $h \rightarrow 0$ tenemos que $\| |n| + |n_h| \|$ está acotado en $L^2(\Omega)$ y $n_h \rightarrow n$ en $L^2(\Omega; \mathbb{R}^m)$ si $h \rightarrow 0$.

Para el segundo termino sea $T \in \mathcal{T}_h$, observar que debido a la desigualdad de Hölder, tenemos

$$\| |n_h|^2 - \mathcal{I}_h(|n_h|^2) \|_{L^1(T)} \leq |T|^{\frac{1}{2}} \left(\int_T \| |n_h|^2 - \mathcal{I}_h(|n_h|^2) \|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \leq ch_T^{\frac{d}{2}} \| |n_h|^2 - \mathcal{I}_h(|n_h|^2) \|_{L^2(T)}.$$

Entonces por el teorema de estimaciones de la interpolación nodal 1.3.13, deducimos

$$\| |n_h|^2 - \mathcal{I}_h(|n_h|^2) \|_{L^1(T)} \leq ch_T^{\frac{d}{2}} \| |n_h|^2 - \mathcal{I}_h(|n_h|^2) \|_{L^2(T)} \leq ch_T^{\frac{d}{2}} h_T^2 \| D^2 |n_h|^2 \|_{L^2(T)}.$$

Ahora como $D^2 n_h = 0$ en T tenemos $D^2 |n_h|^2 = 2 \nabla n_h \otimes \nabla n_h$, entonces usando las estimaciones inversas 1.3.16 y con un argumento similar al de las estimaciones de la proposición 3.3.1, deducimos

$$\begin{aligned} \| |n_h|^2 - \mathcal{I}_h(|n_h|^2) \|_{L^1(T)} &\leq ch_T^{\frac{d}{2}} h_T^2 \| D^2 |n_h|^2 \|_{L^2(T)} \\ &\leq ch_T^{\frac{d}{2}} h_T^2 \| \nabla n_h \otimes \nabla n_h \|_{L^2(T)} \\ &\leq ch_T^{\frac{d}{2}} h_T^2 \| |\nabla n_h|^2 \|_{L^2(T)} \\ &= ch_T^{\frac{d}{2}} h_T^2 \| \nabla n_h \|_{L^4(T)}^2 \\ &\leq ch_T^{\frac{d}{2}} h_T^2 h_T^{\frac{d}{4} - \frac{d}{2}} \| \nabla n_h \|_{L^2(T)} h_T^{\frac{d}{4} - \frac{d}{2}} \| \nabla n_h \|_{L^2(T)}^2 \\ &\leq ch_T^2 \| \nabla n_h \|_{L^2(T)}^2. \end{aligned}$$

Entonces sumando en $T \in \mathcal{T}_h$ y usando que $(\mathcal{I}_h)_{h>0}$ es regular, tenemos

$$\| |n_h|^2 - \mathcal{I}_h(|n_h|^2) \|_{L^1(\Omega)} \leq ch^2 \| \nabla n_h \|_{L^2(T)}^2 \rightarrow 0$$

cuando $h \rightarrow 0$, porque la sucesión $\{n_h\}_{h>0}$ es acotada en $H^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$. Entonces $|n| = 1$ c.t.p en Ω . \square

4.2. Experimentos numéricos.

En esta sección trabajamos sobre los experimentos numéricos para poner a prueba los dos algoritmos y ver algunas de las consecuencias de las proposiciones 4.1.4 y 4.1.6. Sea \mathcal{T}_h una triangulación y $\mathcal{N}_h = \{z_i\}_{i=1}^L \subset \bar{\Omega}$ su conjunto de nodos. Si $n_h \in \mathcal{L}^1(\mathcal{T}_h)^m$ entonces

$$n_h = \sum_{i=1}^L n_i \varphi_{z_i}$$

con $n_i = n(z_i) \in \mathbb{R}^m$ para todo $z_i \in \mathcal{N}_h$. Entonces vamos a identificar a n_h con el vector $N_h \in \mathbb{R}^{mL}$ definido como

$$N_h = \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ \vdots \\ n_L \end{pmatrix},$$

es decir, colgamos los valores nodales en un vector columna. Luego, $v_h \in \mathcal{O}_h[n_h]$ sii. $B_{N_h} V_h = 0$ donde $B \in \mathbb{R}^{L \times mL}$ es la matriz definida como

$$B_{N_h} = \begin{pmatrix} n_1^T & 0 & \dots & 0 \\ 0 & n_2^T & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & n_L^T \end{pmatrix}.$$

Ya que $B_{N_h} V_h = (n_1 \cdot v_1, \dots, n_L \cdot v_L)$. También observar que

$$\langle \nabla n_h, \nabla v_h \rangle = N_h^T A_m V_h,$$

donde $A_m \in \mathbb{R}^{mL \times mL}$ es la matriz de rigidez en $\mathcal{L}_D^1(\mathcal{T}_h)^m$. Entonces, los problemas (4.3) y (4.6) son equivalentes a hallar $V \in \mathbb{R}^{mL}$ tal que

$$V \in \text{Ker}(B_{N_h}), \quad W^T A_m V = W^T b \quad \text{para todo } W \in \text{Ker}(B_{N_h}),$$

donde $b = -\frac{1}{(1+\theta\tau)} A_m N_h$ para el algoritmo I y $b = -\frac{1}{(1+\tau)} A_m N_h$ para el algoritmo II. La implementación se basa en el siguiente lema.

Lema 4.2.1. $V_h \in \mathbb{R}^{mL}$ cumple

$$V_h \in \text{Ker}(B_{N_h}), \quad W^T A_m V_h = W^T b \quad \text{para todo } W \in \text{Ker}(B_{N_h})$$

sii. existe $\Lambda \in \mathbb{R}^L$ tal que

$$\begin{pmatrix} A_m & B_{N_h}^T \\ B_{N_h} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V \\ \Lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Vamos a realizar los experimentos para el caso $m = 2$ y $d = 2$. En la siguiente página se muestra una implementación realizada en *FreeFem++*.

```

int n = 200; real epsi = 1e-5; real tau = 20; real theta = 1; real erro = 1; int itmax =1000;
///// Auxiliares /////
macro Grad(u) [dx(u), dy(u)]//
func matrix ceros (int n, int m) {matrix A; A = A.resize(n,m); return A;}
func real[int] proy(real[int] x, int n) {
    for(int i = 0; i < n; i++){
        real nor = sqrt( x(2*i)*x(2*i) + x(2*i+1)*x(2*i+1) ); x(2*i) = x(2*i)/nor; x(2*i+1) =
            x(2*i+1)/nor;}
    return x;}
func real[int] rand(int n){
    real[int] randx(n);
    for(int i = 1; i<n; i++){real r = randreal3(); randx(i) = r; }
    return randx;}
border C(t=0, 2*pi) {x=cos(t); y=sin(t);}
mesh Th = buildmesh(C(n));
fespace Vh(Th, P1); fespace Vh2(Th, [P1,P1]);
//Vertices del borde (Guardados en indices2)
int nv = Th.nv;
varf On2(u,v) = on(C, u=1); real[int] on2=On2(0,Vh,tgv=1); int[int] indices2(on2.sum);
for(int i=0,j=0;i<Vh.ndof;++i) if(on2[i]) {indices2[j] = i; ++j;}
//Condiciones de borde
func udx = x/sqrt(x^2+y^2); func udy = y/sqrt(x^2+y^2); Vh udxh = udx, udyh = udy;
//Energia de Dirichlet y matriz de rigidez 2d
varf Lag([v1, v2], [w1, w2])
    = int2d(Th)(Grad(v1)''* Grad(w1) + Grad(v2)''* Grad(w2)) + on(C, v1 = udx) + on(C, v2 =
        udy);
matrix A = Lag(Vh2, Vh2, solver = sparsesolver);
real[int] randx = rand(nv), randy = rand(nv); Vh uu01, uu02; uu01[] = randx; uu02[] = randy;
for(int i = 0; i < indices2.n ; i++) { uu01[](indices1(i)) = udxh1[](indices2(i));
    uu02[](indices1(i)) = udyh1[](indices2(i)); }
Vh2 [v1, v2], [u01, u02] = [uu01, uu02]; u01[] = proy(u01[], nv);
real[int] vv(3*nv), b(3*nv), aux(2*nv);

for(int i = 0; i<itmax & erro >= epsi; i++){
    matrix B = ceros(nv, 2*nv);
    for(int i = 0; i < nv; i++){
        B(i,2*i) = u01[](2*i); B(i,2*i+1) = u01[](2*i+1);}
    matrix M = [[A, B''], [B, ceros(nv, nv)]];//La matriz bloque
    set(M, solver = sparsesolver);
    aux = A*u01[]; aux = aux*(-1/(theta*tau+1));
    for(int i = 0; i < 2*nv; i++) {b(i) = aux(i);}
    for(int i = 0; i < nv; i++) {b(i+2*nv) = 0;}
    vv = M^-1*b;
    v1[] = vv;
    u01[] = u01[] + tau*v1[];
    if (1) {u01[] = proy(u01[], nv);}
    erro = sqrt(int2d(Th)(Grad(v1)''* Grad(v1) + Grad(v2)''* Grad(v2)));}

```

Normal saliente

Retomemos el ejemplo de la observación 3.2.3. Si $d = 2$, entonces no hay minimizantes porque $\mathcal{A} = \emptyset$, pero dada una familia de triangulaciones $(\mathcal{T}_h)_{h>0}$ de $\Omega = B(0, 1)$, la misma observación muestra que tenemos minimizantes en \mathcal{A}_h para todo $h > 0$.

Para este primer ejemplo vamos a considerar una triangulación con 2030 nodos, $\varepsilon = 1 \times 10^{-5}$ y $\theta = 1$.

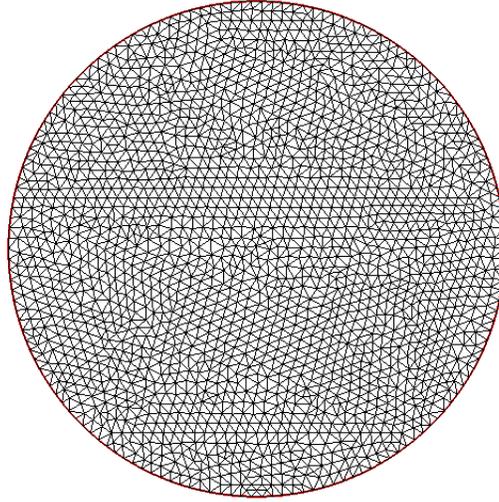


Figura 4.1: Triangulación de Ω .

Buscamos ver una reducción de la energía respecto a la configuración inicial, en efecto:

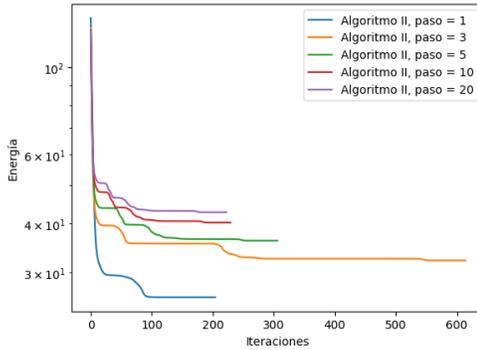


Figura 4.2: Reducción de la energía de los iterados del algoritmo II para distintos τ .

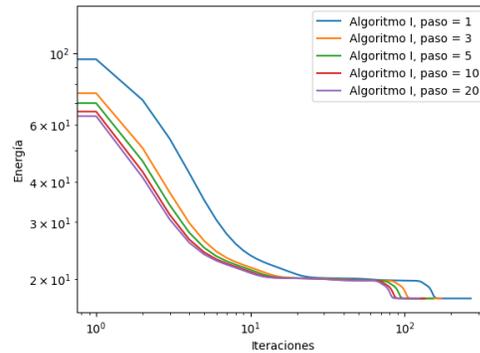


Figura 4.3: Reducción de la energía de los iterados del algoritmo I para distintos τ .

Observamos que la energía se reduce y que en el caso del algoritmo I el paso τ puede ser arbitrario. Como muestra la proposición 4.1.6 en el algoritmo II la energía alcanzada tiene correlación negativa con el paso. Las figuras 4.8 muestran una visualización del output de menor energía encontrados numéricamente para los dos algoritmos.

Para el resto de este análisis vamos a tomar el algoritmo I y $\tau = 20$. Como $\mathcal{A} = \emptyset$, por los resultados vistos para mapas armónicos vistos en la sección 3.3 esperamos observar que los output $\{n_h^*\}_{h>0} \subset \mathcal{A}_h$

cumplan $I(n_h) \rightarrow \infty$ cuando $h \rightarrow 0$. De hecho, recordando la observación 3.2.3, tenemos

$$\int_{\Omega} \left| \nabla \left(\frac{x}{|x|} \right) \right|^2 dx = \omega_1 \int_0^1 r^{-1} dr = \lim_{r \rightarrow 0^+} -\log(r),$$

por lo que, para un iterado inicial fijo, esperamos que la energía aumente como $-C \log(h)$ para algún $C > 0$ cuando $h \rightarrow 0$.

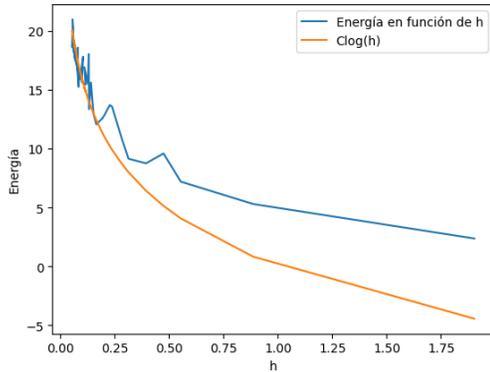


Figura 4.4: Energía en función de h , tomamos $n_h^0 \equiv (1, 0)$ en Ω .

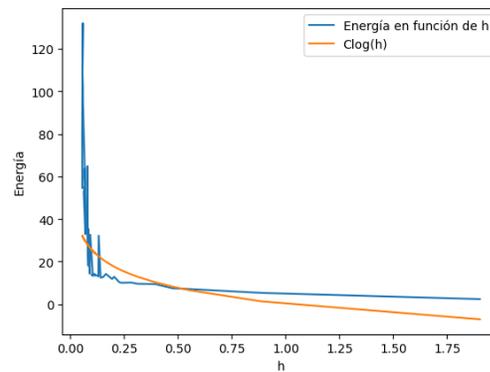


Figura 4.5: Energía en función de h , para cada h tomamos un iterado inicial aleatorio.

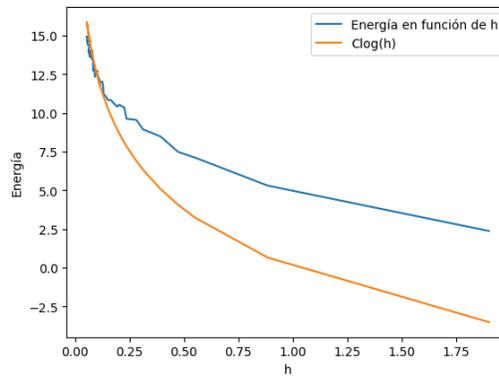


Figura 4.6: Energía cuando $h \rightarrow 0$, tomamos $n_h^0(x) = \frac{x}{|x|}$. Claramente en este caso hay poca variación de la energía.

Terminamos este ejemplo mostrando cómo evoluciona el descenso por gradiente en los casos de las figuras 4.8.

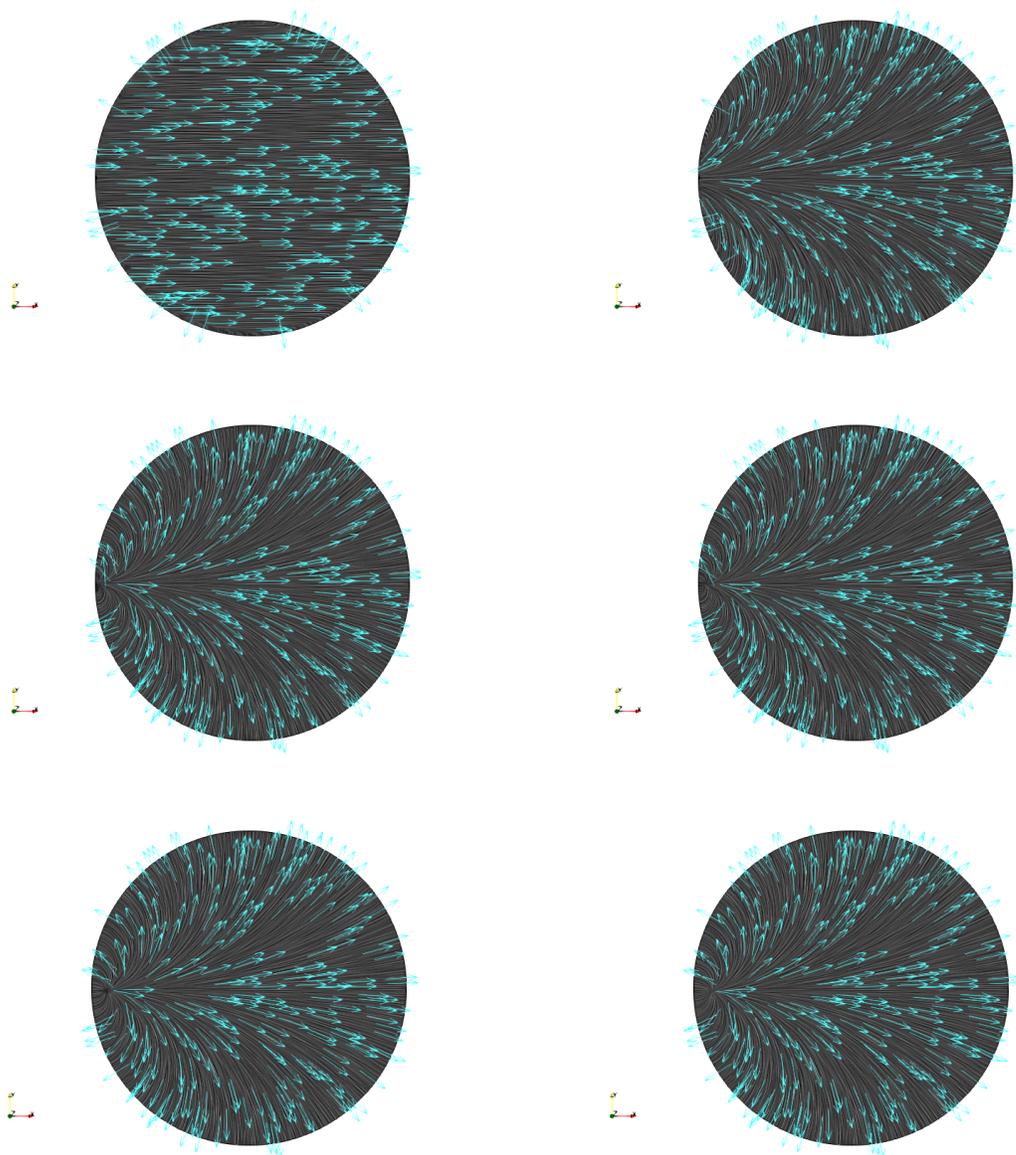


Figura 4.7: Estado inicial, algunas iteraciones y output del algoritmo I. Se muestra el valor en 300 nodos distribuidos al azar.

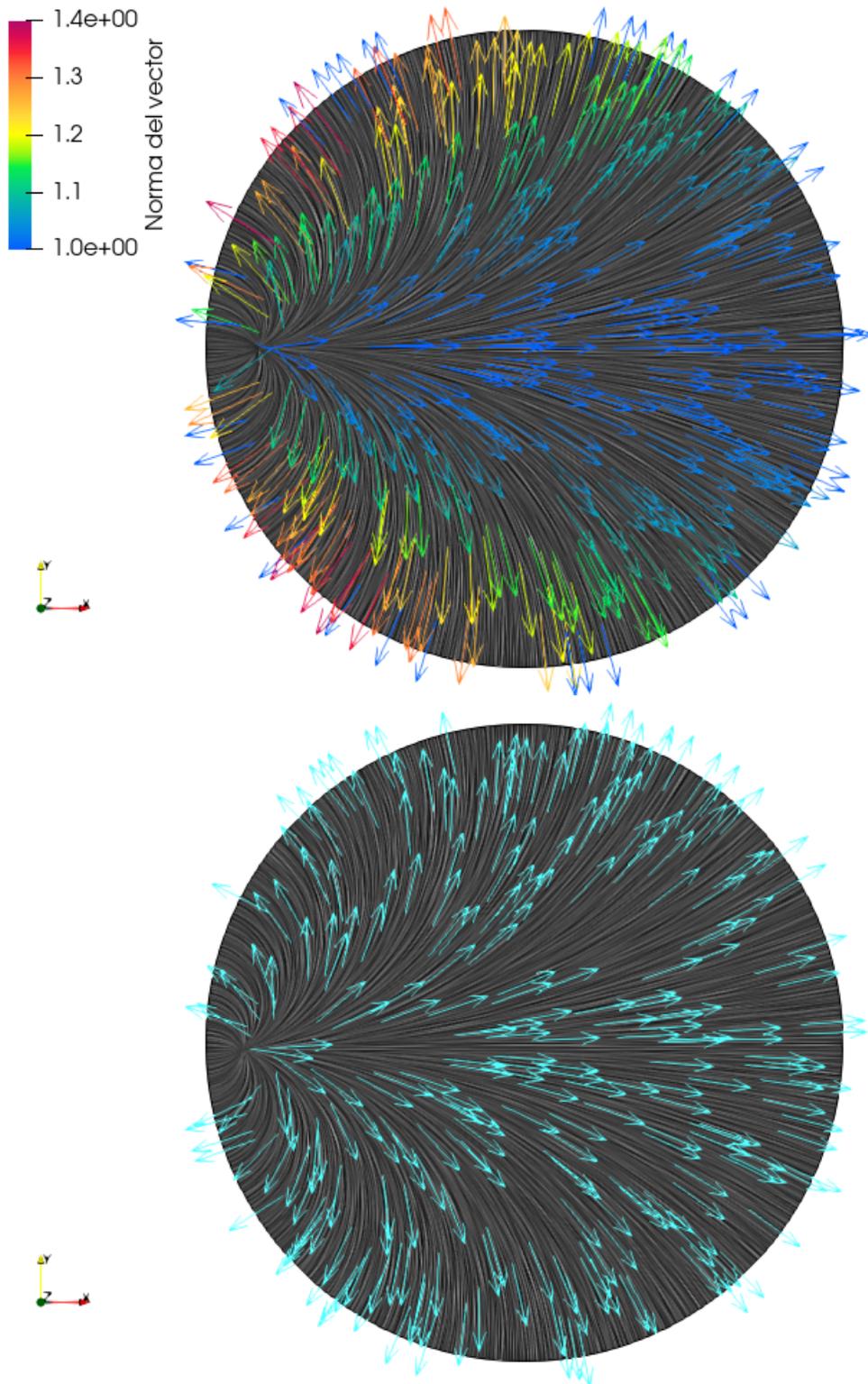


Figura 4.8: Triangulación con el output del Algoritmo II y del Algoritmo I respectivamente.

Condición de Neumann no homogénea.

Analizamos numéricamente el tratamiento de las condiciones de Neumann no homogéneas. Dada $g \in L^2(\Gamma_N; \mathbb{R}^m)$ con $\Gamma_N := \partial\Omega \setminus \Gamma_D$, la condición de Neumann $\partial_\nu n = g$ la podemos imponer agregando su contribución a la energía de Dirichlet, minimizando el funcional

$$I(u) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx - \int_{\Gamma_N} g \cdot u ds.$$

Si $n \in \mathcal{A}$ es un minimizante entonces en este caso la ecuación de Euler-Lagrange toma la forma,

$$\langle \nabla n, \nabla w \rangle = \langle |\nabla n|^2 n, w \rangle + \langle g, w \rangle_{L^2(\Gamma_N)}$$

para toda $w \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m) \cap L^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$. En efecto, recordando el argumento del teorema 3.2.1, para toda $w \in H_D^1(\Omega; \mathbb{R}^m) \cap L^1(\Omega; \mathbb{R}^m)$, tenemos

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} I(n_r) = \int_{\Omega} \nabla \left(\frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} n_r \right) \cdot n_r dx - \int_{\Gamma_N} g \cdot \left(\frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r=0} n_r \right) ds \\ &= \langle \nabla n, \nabla w \rangle - \langle |\nabla n|^2 n, w \rangle - \langle g, w \rangle_{L^2(\Gamma_N)} + \int_{\Gamma_N} g \cdot n(n \cdot w) ds \\ &= \langle \nabla n, \nabla w \rangle - \langle |\nabla n|^2 n, w \rangle - \langle g, w \rangle_{L^2(\Gamma_N)} + \int_{\Gamma_N} \partial_\nu n \cdot n(n \cdot w) ds \\ &= \langle \nabla n, \nabla w \rangle - \langle |\nabla n|^2 n, w \rangle - \langle g, w \rangle_{L^2(\Gamma_N)}, \end{aligned}$$

pues $\partial_\nu n \cdot n = 0$.

Por lo que en este caso buscamos $v_h^k \in \mathcal{O}_h[n_h^{k-1}]$ tal que

$$\langle \nabla v_h^k, \nabla w \rangle + \langle \nabla(n_h^{k-1} + \theta \tau v_h^k), \nabla w_h \rangle + \langle g_h, w_h \rangle_{L^2(\Gamma_N)} = 0 \quad (4.9)$$

para toda $w_h^k \in \mathcal{O}_h[n_h^{k-1}]$, donde $g_h := \mathcal{I}_h g$.

A continuación mostramos algunos ejemplos con condición de Neumann no homogénea. Tomaremos $\Omega = B(0, 1) \setminus B(0, r)$ para $r > 0$, $\Gamma_D = \partial B(0, 1)$ y $\Gamma_N = \partial B(0, r)$. La visualización está hecha con el método *Line Convolution Integral* (LIC).

Notar la presencia de singularidades en los dos ejemplos, en estos casos tampoco tenemos minimizantes en el caso continuo.

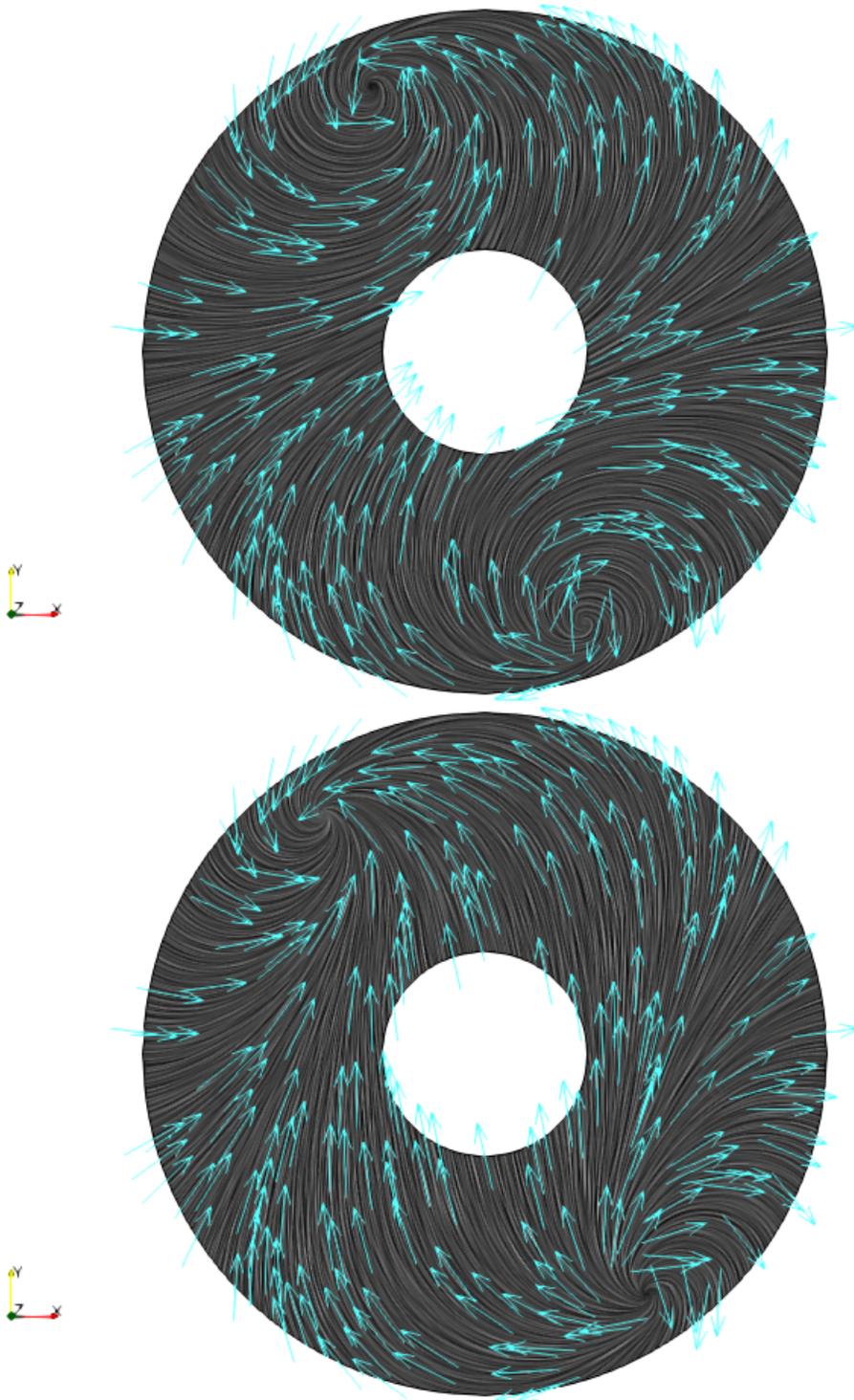


Figura 4.9: $n_D(x, y) = (x^2 - y^2, 2xy)$ esto es $z \mapsto z^2$ en \mathbb{C} . Arriba $g = 0$ y abajo $g(x, y) = (10, -10)$.

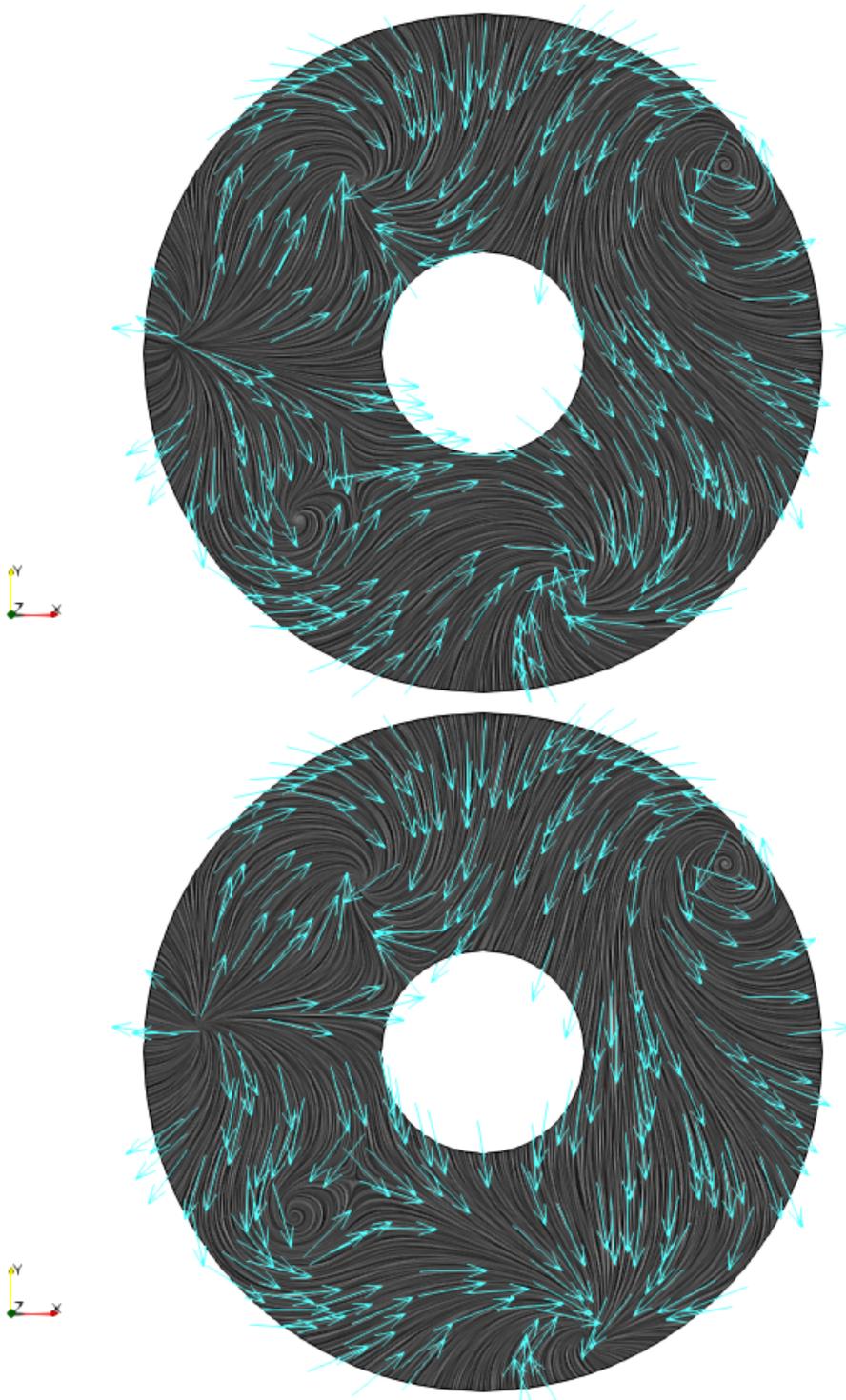


Figura 4.10: $n_D(x, y) = (x^3 - y^2x - 2xy^2, 2x^2y - y^3)$ esto es $z \mapsto z^3$ en \mathbb{C} . Arriba $g = 0$ y abajo $g(x, y) = (0, 10)$.

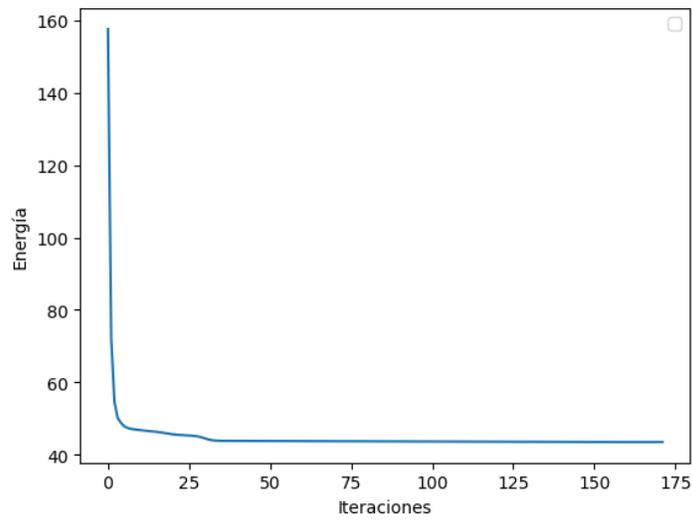
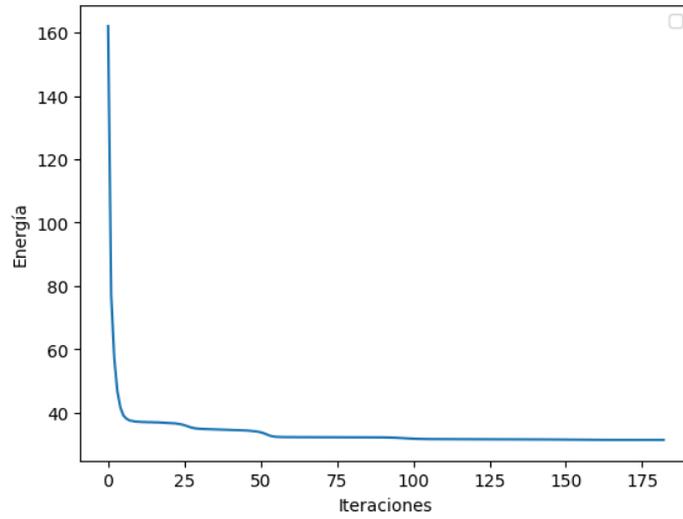


Figura 4.11: Energía en función de las iteraciones para los ejemplos 4.9 y 4.10 respectivamente.

Discrepancia algoritmo II.

Por último queremos observar la estimación de la discrepancia entre los campos límite y discretos obtenidos que fue probada en la proposición 4.1.6. Tomaremos $\Omega = B(0, 1)$, $\Gamma_D = \partial\Omega$, $n_D(x, y) = (e^{-x}, e^y)/\sqrt{e^{-2x} + e^{2y}}$ y $n_h^0 \in \mathcal{A}_h$ generado aleatoriamente. Lo vamos a hacer de la siguiente manera; buscaremos outputs n_τ^* para $\tau \rightarrow 0$ y esperamos observar que

$$\|\mathcal{I}_h(|n_\tau^*|^2) - 1\|_{L^1(\Omega)} \leq c\tau \|\nabla n_h^0\|^2.$$

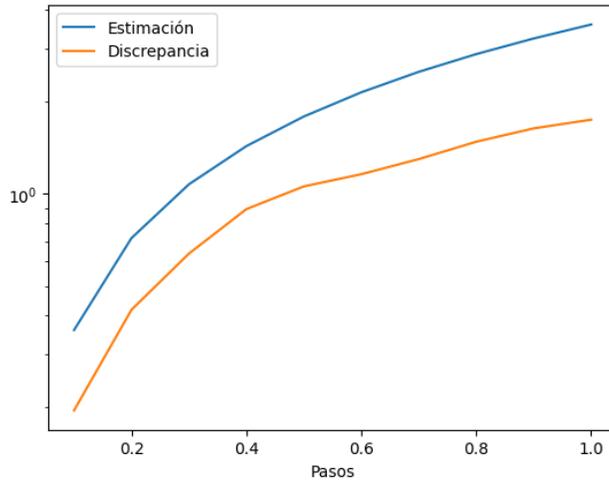


Figura 4.12: En naranja $\|\mathcal{I}_h(|n_\tau^*|^2) - 1\|_{L^1(\Omega)}$ en función de τ y en azul $c\tau \|\nabla n_h^0\|^2$ en función de τ donde $c \simeq 1 \times 10^{-3}$, para $\tau \in \{\frac{t}{10} : t \in [1, 10]\}$.

Observamos lo visto en la proposición, la restricción en el largo se impone en el límite y el error en la restricción del largo es menor a la estimación $c\tau \|\nabla n_h^0\|^2$. Por otro lado, la estimación sobrestima el valor de la discrepancia, por lo que tal vez existen cotas más finas para este error.

Bibliografía

- [1] F. Alouges. A new algorithm for computing liquid crystal stable configurations: the harmonic mapping case. *SIAM journal on numerical analysis*, 34(5):1708–1726, 1997.
- [2] J. M. Ball. Mathematics and liquid crystals. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 647(1):1–27, 2017.
- [3] S. Bartels. *Numerical methods for nonlinear partial differential equations*, volume 47. Springer, 2015.
- [4] S. Bartels. Projection-free approximation of geometrically constrained partial differential equations. *Mathematics of Computation*, 85(299):1033–1049, 2016.
- [5] L. C. Evans. *Partial differential equations*, volume 19. American Mathematical Society, 2022.
- [6] F. Hecht. New development in freefem++. *J. Numer. Math.*, 20(3-4):251–265, 2012.
- [7] E. G. Virga. *Variational theories for liquid crystals*. CRC Press, 2018.