

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

TESIS PRESENTADA COMO PARTE DE LOS REQUISITOS DE LA UNIVERSIDAD
NACIONAL DEL LITORAL PARA LA OBTENCIÓN DEL GRADO ACADÉMICO DE

Doctor en Matemática

EN EL CAMPO DE:

Ecuaciones Diferenciales y Análisis Numérico

TÍTULO DE LA TESIS:

**Sobre un modelo matemático de difusión-disolución.
Propiedades cualitativas y aproximación de soluciones.**

INSTITUCIÓN DONDE SE REALIZÓ:

Instituto de Matemática Aplicada del Litoral (IMAL)
Departamento de Matemática – FIQ – UNL

AUTOR:

María Emilia Castillo

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Pedro Morin

DEFENDIDA ANTE EL JURADO COMPUESTO POR:

Dr. Gabriel Acosta

Dra. Gabriela Armentano

Dr. Rubén Spies

AÑO DE PRESENTACIÓN: 2013

Agradecimientos

Quiero agradecer en primer lugar a mi Director Pedro Morin, porque sin su ayuda esta tesis no podría haber sido; por sus aportes fundamentales a mi formación, en especial matemática y también humana, a través de su ejemplo.

A mi familia y a mis amigos de Tucumán, por bancarme todas mis ausencias, en momentos importantes y no tanto, mis visitas fugaces, las despedidas y bienvenidas.

A Marilina, Tefi y Maikel, por el aguante de tantos años. Al Edu por el aguante de más años y a Marisa por sus buenos consejos. A Nacho, Pablo, Hanibal, Pame, Maria y Diego, porque siempre me brindaron una mano. A los chicos de la ofi, Mauri, Marce y Quique, y a la Jose por todo lo compartido, lo bueno y lo malo.

A mis profesores, por compartirme sus conocimientos.

A los miembros del jurado, por haber aceptado leer y comentar este trabajo.

Al CONICET por otorgarme la beca, porque sin dicho soporte económico, no me hubiera sido posible hacer esta tesis.

A todo el IMAL, y en especial gracias a Coca, Marce y Betty por las múltiples colaboraciones.

Resumen

En este trabajo estudiamos la liberación de droga desde un dispositivo polimérico que contiene un solo tipo de droga, en forma disuelta y dispersa, dando lugar a fenómenos de difusión y disolución de manera simultánea. El modelo considera que la droga sólida se encuentra en microesferas, de igual densidad, que pueden diferir en masa y volumen pero tan pequeñas que no afectan la difusión de droga disuelta. Además suponemos que las partículas de droga sólida mantienen su forma esférica al disolverse y que la matriz polimérica que contiene la droga es inerte.

Matemáticamente, el dispositivo, que representaremos con Ω , es un conjunto acotado, abierto y conexo con frontera Lipschitz contenido en \mathbb{R}^d , donde $d = 1, 2$ ó 3 . Como es habitual, en el caso $d = 1$, estamos suponiendo que el fenómeno es independiente de las otras dos variables espaciales y en el caso $d = 2$, sólo estamos considerando dos variables espaciales de las 3. La frontera del dispositivo será denotada por $\partial\Omega = \Gamma_B \cup \Gamma_N$ y en ella tenemos dos tipos de condiciones de borde: en Γ_B una condición de borde de tipo Robin, que es la zona de la frontera por la cual el dispositivo libera droga al medio y en Γ_N una condición de borde aislado de tipo Neuman.

Consideramos el siguiente modelo:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_t - D\Delta C = \beta_1(C_s - C)a, \text{ en } \Omega \times [0, T], \\ a_t = -\beta_2(C_s - C)\sqrt{N}\sqrt{a_+}, \text{ en } \Omega \times [0, T], \\ C(\cdot, 0) = C^0(\cdot) \text{ en } \Omega, \\ a(\cdot, 0) = a^0(\cdot) \text{ en } \Omega, \\ D\nabla C \cdot n = 0 \text{ en } \Gamma_N \times [0, T], \\ D\nabla C \cdot n = k_B(C_B - C) \text{ en } \Gamma_B \times [0, T]. \end{array} \right.$$

donde C denota la concentración de la droga disuelta; a el área de las esferas de droga sólida (por unidad de volumen); D el coeficiente de difusividad de la droga disuelta; β_1 ,

β_2 son constantes que dependen del tipo de droga y del polímero que forma la matriz; C_s es la concentración de saturación de la droga en el polímero, C_B es la concentración de droga en el medio donde se encuentra el dispositivo y N es la densidad de microesferas por unidad de volumen.

En esta tesis presentamos una deducción del modelo, demostramos la existencia de soluciones débiles bajo hipótesis generales sobre los datos del problema, y la unicidad y regularidad bajo hipótesis un poco más restrictivas. Mostramos la existencia de múltiples soluciones en algunos casos. Proponemos un método numérico para la aproximación de las soluciones y obtenemos estimaciones a priori para el error de discretización. Finalmente utilizamos el método numérico desarrollado para obtener información cualitativa y cuantitativa acerca de las soluciones de este sistema de ecuaciones.

El resto de la tesis se organiza de la siguiente manera:

- En el Capítulo 1 presentamos el problema y deducimos el modelo matemático para el mismo, planteando una formulación débil.
- En el Capítulo 2 demostramos la existencia de soluciones débiles y estudiamos la unicidad o la falta de unicidad en diferentes situaciones.
- En el Capítulo 3 demostramos resultados de regularidad de las soluciones bajo distintas condiciones iniciales.
- En el Capítulo 4 desarrollamos un método numérico basado en elementos finitos para la resolución de las ecuaciones en estudio y obtenemos estimaciones de error a priori.
- El Capítulo 5 consta de dos partes. En la primera parte verificamos experimentalmente los órdenes de convergencia de los errores con una solución exacta, verificando el alcance de los resultados teóricos. En segundo lugar mostramos el comportamiento cualitativo y cuantitativo de las soluciones, con geometrías y parámetros de un dispositivo comercial utilizado en ganadería.
- En el Apéndice presentamos un resumen de resultados de Análisis Funcional, relacionados a espacios de Banach y Hilbert con dominio en espacio-tiempo, que son necesarios para todo el desarrollo de esta tesis.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	v
1. Introducción	1
1.1. Deducción de las ecuaciones	2
1.2. Condiciones iniciales y de borde	6
1.3. Formulación débil	7
2. Existencia y unicidad	9
2.1. Planteo del problema	10
2.2. Aproximaciones de Galerkin	12
2.2.1. Existencia local de aproximaciones de Galerkin	12
2.2.2. Estabilidad y existencia global de las aproximaciones de Galerkin	18
2.3. Existencia de solución débil	22
2.3.1. Existencia de límite de C_n	23
2.3.2. Existencia de límite de a_n	26
2.3.3. Existencia de solución débil del problema auxiliar	35
2.3.4. Equivalencia entre el problema auxiliar y el original	40
2.4. Unicidad de solución	43
2.4.1. Concentración inicial por debajo de la de saturación	43
2.4.2. Concentración inicial mayor que la de saturación	45
3. Regularidad	47
4. Discretización y Análisis del error	59
4.1. Discretización	59

4.2. Estimación del error en la Semidiscretización espacial	61
4.3. Discretización total	71
5. Experimentos Numéricos	83
5.1. Validación del código	83
5.2. Aplicación a un dispositivo comercial	86
5.2.1. Solución del problema con sección transversal A-A'	89
5.2.2. Comparación con datos experimentales	92
5.2.3. Solución del problema con sección transversal B-B'	94
5.2.4. Comparación con datos experimentales	96
5.2.5. Combinación con diferentes secciones transversales	97
6. Apéndice	99
6.1. Desigualdades	99
6.2. Algunos resultados sobre Espacios de Sobolev	100
6.3. Sobre funciones a valores vectoriales	103
6.3.1. Integral de Bochner	103
6.3.2. Definiciones y resultados útiles	107

Introducción

En las dos últimas décadas, los sistemas que liberan droga de forma controlada y sostenida en el tiempo han adquirido una creciente importancia en el área médica y farmacéutica [ECDD]. Esto es debido a que los sistemas de liberación controlada de drogas (LCD) permiten obtener: i) cinéticas de liberación predecibles y reproducibles por un período de tiempo prolongado, ii) niveles plasmáticos sostenidos del fármaco con fluctuaciones mínimas, iii) disminución de efectos tóxicos secundarios, de pérdida de droga y del número de dosificaciones, iv) protección de compuestos bioactivos sensibles a ataques enzimáticos o degradación ácida debido al pH local, y v) solución de problemas de estabilidad de drogas de vida media corta [BSBK].

Los sistemas para la LCD requieren el uso de materiales que posean una alta biocompatibilidad, generalmente polímeros naturales o sintéticos, que logren una dosificación del fármaco dentro de su ventana terapéutica [RB, RVP]. Una de las áreas de mayor interés en esta tecnología es el desarrollo de sistemas de polímeros biodegradables, que permiten la administración sistémica o sitio-específica de agentes farmacéuticos sin la necesidad de extraer posteriormente el sistema de liberación [L].

Desde el trabajo pionero de Higuchi realizado a principios de década de 1960, existe una gran cantidad de trabajos de modelado de liberación de drogas desde matrices poliméricas permanentes y biodegradables, insaturadas y sobresaturadas liberadas en diversos medios bajo diferentes condiciones. Dependiendo del caso, soluciones rigurosas, aproximadas y numéricas han sido reportadas, en general, para geometrías simples: plana, cilíndrica y esférica [CG, CLG, HILCG]. Al presente, todos los estudios sobre la performance de sistemas similares al de interés están basados en experimentación de laboratorio con una pobre asistencia de modelos matemáticos más generales para interpretar, mucho menos predecir, tanto el patrón de degradación de la plataforma polimérica como de

liberación de la droga.

El objetivo de este trabajo es estudiar propiedades cualitativas de un modelo de difusión y disolución de droga en dispositivos poliméricos no- biodegradables.

Hasta el momento, el único análisis matemático realizado sobre las ecuaciones de difusión y disolución consistió en hallar soluciones exactas en geometrías muy simples, bajo supuestos que permiten simplificarlas a problemas de una dimensión espacial. Más aún, bajo la hipótesis de casi-estacionariedad (difusión mucho más rápida que la disolución) las ecuaciones suelen transformarse en sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias con dos o tres incógnitas.

En este trabajo realizamos un análisis matemático general de un modelo que involucra la interacción de los fenómenos físicos de difusión y disolución, obteniendo resultados que son válidos en una gran familia de geometrías de cualquier dimensión espacial, y que no dependen de la relación entre las velocidades de difusión y de la disolución.

Concretamente, estudiamos la liberación de droga desde un dispositivo polimérico permanente que contiene un solo tipo de droga, en forma disuelta y dispersa, dando lugar a fenómenos de difusión y disolución de manera simultánea. El modelo considera que la droga sólida se encuentra en microesferas, de igual densidad, que pueden diferir en masa y volumen pero tan pequeñas que no afectan la difusión de droga disuelta. Además se supone que las microesferas mantienen su forma al disolverse y que la matriz polimérica que contiene la droga es inerte.

En la sección siguiente deduciremos las ecuaciones a partir de principios físico-químicos elementales y terminaremos este capítulo presentando una formulación débil del sistema de ecuaciones.

1.1. Dedución de las ecuaciones

Llamaremos $m = m(x, t)$ [g] a la masa de droga en estado sólido (en micropartículas esféricas) por unidad de volumen a tiempo t . Es decir, $\int_R m(x, t) dx$ es la cantidad de droga que hay en la región R en el instante t . La variable $C = C(x, t)$ [g/m³] denotará la concentración de droga disuelta, es decir, la masa de droga disuelta por unidad de volumen, a tiempo t . Así $\int_R C(x, t) dx$ es la cantidad de droga disuelta que hay en la

región R en el instante t .

Planteamos el balance de droga disuelta de la siguiente manera, en una región arbitraria R del dominio Ω :

cantidad de droga disuelta que ingresa en R a través de ∂R por unidad de tiempo	+	cantidad de droga que disuelven las microesferas por unidad de tiempo en R	=	tasa de cambio de la cantidad de droga disuelta en R
---	---	---	---	---

Si denotamos con \vec{V} el flujo de masa de droga disuelta, obtenemos, en términos matemáticos la siguiente expresión equivalente:

$$-\int_{\partial R} \vec{V} \cdot n \, ds - \frac{d}{dt} \int_R m \, dx = \frac{d}{dt} \int_R C \, dx,$$

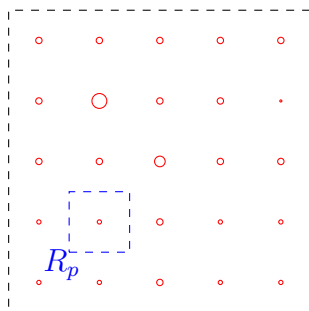
donde n denota la normal exterior a R en ∂R . Según la ley de Fick: $\vec{V} = -D\nabla C$, con D el coeficiente de difusividad de la droga disuelta en la matriz, y por el teorema de la divergencia, obtenemos

$$\int_R D\Delta C \, dx - \frac{d}{dt} \int_R m \, dx = \frac{d}{dt} \int_R C \, dx. \tag{1.1}$$

Como esta relación se cumple para toda región (suave) R dentro del dominio Ω resulta que C cumple la siguiente ecuación, en Ω :

$$D\Delta C - \frac{\partial m}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial t}.$$

A continuación, hallaremos una expresión para $\frac{\partial m}{\partial t}$. Esquemáticamente, un corte transversal de nuestro dispositivo sería:



donde R_p son regiones del dominio que contienen una sola partícula en el instante inicial, disjuntas dos a dos y cubren todo el dominio.

Denotaremos con m_p la masa de una partícula p , con r_p su radio, con a_p su área y con x_p su posición. En [CLG] se propone la siguiente ecuación para la velocidad de disolución de una partícula:

$$\frac{dm_p(t)}{dt} = -k_D a_p(t)(C_s - C(x_p, t)), \quad (1.2)$$

donde $k_D[\text{cm s}^{-1}]$ es el coeficiente de disolución constante de una partícula de droga sólida. Esta ecuación nos dice, esencialmente, que la velocidad de disolución o de pérdida de masa de la partícula de droga sólida es proporcional al área y a la diferencia entre la concentración de saturación C_s y la concentración alrededor de la partícula.

Cuando m_p disminuye por disolución a tasa $\frac{dm_p}{dt}$, suponemos que aporta a la región R_p , $\frac{dm_p}{dt}$ g/s de droga de manera uniforme en la región R_p , es decir, aporta $\frac{dm_p}{dt} \frac{1}{|R_p|}$ g/s por unidad de volumen.

Luego podemos extender (1.2) para un $x \in R_p$ como

$$\frac{\partial m}{\partial t}(x, t) = \frac{dm_p}{dt} \frac{1}{|R_p|} = -k_D(C_s - C(x, t)) \frac{a_p}{|R_p|}.$$

Definimos la variable $a(x, t) = \frac{a_p}{|R_p|}$, área por unidad de volumen de droga sólida, y obtenemos una expresión para la derivada temporal de m en todo el dominio:

$$\frac{\partial m(x, t)}{\partial t} = -k_D a(x, t)(C_s - C(x, t)). \quad (1.3)$$

Como (1.1) se cumple para toda región suave R contenida en Ω y para todo $t \in (0, T)$ llegamos al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} C_t - D\Delta C = k_D(C_s - C)a, & \text{en } \Omega \times (0, T), \\ m_t = -k_D(C_s - C)a, & \text{en } \Omega \times (0, T). \end{cases}$$

Es decir, tenemos tres incógnitas, C , m y a con dos ecuaciones. Nuestro siguiente paso será eliminar m . Para ello denotemos con m_p^0 , r_p^0 y a_p^0 la masa, radio y área iniciales de

una partícula p . En consecuencia

$$\frac{a_p}{a_p^0} = \left(\frac{r_p}{r_p^0}\right)^2 \quad \text{y} \quad \frac{m_p}{m_p^0} = \left(\frac{r_p}{r_p^0}\right)^3, \quad \text{y luego} \quad a_p = a_p^0 \left(\frac{m_p}{m_p^0}\right)^{2/3}.$$

Derivando esta última ecuación respecto del tiempo y usando las relaciones anteriores, llegamos a

$$\frac{da_p}{dt} = \frac{2a_p^0}{3m_p^0} \frac{\sqrt{a_p^0}}{\sqrt{a_p}} \frac{dm_p}{dt}.$$

Reemplazando en (1.2)

$$\frac{da_p}{dt} = \frac{-2k_D a_p^{03/2}}{3m_p^0} \sqrt{a_p} (C_s - C(x_p, t)).$$

Por otro lado, si ρ_s es la densidad de la droga en estado sólido, y por ende de las microesferas, es decir, $\rho_s = \frac{m_p^0}{\frac{4}{3}\pi(r_p^0)^3}$ y recordamos que $a_p^0 = 4\pi(r_p^0)^2$, obtenemos:

$$\frac{da_p}{dt} = -\frac{4k_D \sqrt{\pi}}{\rho_s} \sqrt{a_p} (C_s - C(x_p, t)),$$

y haciendo consideraciones análogas a las hechas para la obtención de (1.3), llegamos a

$$\frac{\partial a(x, t)}{\partial t} = -\frac{4k_D \sqrt{\pi}}{\rho_s |R_p|^{1/2}} \sqrt{a(x, t)} (C_s - C(x, t)).$$

Finalmente, si llamamos $N(x)$ a la densidad de partículas por unidad de volumen, obtenemos:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{4k_D \sqrt{\pi} N(x)^{1/2}}{\rho_s} \sqrt{a} (C_s - C).$$

Resumiendo: hemos obtenido la siguiente ecuación para la cantidad de droga disuelta,

$$\frac{\partial C}{\partial t} - D\Delta C = k_D a (C_s - C),$$

donde

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{4k_D \sqrt{\pi} N(x)^{1/2}}{\rho_s} \sqrt{a} (C_s - C).$$

1.2. Condiciones iniciales y de borde

Supondremos que $a(x, 0) = a^0(x)$ y $C(x, 0) = C^0(x)$, con $a^0, C^0 \geq 0$ funciones dadas. Las suponemos no-negativas por lo que representan físicamente, área de partículas por unidad de volumen y concentración, respectivamente.

La frontera del dispositivo será denotada por $\partial\Omega = \Gamma_B \cup \Gamma_N$ y en ella tenemos dos tipos de condiciones de borde: en Γ_B una condición de borde de tipo Robin, que es la zona de la frontera por la cual el dispositivo libera droga al medio y en Γ_N una condición de borde aislado de tipo Neumann.

Resumiendo, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_t - D\Delta C = \beta_1(C_s - C)a, \text{ en } \Omega \times (0, T), \\ a_t = -\beta_2(C_s - C)\sqrt{N}\sqrt{a}, \text{ en } \Omega \times (0, T), \\ C(\cdot, 0) = C^0(\cdot) \text{ en } \Omega, \\ a(\cdot, 0) = a^0(\cdot) \text{ en } \Omega, \\ D\nabla C \cdot n = 0 \text{ en } \Gamma_N \times (0, T), \\ D\nabla C \cdot n = k_B(C_B - C) \text{ en } \Gamma_B \times (0, T), \end{array} \right. \quad (1.4)$$

donde C denota la concentración de la droga disuelta; a el área (por unidad de volumen) de las esferas de droga sólida; $\beta_1 = k_D$, $\beta_2 = \frac{4k_D\sqrt{\pi}}{\rho_s}$ son constantes que dependen del tipo de droga y del polímero usado para la matriz inerte; C_s es la concentración de saturación de la droga en el polímero, C_B es la concentración de droga en el medio donde se encuentra el dispositivo y N es la cantidad de microesferas por unidad de volumen. Observemos en la ecuación para a , que si $C < C_s$, el signo de la derivada temporal de a es negativo, luego las áreas son decrecientes y esto se corresponde con el hecho que las microesferas se están disolviendo.

Es interesante notar que la ecuación para la variable $a(x, t)$ no tiene derivadas espaciales, y que por lo tanto no se le imponen condiciones de borde. Esto implicará además que no habrá regularización del dato inicial. Veremos también que la regularidad puede incluso deteriorarse, debido a la raíz cuadrada que aparece en la expresión de a_t , que implicará, en algunas situaciones, que $a(x, t)$ será cero para t finito, y en otras, la falta de unicidad de solución.

1.3. Formulaci3n débil

Si guiendo el procedimiento estándar para hallar formulaciones débiles de problemas parab3licos, arribamos a la siguiente definici3n.

Definici3n 1.1. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio acotado con frontera Lipschitz $\partial\Omega = \Gamma_N \cup \Gamma_B$, y sean β_1, β_2, k_B y C_B constantes positivas, $N \in L^\infty(\Omega)$, $N \geq 0$, $0 \leq C_B \leq C_s$, y $C^0, a^0 \in L^\infty(\Omega)$, $C^0, a^0 \geq 0$. Diremos que el par (C, a) con $C \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$, $C_t \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$ y $a \in H^1(0, T; L^2(\Omega))$, $a \geq 0$, es soluci3n débil del problema (1.4), si cumple:

$$\begin{cases} \langle C_t, v \rangle + \mathcal{B}[C, v] = \beta_1 \int_{\Omega} a(C_s - C)v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v, \\ \int_{\Omega} a_t w = \beta_2 \int_{\Omega} (C - C_s) \sqrt{N} \sqrt{a} w, \\ C(0) = C^0, \\ a(0) = a^0, \end{cases} \quad (1.5)$$

para toda $v \in H^1(\Omega)$, $w \in L^2(\Omega)$ y c.t. $t \in [0, T]$; donde $\langle C_t, v \rangle$ denota la aplicaci3n del funcional $C_t \in H^{-1}(\Omega)$ a $v \in H^1(\Omega)$ en un t fijo y

$$\mathcal{B}[C, v] := D \int_{\Omega} \nabla C \nabla v + k_B \int_{\Gamma_B} C v.$$

Vale la pena observar que pedimos que la soluci3n satisfaga $a \geq 0$, en principio, porque representa un área por unidad de volumen, pero además porque aparece \sqrt{a} en las ecuaciones. En el próximo capítulo veremos que si $a^0 \geq 0$ en Ω , entonces automáticamente se satisfará $a \geq 0$ en $\Omega \times [0, T]$.

De igual manera, veremos que si $C^0 \geq 0$ en Ω , entonces automáticamente se satisfará $C \geq 0$ en $\Omega \times [0, T]$, y además, si $C^0 \leq C_s$ en Ω , también se satisfará $C \leq C_s$ en $\Omega \times [0, T]$.

Existencia y unicidad de solución débil

En este capítulo demostraremos, en primer lugar, la existencia de soluciones débiles del problema (1.4) bajo hipótesis generales sobre los datos iniciales. Las dificultades esenciales para demostrar dicho resultado de existencia radican en la no-linealidad que aparece en el segundo término de la primera ecuación, donde se multiplican las dos variables del problema, y en la segunda ecuación, donde aparece, además, la raíz cuadrada de la variable a . Para demostrar el resultado de existencia, consideraremos aproximaciones de Galerkin, como se hace en [E, Cap. 7] para la ecuación del calor, salvo que utilizaremos, como espacios aproximantes, espacios de elementos finitos de orden uno y cero para C y a , respectivamente, en lugar de los generados por las autofunciones del Laplaciano. Como no se pueden demostrar principios del máximo para estas soluciones discretas, y a fin de acotar de manera sencilla la variable a , modificamos primero el problema, cambiando C por $\min\{C, \bar{C}_0\}$ y \sqrt{a} por $\sqrt{a_+} = \sqrt{\max\{a, 0\}}$ en la ecuación que involucra a a_t , donde $\bar{C}_0 = \max\{\|C^0\|_{L^\infty(\Omega)}, C_s\}$. Utilizando argumentos de compacidad probaremos que hay subsucesiones que convergen a un par solución (C, a) del problema modificado, y finalmente veremos que las mismas son también soluciones del problema original.

Es interesante notar que nuestra teoría permite considerar situaciones interesantes como la de *sobresaturación*, donde se supone que la concentración de droga disuelta puede ser mayor que la concentración de saturación. Si bien esto es inestable en la práctica, es posible, como la situación en que se tiene agua en estado líquido a temperatura menor que la de fusión. No habrá unicidad de soluciones cuando haya alguna región donde $a = 0$ y $C > C_s$, debido a que en ese caso puede haber bifurcaciones por estar en el punto donde \sqrt{a} no es Lipschitz y el factor que multiplica a \sqrt{a} es positivo.

Si $C^0 \leq C_s$ en Ω , entonces habrá unicidad aunque a^0 se anule en alguna región. Si a^0 fuera nula, entonces la función C sería solución de un problema clásico de difusión lineal.

A lo largo de este capítulo, \mathbb{C} denotará una constante que puede ser diferente en diferentes apariciones, cuya dependencia se escribirá entre paréntesis cuando no quede clara del contexto. Diremos que depende de *los parámetros del problema* cuando dependa de algunos de los parámetros $D, \beta_1, \beta_2, C_s, k_B, C_B, |\Gamma_B|, \|N\|_{L^\infty(\Omega)}$.

2.1. Planteo del problema

Como ya mencionamos, vamos a estudiar la existencia de solución débil del problema (1.4) planteado en el capítulo anterior, que transcribimos aquí:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_t - D\Delta C = \beta_1(C_s - C)a, \text{ en } \Omega \times (0, T), \\ a_t = \beta_2(C - C_s)\sqrt{N}\sqrt{a}, \text{ en } \Omega \times (0, T), \\ C(\cdot, 0) = C^0(\cdot) \text{ en } \Omega, \\ a(\cdot, 0) = a^0(\cdot) \text{ en } \Omega, \\ D\nabla C \cdot n = 0 \text{ en } \Gamma_N \times (0, T), \\ D\nabla C \cdot n = k_B(C_B - C) \text{ en } \Gamma_B \times (0, T). \end{array} \right. \quad (2.1)$$

Como dijimos más arriba demostraremos primero la existencia de solución débil del siguiente problema auxiliar:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_t - D\Delta C = \beta_1(C_s - C)a, \text{ en } \Omega \times (0, T), \\ a_t = \beta_2(\min\{C, \bar{C}_0\} - C_s)\sqrt{N}\sqrt{a_+}, \text{ en } \Omega \times (0, T), \\ C(\cdot, 0) = C^0(\cdot) \text{ en } \Omega, \\ a(\cdot, 0) = a^0(\cdot) \text{ en } \Omega, \\ D\nabla C \cdot n = 0 \text{ en } \Gamma_N \times (0, T), \\ D\nabla C \cdot n = k_B(C_B - C) \text{ en } \Gamma_B \times (0, T), \end{array} \right. \quad (2.2)$$

donde $\bar{C}_0 = \max\{\|C^0\|_{L^\infty}, C_s\}$ y $a_+ = \max\{a, 0\}$. Sólo hemos reemplazado, en la ecuación original, \sqrt{a} por $\sqrt{a_+}$ y $(C - C_s)$ por $(\min\{C, \bar{C}_0\} - C_s)$.

Luego de demostrar la existencia de solución débil de este problema auxiliar, veremos

que $C(x, t) \leq \bar{C}_0$ y $a(x, t) \geq 0$ en c.t. (x, t) . Por lo tanto tendremos que $C_s - C = C_s - \min\{C, \bar{C}_0\}$ y $a_+ = a$, y habremos demostrado la existencia de solución débil de (2.1) con condición inicial $C^0(x)$. Esto se discute en la Sección 2.3.4.

Definición 2.1. Definimos la forma bilineal $\mathcal{B} : H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ como

$$\mathcal{B}[C, v] := D \int_{\Omega} \nabla C \nabla v + k_B \int_{\Gamma_B} C v, \quad \forall C, v \in H^1(\Omega).$$

Lema 2.2. La forma bilineal \mathcal{B} es acotada y coerciva en $H^1(\Omega)$, es decir, existen constantes positivas \mathbb{C}_1 y \mathbb{C}_2 , independientes de C y v , tales que:

$$|\mathcal{B}[C, v]| \leq \mathbb{C}_2 \|C\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)}, \quad \forall C, v \in H^1(\Omega), \quad (2.3)$$

y

$$\mathbb{C}_1 \|C\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \mathcal{B}[C, C], \quad \forall C \in H^1(\Omega). \quad (2.4)$$

Luego,

$$\mathbb{C}_1 \|C\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \mathcal{B}[C, C] \leq \mathbb{C}_2 \|C\|_{H^1(\Omega)}^2, \quad \forall C \in H^1(\Omega). \quad (2.5)$$

Demostración. Veamos la validez de (2.3). Aplicando Hölder tenemos que:

$$|\mathcal{B}[C, v]| \leq D \|\nabla C\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)} + k_B \|C\|_{L^2(\Gamma_B)} \|v\|_{L^2(\Gamma_B)},$$

y por el Teorema de Trazas 6.1, tenemos que:

$$|\mathcal{B}[C, v]| \leq D \|\nabla C\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)} + k_B \mathbb{C}_{traza}^2 \|C\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)}.$$

Luego,

$$|\mathcal{B}[C, v]| \leq (D + k_B \mathbb{C}_{traza}^2) \|C\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)}.$$

Veamos la validez de (2.4). Recordando la desigualdad de Friedrich (6.4), tenemos que:

$$\frac{\min\{\frac{D}{2}, k_B\}}{\mathbb{C}_F^2} \|C\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \min\left\{\frac{D}{2}, k_B\right\} \left(\|\nabla C\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|C\|_{L^2(\Gamma_B)}^2 \right),$$

y entonces,

$$\min \left\{ \frac{\min\{\frac{D}{2}, k_B\}}{\mathbb{C}_F^2}, \frac{D}{2}, k_B \right\} \|C\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \mathcal{B}[C, C].$$

Luego (2.5) es inmediata. \square

Utilizando la forma bilineal $\mathcal{B}[\cdot, \cdot]$ definimos solución débil del problema auxiliar (2.2).

Definición 2.3. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio acotado con frontera Lipschitz, y sean β_1, β_2, k_B y C_B constantes positivas, $N \in L^\infty(\Omega)$, $N \geq 0$, $C^0 \in L^\infty(\Omega)$, $C_B \leq C^0(x) \leq \bar{C}_0$, y $a^0 \in L^\infty(\Omega)$, $a^0(x) \geq 0$ c.t. $x \in \Omega$. Diremos que el par (C, a) con $C \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$, $C_t \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$ y $a \in H^1(0, T; L^2(\Omega))$ es solución débil del problema (2.2), si cumple:

$$\begin{cases} \langle C_t, v \rangle + \mathcal{B}[C, v] = \beta_1 \int_{\Omega} a(C_s - C)v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v, \\ \int_{\Omega} a_t w = \beta_2 \int_{\Omega} (\min\{C, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} \sqrt{a_+} w, \\ C(0) = C^0, \\ a(0) = a^0, \end{cases} \quad (2.6)$$

para toda $v \in H^1(\Omega)$, $w \in L^2(\Omega)$ y c.t. $t \in [0, T]$; donde $\langle C_t, v \rangle$ denota la aplicación del funcional $C_t \in H^{-1}(\Omega)$ a $v \in H^1(\Omega)$ en un t fijo y $\bar{C}_0 = \max\{\|C^0\|_{L^\infty(\Omega)}, C_s\}$.

2.2. Aproximaciones de Galerkin

2.2.1. Existencia local de aproximaciones de Galerkin

Para demostrar la existencia de una solución débil aplicamos el método de Galerkin. Queremos construir soluciones del problema (2.6) en espacios finito dimensionales para luego pasar al límite y tener la existencia de una solución débil de (2.2).

Para ello, consideramos una sucesión $\{\mathcal{T}_n\}$ de particiones conformes y regulares del dominio Ω , que puede tener elementos curvos en el borde de Ω , de manera que $\bigcup_{T \in \mathcal{T}_n} T = \bar{\Omega}$, y tales que $h_n := \max_{T \in \mathcal{T}_n} h_T \rightarrow 0$ cuando $n \rightarrow \infty$, donde h_T es el diámetro de T .

Definimos los siguientes espacios de dimensión finita:

$$V_n = \{v \in H^1(\Omega) : v|_T \in \mathcal{P}_1, \forall T \in \mathcal{T}_n\}, \quad (2.7)$$

$$W_n = \{w \in L^2(\Omega) : w|_T \in \mathcal{P}_0, \forall T \in \mathcal{T}_n\}, \quad (2.8)$$

donde \mathcal{P}_ℓ denota el espacio de polinomios de grado total menor o igual a ℓ . Suponemos además que las triangulaciones están *anidadas*, de modo que valen las siguientes propiedades:

$$(I) \quad \forall n \in \mathbb{N}, V_n \subset V_{n+1} \text{ y } \overline{\cup_{n=1}^\infty V_n}^{H^1} = H^1(\Omega).$$

$$(II) \quad \forall n \in \mathbb{N}, W_n \subset W_{n+1} \text{ y } \overline{\cup_{n=1}^\infty W_n}^{L^2} = L^2(\Omega).$$

Para $n \in \mathbb{N}$ fijo definimos las aproximaciones de Galerkin como sigue: $C_n : [0, T] \rightarrow V_n$, $a_n : [0, T] \rightarrow W_n$ soluciones del siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\begin{cases} (C_{n,t}, v) + \mathcal{B}[C_n, v] = \beta_1 \int_\Omega a_n(C_s - C_n)v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v, \\ \int_\Omega a_{n,t} w = \beta_2 \int_\Omega (\min\{C_n, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} \Phi_n(a_n) w, \\ C_n(0) = C_n^0, \\ a_n(0) = a_n^0 + \frac{2}{n^2}, \end{cases} \quad (2.9)$$

para toda $v \in V_n$, $w \in W_n$ y c.t. $t \in [0, T]$; donde (\cdot, \cdot) denota el producto $L^2(\Omega)$, C_n^0 y a_n^0 denotan las proyecciones $L^2(\Omega)$ de C^0 y a^0 en V_n y W_n , respectivamente. Además, para evitar la no-lipschitzidad de la función raíz cuadrada, la hemos reemplazado por la función Φ_n , definida por

$$\Phi_n(\alpha) = \begin{cases} \sqrt{\alpha} - \frac{1}{n}, & \text{si } \alpha > \frac{1}{n^2}, \\ 0, & \text{si } \alpha \leq \frac{1}{n^2}. \end{cases}$$

El término $\frac{2}{n^2}$ que está sumado a la condición inicial sirve para asegurarse de que la solución hallada utiliza la primera parte de la definición de Φ_n y tendremos una fórmula analítica para la solución a_n sobre cada elemento de la triangulación. Esto permitirá demostrar la existencia de dos soluciones cuando $a^0 \equiv 0$ (ver Sección 2.4.2).

Para analizar la existencia de soluciones de este problema discretizado, sea, para n fijo, $\{v_k\}_{k=1}^{N_V^n}$ la base canónica de V_n y $\{w_i\}_{i=1}^{N_W^n}$ la base canónica de W_n , con $N_V^n =$ cantidad de *vértices* de la partición \mathcal{T}_n y con $N_W^n =$ cantidad de *elementos* de la partición \mathcal{T}_n . Más precisamente, $v_k \in V_n$ y $v_k(x_j) = \delta_{kj}$ con $\{x_j\}_{j=1}^{N_V^n}$ los vértices de \mathcal{T}_n y $w_i = \chi_{T_i^n}$ con $\{T_i^n\}_{i=1}^{N_W^n}$ los elementos de \mathcal{T}_n .

Luego nuestras soluciones discretas serán de la forma:

$$C_n(x, t) = \sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n(t) v_k(x) \quad \text{y} \quad a_n(x, t) = \sum_{i=1}^{N_W^n} \alpha_i^n(t) w_i(x). \quad (2.10)$$

El sistema se escribe, de manera equivalente, como sigue:

$$\begin{cases} \int_{\Omega} C_{n,t} v + \mathcal{B}[C_n, v] + \beta_1 \int_{\Omega} a_n C_n v = \beta_1 C_s \int_{\Omega} a_n v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v, \quad \forall v \in V_n, \\ C_n(0) = C_n^0, \\ \alpha_i^{n'} = \Phi_n(\alpha_i^n(t)) \beta_2 \int_{T_i^n} (\min \{C_n, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} \, dx, \quad \forall T_i^n \in \mathcal{T}_n, \\ \alpha_i^n(0) = \alpha_i^{0,n} + \frac{2}{n^2}, \end{cases} \quad (2.11)$$

donde

$$(C_n^0 - C^0, v_j) = 0, \quad 1 \leq j \leq N_V^n \quad \text{y} \quad \alpha_i^{0,n} = \frac{1}{|T_i^n|} (a^0, \chi_{T_i^n}), \quad 1 \leq i \leq N_W^n. \quad (2.12)$$

En primer lugar demostramos la existencia local de solución de (2.11)-(2.12) que a su vez implica existencia local de solución de (2.9).

Proposición 2.4 (Existencia de soluciones discretas locales). *Dado $n \in \mathbb{N}$, existe $T_n \in \mathbb{R}^+$, $C_n \in L^2(0, T_n; V_n)$, con $C_{n,t} \in L^2(0, T_n; V_n)$ y $a_n \in L^2(0, T_n; W_n)$, con $a_{n,t} \in L^2(0, T_n; W_n)$ que son solución del problema anterior, (2.11) con condiciones iniciales dadas en (2.12).*

Demostración. Para ver la existencia de soluciones analicemos la primera ecuación de (2.11) tomando $v = v_j$ con j tal que $1 \leq j \leq N_V^n$. Usando (2.10) :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left(\sum_{k=1}^{N_V^n} (c_k^n)'(t) v_k \right) v_j \, dx + D \int_{\Omega} \nabla \left(\sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n(t) v_k \right) \nabla v_j \, dx \\ & \quad + \beta_1 \int_{\Omega} a_n \left(\sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n(t) v_k \right) v_j \, dx + k_B \int_{\Gamma_B} \left(\sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n(t) v_k \right) v_j \, ds \\ & = \beta_1 C_s \int_{\Omega} a_n v_j \, dx + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v_j \, ds. \end{aligned}$$

Reacomodando tenemos:

$$\begin{aligned}
& \sum_{k=1}^{N_V^n} (c_k^n)'(t) \int_{\Omega} v_k v_j \, dx + D \sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n(t) \int_{\Omega} \nabla v_k \nabla v_j \, dx \\
& + \beta_1 \sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n(t) \int_{\Omega} a_n v_k v_j \, dx + k_B \sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n(t) \int_{\Gamma_B} v_k v_j \, ds \\
& = \beta_1 C_s \int_{\Omega} a_n v_j \, dx + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v_j \, ds.
\end{aligned}$$

Reemplazando a_n por su expresión de (2.10):

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{N_V^n} (c_k^n)'(t) \int_{\Omega} v_k v_j \, dx & = -D \sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n(t) \int_{\Omega} \nabla v_k \nabla v_j \, dx \\
& - \beta_1 \sum_{i=1}^{N_W^n} \sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n(t) \alpha_i^n(t) \int_{\Omega} w_i v_k v_j \, dx \\
& - k_B \sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n(t) \int_{\Gamma_B} v_k v_j \, ds \\
& + \beta_1 C_s \sum_{i=1}^{N_W^n} \alpha_i^n(t) \int_{\Omega} w_i v_j \, dx + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v_j \, ds.
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Llamemos $f_j(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n)$ al lado derecho de la ecuación anterior, donde $\mathbf{C}_n := (c_k^n)_{1 \leq k \leq N_V^n}$ y $\mathbf{a}_n := (\alpha_i^n)_{1 \leq i \leq N_W^n}$. Es decir, $f_j : \mathbb{R}^{N_V^n} \times \mathbb{R}^{N_W^n} \rightarrow \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned}
f_j(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n) & := -D \sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n \int_{\Omega} \nabla v_k \nabla v_j \, dx - \beta_1 \sum_{i=1}^{N_W^n} \sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n \alpha_i^n \int_{T_i^n} v_k v_j \, dx \\
& - k_B \sum_{k=1}^{N_V^n} c_k^n \int_{\Gamma_B} v_k v_j \, ds + \beta_1 C_s \sum_{i=1}^{N_W^n} \alpha_i^n \int_{T_i^n} v_j \, dx + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v_j \, ds,
\end{aligned}$$

y claramente f_j resulta continua.

Desplegando todas las ecuaciones del tipo (2.13):

$$\begin{aligned}
c_1'(t) \int_{\Omega} v_1 v_1 \, dx + c_2'(t) \int_{\Omega} v_2 v_1 \, dx + \cdots + c_{N_V^n}'(t) \int_{\Omega} v_{N_V^n} v_1 \, dx & = f_1(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n), \\
c_1'(t) \int_{\Omega} v_1 v_2 \, dx + c_2'(t) \int_{\Omega} v_2 v_2 \, dx + \cdots + c_{N_V^n}'(t) \int_{\Omega} v_{N_V^n} v_2 \, dx & = f_2(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n), \\
& \vdots
\end{aligned}$$

$$c'_1(t) \int_{\Omega} v_1 v_{N_V^n} dx + c'_2(t) \int_{\Omega} v_2 v_{N_V^n} dx + \cdots + c'_{N_V^n}(t) \int_{\Omega} v_{N_V^n} v_{N_V^n} dx = f_{N_V^n}(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n).$$

Definimos $M_{ij} := \int_{\Omega} v_j v_i dx$, y M resulta invertible por ser simétrica definida positiva, pues los v_j conforman una base. Luego

$$\begin{pmatrix} c'_1(t) \\ \vdots \\ c'_{N_V^n}(t) \end{pmatrix} = M^{-1} \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n) \\ \vdots \\ f_{N_V^n}(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n) \end{pmatrix}.$$

Reescribiendo las condiciones iniciales para C_n dadas en (2.12) en términos de M , se sigue:

$$\begin{pmatrix} c_1(0) \\ \vdots \\ c_{N_V^n}(0) \end{pmatrix} = M^{-1} \begin{pmatrix} (C^0, v_1) \\ \vdots \\ (C^0, v_{N_V^n}) \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Por otro lado, para $1 \leq i \leq N_W^n$ también tenemos la ecuación que involucra la derivada temporal de $\alpha_i^{n'}$,

$$\alpha_i^{n'} = \beta_2 \Phi_n(\alpha_i^n(t)) \int_{T_i^n} (\min \{C_n, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} dx, \quad (2.15)$$

con condición inicial dada en (2.12) por

$$\alpha_i^n(0) = \frac{1}{|T_i^n|} (a^0, \chi_{T_i^n}) + \frac{2}{n^2}. \quad (2.16)$$

Definamos $g_i(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n) := \beta_2 \Phi_n(\alpha_i^n(t)) \int_{T_i^n} (\min \{C_n, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} dx$, y observemos que $g_i : \mathbb{R}^{N_V^n} \times \mathbb{R}^{N_W^n} \rightarrow \mathbb{R}$ es continua en $(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n)$ para todo $1 \leq i \leq N_W^n$.

Acoplando lo que ya teníamos para \mathbf{C}_n , nos queda el siguiente sistema de $N_V^n + N_W^n$ ecuaciones diferenciales ordinarias con $N_V^n + N_W^n$ condiciones iniciales dadas por (2.14),

(2.16),

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\begin{array}{c} c_1'(t) \\ \vdots \\ c_{N_V^n}'(t) \\ \alpha_1^{n'}(t) \\ \vdots \\ \alpha_{N_W^n}^{n'}(t) \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} M^{-1} \left(\begin{array}{c} f_1(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n) \\ \vdots \\ f_{N_V^n}(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n) \end{array} \right) \\ g_1(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n) \\ \vdots \\ g_{N_W^n}(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n) \end{array} \right) =: \mathbf{f}(\mathbf{C}_n, \mathbf{a}_n), \\ \\ \left(\begin{array}{c} c_1(0) \\ \vdots \\ c_{N_V^n}(0) \\ \alpha_1^n(0) \\ \vdots \\ \alpha_{N_W^n}^n(0) \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} M^{-1} \left(\begin{array}{c} (C^0, v_1) \\ \vdots \\ (C^0, v_{N_V^n}) \end{array} \right) \\ \frac{1}{|T_1^n|}(a^0, w_1) + \frac{1}{n^2} \\ \vdots \\ \frac{1}{|T_{N_W^n}^n|}(a^0, w_{N_W^n}) + \frac{1}{n^2} \end{array} \right). \end{array} \right. \quad (2.17)$$

Como $\mathbf{f} : \mathbb{R}^{N_V^n} \times \mathbb{R}^{N_W^n} \rightarrow \mathbb{R}^{N_V^n} \times \mathbb{R}^{N_W^n}$ es continua, el Teorema de existencia de Cauchy-Peano [CL, pág. 6], nos permite concluir que existen $T_n \in \mathbb{R}^+$, $c_k^n, \alpha_i^n \in C^1[0, T_n)$ con $1 \leq k \leq N_V^n$ y $1 \leq i \leq N_W^n$ que satisfacen el sistema anterior. \square

Observación 2.5. Vale la pena observar que por la continuidad de \mathbf{f} el vector de coeficientes $(c_1, \dots, c_{N_V^n}, \alpha_1^n, \dots, \alpha_{N_W^n}^n)^T$ es una solución clásica $C^1(0, T)$ de (2.17).

Observación 2.6. Observemos que si tuvieramos $C^0 \in H^1(\Omega)$, en la Proposición 2.4 también podríamos definir $C_n(0)$ como la proyección H^1 de C^0 en V_n o como la proyección de Ritz $R_n C(0)$ de $C(0)$, definida por

$$R_n C(0) \in V_n : \mathcal{B}[R_n C(0), v] = \mathcal{B}[C(0), v], \quad \forall v \in V_n.$$

En ambos casos tenemos que el problema así planteado también tiene solución, a la que llamaremos (\bar{a}_n, \bar{C}_n) .

2.2.2. Estabilidad y existencia global de las aproximaciones de Galerkin

En esta sección estudiamos la estabilidad de las soluciones en el espacio discreto, encontrando cotas independientes de n . Estas cotas nos permitirán concluir en primer lugar la existencia global de las soluciones discretas, y en segundo lugar la existencia de una solución de (2.6), utilizando argumentos de compacidad.

Sean $n \in \mathbb{N}$ fijo y (C_n, a_n) un par solución de (2.11) en $[0, T)$, para algún $T > 0$. Recordemos que $a^0 \in L^\infty(\Omega)$, $a^0 \geq 0$ c.t. $x \in \Omega$, $C^0 \in L^\infty(\Omega)$, y C_n^0, a_n^0 , son las proyecciones $L^2(\Omega)$ de $C^0, a^0 + \frac{2}{n^2}$ en V_n, W_n , respectivamente. Por (2.15), tenemos que

$$\alpha_i^{n'}(t) = \beta_2 \Phi_n(\alpha_i^n(t)) \int_{T_i^n} (\text{mín} \{C_n, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} \, dx, \quad t \in [0, T).$$

Como $\text{mín} \{C_n, \bar{C}_0\} \leq \bar{C}_0$ y $C_s \leq \bar{C}_0 := \text{máx} \{\|C^0\|_{L^\infty(\Omega)}, C_s\}$, resulta $\text{mín} \{C_n, \bar{C}_0\} - C_s \leq \bar{C}_0 - C_s$. Aplicando Cauchy-Schwarz a la ecuación anterior, obtenemos, usando que $0 \leq \phi_n(\alpha) \leq \sqrt{\alpha}$,

$$\begin{aligned} \alpha_i^{n'}(t) &\leq \alpha_i^n(t) + \frac{\beta_2^2}{2} (\bar{C}_0 - C_s)^2 \left\| \sqrt{N} \right\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \\ e^{-t} (\alpha_i^{n'}(t) - \alpha_i^n(t)) &\leq e^{-t} \left(\frac{\beta_2^2}{2} (\bar{C}_0 - C_s)^2 \left\| \sqrt{N} \right\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \right) \\ \frac{d}{dt} (e^{-t} \alpha_i^n(t)) &\leq e^{-t} \left(\frac{\beta_2^2}{2} (\bar{C}_0 - C_s)^2 \left\| \sqrt{N} \right\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \right), \end{aligned}$$

Integrando entre 0 y t vemos que

$$\alpha_i^n(t) \leq \left(\alpha_i^{0,n} + \frac{2}{n^2} \right) e^t + \left(\beta_2^2 (\bar{C}_0 - C_s)^2 \left\| \sqrt{N} \right\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \right) (e^t - 1), \quad \forall t \in [0, T).$$

Puesto que $\Phi_n(\alpha) = 0$ para $\alpha \leq 1/n^2$ tenemos que

$$\alpha_i^n(t) \geq \frac{1}{n^2} \geq 0, \quad \forall t \in [0, T).$$

En efecto, si existiera $t > 0$ tal que $\alpha_i^n(t) < 1/n^2$, por el teorema del valor medio debería existir $t_1 > 0$ tal que $\alpha_i^n(t_1) < 1/n^2$ y $\frac{d}{dt} \alpha_i^n(t_1) < 0$, lo que contradice (2.15). Por lo tanto,

como $a_n(x, t) = \alpha_i^n(t)$ si $x \in T_i^n$,

$$\begin{aligned} \|a_n(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)} &\leq \left(\|a^0\|_{L^2(\Omega)} + 2\sqrt{|\Omega|} \right) e^t \\ &\quad + \sqrt{|\Omega|} \left(\beta_2^2 (\bar{C}_0 - C_s)^2 \left\| \sqrt{N} \right\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \right) (e^t - 1), \end{aligned}$$

y

$$\|a_n\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))} \leq \left(\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2 \right) e^T + \left(\beta_2^2 (\bar{C}_0 - C_s)^2 \left\| \sqrt{N} \right\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \right) (e^T - 1).$$

Esto a su vez implica que

$$\begin{aligned} \sup_{0 \leq t \leq T} \|a_n(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)} &\leq \left(\|a^0\|_{L^2(\Omega)} + 2\sqrt{|\Omega|} \right) e^T \\ &\quad + \sqrt{|\Omega|} \left(\beta_2^2 (\bar{C}_0 - C_s)^2 \left\| \sqrt{N} \right\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \right) (e^T - 1), \\ \|a_n\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 &\leq \int_0^T 2 \left(\|a^0\|_{L^2(\Omega)} + 2\sqrt{|\Omega|} \right)^2 e^{2t} \\ &\quad + 2|\Omega| \left(\beta_2^2 (\bar{C}_0 - C_s)^2 \left\| \sqrt{N} \right\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \right)^2 (e^t - 1)^2 dt. \end{aligned} \tag{2.18}$$

Hasta aquí hemos probado una cota para a_n , independientemente de lo que ocurre para C_n . Esto se logró gracias a la modificación hecha a la segunda ecuación diferencial del problema, donde cambiamos C por $\min\{C, \bar{C}_0\}$.

Observemos ahora que tomando $v = C_n$ en (2.11),

$$\int_{\Omega} C_{n,t} C_n + \mathcal{B}[C_n, C_n] + \beta_1 \int_{\Omega} a_n C_n^2 = \beta_1 C_s \int_{\Omega} a_n C_n + k_B C_B \int_{\Gamma_B} C_n,$$

es decir,

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|C_n\|_{L^2(\Omega)}^2 + \mathcal{B}[C_n, C_n] + \beta_1 \int_{\Omega} a_n C_n^2 = \beta_1 C_s \int_{\Omega} a_n C_n + k_B C_B \int_{\Gamma_B} C_n,$$

luego aplicando ϵ -desigualdad de Cauchy (6.2) al primer término de la suma de la derecha y la desigualdad de Cauchy (6.1) al segundo término de la misma suma, tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|C_n\|_{L^2(\Omega)}^2 + D \int_{\Omega} |\nabla C_n|^2 + \beta_1 \int_{\Omega} a_n C_n^2 + k_B \int_{\Gamma_B} C_n^2 \\ \leq \beta_1 C_s \int_{\Omega} \frac{a_n^2}{4\epsilon} + \beta_1 C_s \epsilon \int_{\Omega} C_n^2 + k_B \frac{C_B^2}{2} |\Gamma_B| + \frac{k_B}{2} \int_{\Gamma_B} C_n^2. \end{aligned}$$

Ya que $a_n \geq 0$, podemos ignorar el término $\beta_1 \int_{\Omega} a_n C_n^2$ para obtener:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|C_n\|_{L^2(\Omega)}^2 + D \int_{\Omega} |\nabla C_n|^2 + \frac{k_B}{2} \int_{\Gamma_B} C_n^2 \leq \frac{\beta_1 C_s}{4\epsilon} \int_{\Omega} a_n^2 + \epsilon \beta_1 C_s \int_{\Omega} C_n^2 + k_B \frac{C_B^2}{2} |\Gamma_B|,$$

luego,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|C_n\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{D}{2} \int_{\Omega} |\nabla C_n|^2 + \min\left\{\frac{D}{2}, \frac{k_B}{2}\right\} \left(\int_{\Omega} |\nabla C_n|^2 + \int_{\Gamma_B} C_n^2 \right) \\ \leq \frac{\beta_1 C_s}{4\epsilon} \int_{\Omega} a_n^2 + \epsilon \beta_1 C_s \int_{\Omega} C_n^2 + k_B \frac{C_B^2}{2} |\Gamma_B|, \end{aligned}$$

y por la desigualdad de Friedrich (6.4),

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|C_n\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{D}{2} \int_{\Omega} |\nabla C_n|^2 + \frac{\min\left\{\frac{D}{2}, \frac{k_B}{2}\right\}}{\mathbb{C}_F^2} \int_{\Omega} C_n^2 - \epsilon \beta_1 C_s \int_{\Omega} C_n^2 \\ \leq \frac{\beta_1 C_s}{4\epsilon} \int_{\Omega} a_n^2 + k_B \frac{C_B^2}{2} |\Gamma_B|. \end{aligned}$$

Tomando $\epsilon = \frac{1}{2} \frac{\min\left\{\frac{D}{2}, \frac{k_B}{2}\right\}}{\mathbb{C}_F^2 \beta_1 C_s}$, de tal manera que $\mathbb{C}_3 := \frac{\min\left\{\frac{D}{2}, \frac{k_B}{2}\right\}}{\mathbb{C}_F^2} - \epsilon \beta_1 C_s > 0$ obtenemos

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|C_n\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{D}{2} \int_{\Omega} |\nabla C_n|^2 + \mathbb{C}_3 \int_{\Omega} C_n^2 \leq \frac{\mathbb{C}_F^2 \beta_1^2 C_s^2}{2 \min\left\{\frac{D}{2}, \frac{k_B}{2}\right\}} \int_{\Omega} a_n^2 + k_B \frac{C_B^2}{2} |\Gamma_B|.$$

Definiendo $\mathbb{C}_4 := \min\left\{\frac{D}{2}, \mathbb{C}_3\right\}$ y $\mathbb{C}_5 = \frac{\mathbb{C}_F^2 \beta_1^2 C_s^2}{2 \min\left\{\frac{D}{2}, \frac{k_B}{2}\right\}}$, la desigualdad anterior nos queda:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|C_n\|_{L^2(\Omega)}^2 + \mathbb{C}_4 \|C_n\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \mathbb{C}_5 \int_{\Omega} a_n^2 + k_B \frac{C_B^2}{2} |\Gamma_B|,$$

Integrando ambos miembros de la desigualdad anterior respecto de t , obtenemos, para $t \in [0, T)$:

$$\frac{1}{2} \|C_n(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \mathbb{C}_4 \int_0^t \|C_n\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \mathbb{C}_5 \int_0^t \int_{\Omega} a_n^2 + k_B \frac{C_B^2}{2} |\Gamma_B| t + \frac{1}{2} \|C_n(0)\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Recordando (2.18) y que $C_n(0)$ es la proyección L^2 de C^0 en V_n , hemos demostrado la siguiente proposición:

Proposición 2.7. *Si (C_n, a_n) es un par solución de (2.11) en $[0, T)$, entonces valen las siguientes acotaciones con constantes $\mathbb{C}_4, \mathbb{C}_5$ independientes de n :*

$$\begin{aligned} \|C_n\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}^2 + 2\mathbb{C}_4\|C_n\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}^2 \\ \leq 2\mathbb{C}_5\|a_n\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 + k_B C_B^2 |\Gamma_B| T + \|C^0\|_{L^2(\Omega)}^2, \end{aligned} \quad (2.19)$$

$$\begin{aligned} \|a_n\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))} \\ \leq (\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2) e^T + \left(\beta_2^2 (\bar{C}_0 - C_s)^2 \|\sqrt{N}\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \right) (e^T - 1). \end{aligned} \quad (2.20)$$

y

$$\begin{aligned} \|a_n\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 &\leq \left(\|a^0\|_{L^2(\Omega)} + 2\sqrt{|\Omega|} \right)^2 (e^{2T} - 1) \\ &\quad + |\Omega| \left(\beta_2^2 (\bar{C}_0 - C_s)^2 \|\sqrt{N}\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \right)^2 (e^{2T} - 1). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Como consecuencia de la proposición anterior podemos afirmar que C_n y a_n son soluciones globales:

Proposición 2.8. *El par solución (C_n, a_n) de (2.11) existe en $[0, \infty)$, para cada $n \in \mathbb{N}$.*

Demostración. Sea (C_n, a_n) un par solución de (2.11) en $[0, T)$, afirmamos que dichas funciones existen en $[0, T + \epsilon)$. En efecto, observando que \mathbf{f} , definida en (2.17), es continua y por lo tanto acotada en conjuntos acotados, podemos aplicar el Teorema 4.1 de [CL, pág. 15] y afirmar que existe el $\lim_{t \rightarrow T^-} (\mathbf{C}_n(t), \mathbf{a}_n(t))$. Utilizando la equivalencia de normas vectoriales en un espacio de dimensión finita y la Proposición 2.7 podemos afirmar que:

$$\sup_{0 \leq t < T} |\mathbf{C}_n(t)|_\infty + \sup_{0 \leq t < T} |\mathbf{a}_n(t)|_\infty < \infty, \quad (2.22)$$

y concluir que dicho límite es finito. Nuevamente por el Teorema 4.1 de [CL, pág. 15], podemos afirmar que \mathbf{C}_n y \mathbf{a}_n pueden continuarse a $[0, T + \epsilon)$ para algún $\epsilon > 0$.

Veamos que las soluciones existen en $[0, \infty)$. Para ello, definimos

$$t^* := \sup\{t : \text{la solución existe en } [0, t)\}. \quad (2.23)$$

Si $t^* < \infty$, entonces la solución existe en $[0, t^*)$. Luego por el razonamiento anterior la solución puede continuarse a $[0, t^* + \epsilon)$. Esto contradice (2.23) y por lo tanto $t^* = \infty$. \square

Observación 2.9. Para \bar{C}_n definida como en la Observación 2.6, se obtiene la siguiente acotación análoga a (2.19):

$$\|\bar{C}_n\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}^2 + 2\mathcal{C}_4\|\bar{C}_n\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}^2 \leq 2\mathcal{C}_5\|\bar{a}_n\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 T + k_B C_B^2 |\Gamma_B| T + \|C^0\|_{H^1(\Omega)}^2,$$

y siguen valiendo (2.20) y (2.21) para \bar{a}_n .

Además, como nuestra prueba de la existencia global de la solución (C_n, a_n) depende de las estimaciones de energía (2.19) y valen las análogas para (\bar{C}_n, \bar{a}_n) , entonces tenemos que éstas últimas también existen en $[0, \infty)$.

2.3. Existencia de solución débil

A lo largo de esta sección, consideramos $T > 0$ arbitrario y fijo. Por la Proposición 2.8 todos los pares solución (C_n, a_n) existen en $[0, T]$ y están acotados uniformemente. La demostración de existencia de solución del problema de dimensión infinita se basa en demostrar que se puede extraer una subsucesión convergente. La dificultad principal radica en el término no-lineal que acopla las variables, al multiplicar a por C y en la raíz cuadrada que aparece en la ecuación para a_t . En la demostración para la ecuación clásica lineal del calor dada en [E] se utilizan acotaciones como (2.19) para probar la existencia de subsucesiones de $\{C_n\}$ débilmente convergentes. Ahora bien, la convergencia débil de C_n a C y de a_n a a no implica que $C_n a_n$ tienda a Ca y por eso la demostración es un poco más complicada. Usaremos ideas de [T] para la ecuación de Navier-Stokes donde aparece un término que involucra el producto entre u y ∇u donde u es la variable velocidad en el contexto de flujos incompresibles.

Vale la pena aclarar que, por un lado, algunas demostraciones serían más simples si hubiéramos elegido V_n como el espacio generado por las primeras n autofunciones del Laplaciano, como se hace en [E]. Por otro lado, el uso de funciones de elementos finitos, especialmente de las funciones constantes a trozos para la aproximación de a , permitió demostrar las acotaciones (2.20) y (2.21) de manera casi inmediata. Saber que a_n está

acotado en $L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))$ es muy útil para tratar el término no-lineal de la ecuación para $C_{n,t}$.

2.3.1. Existencia de límite de C_n

Por la Proposición 2.7 tenemos que $\{C_n\}$ es una sucesión acotada en $L^2(0, T; H^1(\Omega))$, que es un espacio de Banach reflexivo, y por lo tanto existe una subsucesión, a la que seguiremos llamando $\{C_n\}$, débilmente convergente en dicho espacio, es decir, existe $C \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ tal que

$$C_n \rightharpoonup C \text{ en } L^2(0, T; H^1(\Omega)). \quad (2.24)$$

Más aún, dicha subsucesión puede elegirse de manera que sea fuertemente convergente en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$. Para ello, procederemos de manera similar a como se hace en [T] para las ecuaciones de Navier-Stokes, aplicando el Teorema 6.43 del Apéndice. Denotemos por \tilde{C}_n la función que va de \mathbb{R} al espacio $H^1(\Omega)$ definida por $\tilde{C}_n = C_n$ en $[0, T]$ y $C_n = 0$ en el complemento de ese intervalo.

Lema 2.10. *Si \hat{C}_n denota la transformada de Fourier de \tilde{C}_n (acorde a la Definición 6.42), existe $\gamma > 0$ tal que*

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tau|^{2\gamma} \|\hat{C}_n(\tau)\|_{L^2(\Omega)}^2 d\tau \leq \mathbb{C}. \quad (2.25)$$

Demostración. Observemos que la primera ecuación en (2.11), con $v = v_j$, puede escribirse como:

$$\frac{d}{dt}(\tilde{C}_n(t), v_j) = \langle \tilde{f}_n(t), v_j \rangle + (C_n(0), v_j)\delta_0 - (C_n(T), v_j)\delta_T, \quad (2.26)$$

donde

$$\tilde{f}_n(t) = f_n(t), \quad \forall t \in [0, T] \quad \text{y} \quad \tilde{f}_n(t) = 0 \text{ fuera del } [0, T],$$

con

$$f_n(t)(v) = -\mathcal{B}[C_n, v] - \beta_1(a_n C_n, v) + \beta_1 C_s(a_n, v) + k_B(C_B, v)_{L^2(\Gamma_B)}.$$

Veamos que $\tilde{f}_n \in H^{-1}(\Omega)$ para cada $t \in [0, T]$. En efecto,

$$\begin{aligned} |f_n(t)(v)| &\leq \mathbb{C}_2 \|C_n\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)} + \beta_1 \|a_n\|_{L^\infty(\Omega)} \|C_n\|_{L^2(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + \beta_1 C_s \|a_n\|_{L^2(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)} + k_B C_B \|v\|_{L^2(\Gamma_B)} \\ &\leq \mathbb{C} (\|C_n(t)\|_{H^1(\Omega)} + k_B C_B + \beta_1 C_s) \|v\|_{H^1(\Omega)}, \end{aligned}$$

y luego

$$\|f_n(t)\|_{H^{-1}(\Omega)} = \sup_{\substack{v \in H^1(\Omega) \\ v \neq 0}} \frac{|f_n(t)(v)|}{\|v\|_{H^1(\Omega)}} \leq \mathbb{C} (\|C_n(t)\|_{H^1(\Omega)} + k_B C_B + \beta_1 C_s).$$

Por lo tanto,

$$\|f_n\|_{L^1(0,T;H^{-1}(\Omega))} \leq \mathbb{C} (T^{1/2} \|C_n\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} + T(k_B C_B + \beta_1 C_s))$$

y

$$\|\hat{f}_n\|_{L^\infty(-\infty,\infty;H^{-1}(\Omega))} \leq \|\tilde{f}_n\|_{L^1(-\infty,\infty;H^{-1}(\Omega))} = \|f_n\|_{L^1(0,T;H^{-1}(\Omega))}. \quad (2.27)$$

La desigualdad anterior nos permite aplicar transformada de Fourier a ambos miembros de la ecuación (2.26) y obtener:

$$2i\pi\tau(\hat{C}_n, v_j) = (\hat{f}_n, v_j) + (C_n(0), v_j) - (C_n(T), v_j) \exp(-2i\pi T\tau). \quad (2.28)$$

Multiplicamos la ecuación anterior por $\hat{c}_j(\tau)$ (= transformada de Fourier de \tilde{c}_j) y sumamos el resultado para $j = 1, \dots, N_V^n$, obteniendo

$$2i\pi\tau \|\hat{C}_n\|_{L^2(\Omega)}^2 = \langle \hat{f}_n, \hat{C}_n \rangle + (C_n(0), \hat{C}_n) - (C_n(T), \hat{C}_n) \exp(-2i\pi T\tau), \quad \tau \in \mathbb{R}.$$

Luego, para cada $\tau \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned} 2\pi\tau \|\hat{C}_n\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq \|\hat{f}_n\|_{H^{-1}(\Omega)} \|\hat{C}_n\|_{H^1(\Omega)} + \|C_n(0)\|_{L^2(\Omega)} \|\hat{C}_n\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + \|C_n(T)\|_{L^2(\Omega)} \|\hat{C}_n\|_{L^2(\Omega)} |\exp(-2i\pi T\tau)|. \end{aligned}$$

Usando (2.19) y (2.27), obtenemos

$$2\pi\tau\|\hat{C}_n(\tau)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \mathbb{C}_T\|\hat{C}_n(\tau)\|_{H^1(\Omega)} + \mathbb{C}_T\|\hat{C}_n(\tau)\|_{L^2(\Omega)},$$

que a su vez implica

$$|\tau|\|\hat{C}_n(\tau)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \mathbb{C}\|\hat{C}_n(\tau)\|_{H^1(\Omega)}. \quad (2.29)$$

Para γ fijo, $0 < \gamma < 1/4$, observamos que existe \mathbb{C}_γ tal que

$$|\tau|^{2\gamma} \leq \mathbb{C}_\gamma \frac{1 + |\tau|}{1 + |\tau|^{1-2\gamma}}, \quad \forall \tau \in \mathbb{R}.$$

Así

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\tau|^{2\gamma} \|\hat{C}_n(\tau)\|^2 d\tau &\leq \mathbb{C}_\gamma \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 + |\tau|}{1 + |\tau|^{1-2\gamma}} \|\hat{C}_n(\tau)\|^2 d\tau \\ &\leq \mathbb{C}_\gamma \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\|\hat{C}_n(\tau)\|^2}{1 + |\tau|^{1-2\gamma}} d\tau + \mathbb{C}_\gamma \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\tau| \|\hat{C}_n(\tau)\|^2}{1 + |\tau|^{1-2\gamma}} d\tau, \end{aligned}$$

luego por (2.29) tenemos que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tau|^{2\gamma} \|\hat{C}_n(\tau)\|_{L^2(\Omega)}^2 d\tau \leq \mathbb{C}_\gamma \int_{-\infty}^{+\infty} \|\hat{C}_n(\tau)\|_{L^2(\Omega)}^2 d\tau + \mathbb{C}_\gamma \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\|\hat{C}_n(\tau)\|_{H^1(\Omega)}}{1 + |\tau|^{1-2\gamma}} d\tau.$$

Recordemos que necesitamos lograr una acotación de estas integrales independiente de n . La primera de las integrales está acotada por la igualdad de Parseval y (2.19), nos falta ver la acotación de la segunda. Observamos que aplicando Cauchy-Schwarz (6.1) y por la igualdad de Parseval, obtenemos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\|\hat{C}_n(\tau)\|_{H^1(\Omega)}}{1 + |\tau|^{1-2\gamma}} d\tau \leq \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(1 + |\tau|^{1-2\gamma})^2} d\tau \right)^{1/2} \left(\int_0^T \|C_n(t)\|_{H^1(\Omega)}^2 dt \right)^{1/2},$$

donde la primera de las integrales es finita pues $\gamma < 1/4$ y la segunda es finita y acotada independientemente de n por (2.19). \square

A partir de la cota (2.25), aplicando el Teorema 6.43 con $X_0 = H^1(\Omega)$ y $X = X_1 = L^2(\Omega)$ podemos afirmar que existe una subsucesión de $\{C_n\}$, a la que seguiremos llamando

$\{C_n\}$, con límite fuerte \tilde{C} en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$, es decir,

$$C_n \rightarrow \tilde{C} \text{ en } L^2(0, T; L^2(\Omega)). \quad (2.30)$$

Ya que $L^2(0, T; L^2(\Omega))^* \subset L^2(0, T; H^1(\Omega))^*$, podemos concluir que $\tilde{C} = C$, donde C es el límite débil de (2.24).

2.3.2. Existencia de límite de a_n

Observemos que (2.18), implica que $\{a_n\}$ tiene, a su vez, una subsucesión $\{a_{n_\ell}\}$ débilmente convergente en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$. Más precisamente, existe $a \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$ tal que

$$a_{n_\ell} \rightharpoonup a, \text{ en } L^2(0, T; L^2(\Omega)). \quad (2.31)$$

Observación 2.11. Es importante notar que en general la convergencia débil de una sucesión a_n a a no implica la convergencia de $\sqrt{a_n}$ a \sqrt{a} , ni tampoco vale la recíproca. Basta como ejemplo considerar las funciones $a_n(x) = (10 + \sin nx)^2$, para $x \in [0, 1]$. Claramente, $\sqrt{a_n} \rightharpoonup \tilde{a} \equiv 10$, y

$$a_n = 100 + \sin^2 nx + 20 \sin nx = 100 + \frac{1}{2} - \frac{\cos 2nx}{2} + 20 \sin nx \rightharpoonup 100 + \frac{1}{2} \neq \tilde{a}^2.$$

Utilizando más información sobre la sucesión a_n que hemos construido podemos demostrar un resultado más fuerte, que enunciamos a continuación:

Teorema 2.12. $\{a_n\}$ tiene una subsucesión $\{a_{n_\ell}\}$ que satisface:

$$\sqrt{a_{n_\ell}} \rightarrow \sqrt{a}, \text{ en } L^2(0, T; L^2(\Omega)), \quad (2.32)$$

$$a_{n_\ell} \rightarrow a, \text{ en } L^2(0, T; L^2(\Omega)). \quad (2.33)$$

Para demostrar este teorema procederemos en varios pasos, que se establecen en las proposiciones y lemas que presentamos a continuación. La idea principal consiste en ver que la sucesión $\{a_n\}$ converge puntualmente a a y utilizando el teorema de la convergencia dominada y las acotaciones ya demostradas, tendremos probados los límites enunciados en 2.32 y 2.33.

Recordemos que la ecuación para a_n es

$$a_n(x, t) = \sum_{i=1}^{N_W^n} \alpha_i^n(t) \chi_{T_i^n}(x),$$

para cualquier $(x, t) \in \Omega \times [0, T]$, donde los coeficientes en t cumplen:

$$\begin{cases} \alpha_i^n(t)' = f_i^n(t) \Phi_n(\alpha_i^n(t)), \\ \alpha_i^n(0) = \alpha_i^{0,n} + \frac{2}{n^2}, \end{cases}$$

con

$$\Phi_n(\alpha) = \begin{cases} \sqrt{\alpha} - \frac{1}{n}, & \text{si } \alpha > \frac{1}{n^2}, \\ 0, & \text{si } \alpha \leq \frac{1}{n^2}, \end{cases}$$

y $f_i^n(t) := \beta_2 \int_{T_i^n} (\text{mín} \{C_n, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} \, dy$, para $1 \leq i \leq N_W^n$.

Primero vemos que la raíz cuadrada del dato inicial *discreto* converge a la raíz cuadrada de a^0 .

Proposición 2.13. $\sqrt{a_n^0} \rightarrow \sqrt{a^0}$ en $L^2(\Omega)$ cuando $n \rightarrow \infty$.

Demostración. Para ver dicha convergencia observemos que:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(\sqrt{a_n^0} - \sqrt{a^0} \right)^2 dx &= \sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} \left(\sqrt{a_n^0} - \sqrt{a^0} \right)^2 dx \\ &= \sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} \left(\sqrt{\alpha_i^{0,n} + \frac{2}{n^2}} - \sqrt{a^0} \right)^2 dx \\ &= \sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} \left(\alpha_i^{0,n} + \frac{2}{n^2} - 2\sqrt{\alpha_i^{0,n} + \frac{2}{n^2}} \sqrt{a^0} + a^0 \right) dx \\ &\leq \sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} \left(\alpha_i^{0,n} - 2\sqrt{\alpha_i^{0,n}} \sqrt{a^0} + a^0 + \frac{2}{n^2} \right) dx \\ &\leq \sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} \left(\sqrt{\alpha_i^{0,n}} - \sqrt{a^0} \right)^2 dx + \frac{2|\Omega|}{n^2}. \end{aligned}$$

Si definimos $\tilde{a}_n^0 := \sum_{i=1}^{N_W^n} \alpha_i^{0,n} \chi_{T_i^n}(x)$, que por (2.12) es la proyección $L^2(\Omega)$ de a^0 en W_n , la desigualdad anterior puede ser expresada como

$$\int_{\Omega} \left(\sqrt{a_n^0} - \sqrt{a^0} \right)^2 dx \leq \int_{\Omega} \left(\sqrt{\tilde{a}_n^0} - \sqrt{a^0} \right)^2 dx + \frac{2|\Omega|}{n^2},$$

y probaremos que $\sqrt{\tilde{a}_n^0} \rightarrow \sqrt{a^0}$ en $L^2(\Omega)$. En efecto,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(\sqrt{\tilde{a}_n^0} - \sqrt{a^0} \right)^2 dx &= \sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} \left(\sqrt{\tilde{a}_n^0} - \sqrt{a^0} \right)^2 dx \\ &= \sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} (\tilde{a}_n^0 - a^0) dx + 2 \sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} \sqrt{a^0} \left(\sqrt{a^0} - \sqrt{\tilde{a}_n^0} \right) dx, \end{aligned}$$

por la definición (2.12) de $\alpha_i^{0,n}$, $\sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} (\tilde{a}_n^0 - a^0) dx = 0$ y se tiene que:

$$\int_{\Omega} \left(\sqrt{\tilde{a}_n^0} - \sqrt{a^0} \right)^2 dx = 2 \sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} \sqrt{a^0} \left(\sqrt{a^0} - \sqrt{\tilde{a}_n^0} \right) dx.$$

Para continuar con la acotación, observemos que

$$\int_{T_i^n} \sqrt{a^0} \leq |T_i^n|^{1/2} \left(\int_{T_i^n} a^0 \right)^{1/2},$$

y luego

$$\sqrt{\tilde{a}_n^0}|_{T_i^n} = \frac{1}{|T_i^n|^{1/2}} \left(\int_{T_i^n} a^0 \right)^{1/2} \geq \frac{1}{|T_i^n|} \int_{T_i^n} \sqrt{a^0}.$$

Por lo tanto,

$$\int_{T_i^n} \sqrt{a^0} \left(\sqrt{a^0} - \sqrt{\tilde{a}_n^0} \right) dx \leq \int_{T_i^n} \sqrt{a^0} \left(\sqrt{a^0} - \frac{1}{|T_i^n|} \int_{T_i^n} \sqrt{a^0} \right) dx.$$

Usando las desigualdades de Hölder y Cauchy-Schwartz,

$$\int_{\Omega} \left(\sqrt{\tilde{a}_n^0} - \sqrt{a^0} \right)^2 dx \leq 2 \left(\int_{\Omega} a^0 \right)^{1/2} \left(\sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} \left(\sqrt{a^0} - \frac{1}{|T_i^n|} \int_{T_i^n} \sqrt{a^0} \right)^2 dx \right)^{1/2}$$

$$= 2 \left(\int_{\Omega} a^0 \right)^{1/2} \left(\int_{\Omega} \left(\sqrt{a^0} - \sum_{i=1}^{N_W^n} \frac{1}{|T_i^n|} \int_{T_i^n} \sqrt{a^0} dy \chi_{T_i^n}(x) \right)^2 dx \right)^{1/2}.$$

De aquí se sigue la convergencia en $L^2(\Omega)$ por ser $\sum_{i=1}^{N_W^n} \frac{1}{|T_i^n|} \int_{T_i^n} \sqrt{a^0} dy \chi_{T_i^n}(x)$ la proyección $L^2(\Omega)$ de $\sqrt{a^0}$ en W_n . \square

En la siguiente proposición damos una fórmula implícita para $\alpha_i^n(t)$, que nos servirá para hallar una fórmula explícita del límite $\sqrt{a(x, t)}$.

Proposición 2.14. *Sean $n \in \mathbb{N}$ y $1 \leq i \leq N_W^n$. Entonces para todo $t \geq 0$, $\alpha_i^n(t)$ es solución de la siguiente ecuación (algebraica)*

$$\sqrt{\alpha_i^n(t)} = \sqrt{\alpha_i^n(0)} - \frac{1}{n} \ln \left(\frac{\sqrt{\alpha_i^n(t)} - \frac{1}{n}}{\sqrt{\alpha_i^n(0)} - \frac{1}{n}} \right) + \frac{1}{2} \int_0^t f_i^n(\tau) d\tau. \quad (2.34)$$

Demostración. Resolvamos la ecuación diferencial $\frac{d}{dt} \alpha_i^n = f_i^n(t) \Phi_n(\alpha_i^n(t))$. Como Φ_n es Lipschitz continua el problema tiene solución única, que resulta $C^1(\mathbb{R})$, y como $\alpha_i^n(0) \geq \frac{2}{n^2} > \frac{1}{n^2}$, dicha solución satisface $\alpha_i^n(t) > \frac{1}{n^2}$ para todo $t > 0$. En efecto, si existiera $t^* > 0$ tal que $\alpha_i^n(t^*) = 1/n^2$, debería ser $\alpha_i^n \equiv 1/n^2$ por la unicidad de soluciones.

Luego, $\Phi_n(\alpha_i^n(t)) = \sqrt{\alpha_i^n(t)} - \frac{1}{n}$ y por lo tanto

$$\frac{d}{dt} \alpha_i^n = f_i^n(t) \left(\sqrt{\alpha_i^n(t)} - \frac{1}{n} \right), \quad y \quad \int \frac{\alpha_i^{n'}(\tau)}{\sqrt{\alpha_i^n(\tau)} - \frac{1}{n}} d\tau = \int f_i^n(\tau) d\tau.$$

Haciendo la sustitución $u = \sqrt{\alpha_i^n(\tau)} - \frac{1}{n}$, $du = \frac{1}{2\sqrt{\alpha_i^n(\tau)}} \alpha_i^{n'}(\tau) d\tau$, se obtiene

$$\int \frac{\alpha_i^{n'}(\tau)}{\sqrt{\alpha_i^n(\tau)} - \frac{1}{n}} d\tau = 2 \int \frac{u + \frac{1}{n}}{u} du = 2 \left(u + \frac{1}{n} \ln(u) + \mathbb{C} \right),$$

que inmediatamente implica la afirmación. \square

Definimos ahora $\Sigma = \bigcup_{n \in \mathbb{N}} \bigcup_{T \in \mathcal{T}_n} \partial T$, el conjunto de todos los lados de todos los elementos de las triangulaciones consideradas, que por ser unión numerable de conjuntos de medida cero, tiene medida cero. Por lo tanto, dado $n \in \mathbb{N}$ y $x \in \Omega \setminus \Sigma$, existe un único $i = i(x, n)$, $1 \leq i \leq N_W^n$, tal que $x \in T_i^n$. En lo que sigue omitiremos el subíndice i , pero estaremos considerando, dado $x \in \Omega \setminus \Sigma$ fijo, los elementos T_i^n tales que $x \in T_i^n$. Es decir,

$\alpha^n(0)$ denota $\alpha_{i(n,x)}^n(0)$ donde $i(n, x)$ es el índice i tal que $x \in T_i^n$. Observemos que por la Proposición 2.13, $\left\{ \sqrt{a_n^0} \right\}_{n \in \mathbb{N}}$ tiene una subsucesión que converge en casi todo punto a $\sqrt{a^0}$, y por lo tanto $\left\{ \sqrt{\alpha^n(0)} \right\}_{n \in \mathbb{N}}$ es una sucesión convergente.

Si, dado t fijo, llamamos $x_n := \sqrt{\alpha^n(t)}$ y $\ell_n := \sqrt{\alpha^n(0)} + \frac{1}{2} \int_0^t f^n(\tau) d\tau$, entonces, por (2.34) resulta que x_n es solución de la siguiente ecuación algebraica:

$$x_n + \frac{1}{n} \ln \left(\frac{x_n - \frac{1}{n}}{\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n}} \right) = \ell_n.$$

El siguiente lema asegura la existencia y unicidad de solución de esta ecuación para cada n y además afirma la convergencia de dichas soluciones cuando $\ell_n \rightarrow \ell$ y $\alpha^n(0) \rightarrow \alpha^0$.

Lema 2.15. Sean $\{\ell_n\}, \{\alpha^n(0)\} \subset \mathbb{R}$ dos sucesiones tales que $\ell_n \rightarrow \ell$ y $\sqrt{\alpha^n(0)} \rightarrow \sqrt{\alpha^0}$, con $\sqrt{\alpha^n(0)} > \frac{1}{n}$. Entonces, para cada n , existe un único $x_n \in (\frac{1}{n}, \infty)$ que satisface

$$x_n + \frac{1}{n} \ln \left(\frac{x_n - \frac{1}{n}}{\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n}} \right) = \ell_n, \quad (2.35)$$

y además

$$x_n \longrightarrow \ell_+ = \begin{cases} \ell, & \text{si } \ell \geq 0, \\ 0, & \text{si } \ell < 0. \end{cases}$$

cuando $n \rightarrow \infty$.

Demostración. Para demostrar la existencia de $x_n > \frac{1}{n}$ que cumple la ecuación (2.35) sólo basta observar que la función $g_n : (\frac{1}{n}, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $g_n(x) = x + \frac{1}{n} \ln \left(\frac{x - \frac{1}{n}}{\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n}} \right)$ tiene rango en los reales. Para ver que dicha solución es única observemos que g_n es una función inyectiva pues $g'_n(x) = 1 + \frac{1}{n} \frac{\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n}}{x - \frac{1}{n}} > 0$ para todo $x \in (\frac{1}{n}, \infty)$.

Para demostrar la convergencia de x_n a ℓ_+ consideramos tres casos: $\ell < 0$, $\ell > 0$ y $\ell = 0$.

(i) Si $\ell < 0$, entonces existe N_0 tal que $\ell_n < \frac{\ell}{2}$, para $n \geq N_0$. Luego

$$\frac{1}{n} \ln \left(\frac{x_n - \frac{1}{n}}{\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n}} \right) = \ell_n - x_n < \frac{\ell}{2} - \frac{1}{n} < \frac{\ell}{2}, \quad \text{para } n \geq N_0.$$

Por lo tanto,

$$\ln \left(\frac{x_n - \frac{1}{n}}{\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n}} \right) < n \frac{\ell}{2}, \quad \implies \quad x_n - \frac{1}{n} \leq \left(\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n} \right) e^{n \frac{\ell}{2}},$$

y finalmente $\frac{1}{n} < x_n < \frac{1}{n} + \left(\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n} \right) e^{n \frac{\ell}{2}} \rightarrow 0$ cuando $n \rightarrow \infty$, pues $\ell < 0$.

(II) Si $\ell > 0$, entonces existe N_0 tal que $\frac{1}{n} < \frac{\ell}{2} < \ell_n < \frac{3\ell}{2}$, $\forall n \geq N_0$. Consideramos ahora, para cada $n \geq N_0$ los siguientes casos:

a) Si $\ell_n = \sqrt{\alpha^n(0)}$, entonces $x_n = \sqrt{\alpha^n(0)} = \ell_n$ y $\frac{x_n - \frac{1}{n}}{\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n}} = 1$.

b) Si $\frac{\ell}{2} < \ell_n < \sqrt{\alpha^n(0)}$, por ser g_n una función monótona creciente, existe g_n^{-1} y también es creciente. Luego

$$g_n^{-1} \left(\frac{\ell}{2} \right) < g_n^{-1}(\ell_n) = x_n < g_n^{-1} \left(\sqrt{\alpha^n(0)} \right) = \sqrt{\alpha^n(0)}.$$

Se tiene entonces que $x_n < \sqrt{\alpha^n(0)}$, y debido a (2.35) se tiene que $\ell/2 < \ell_n < x_n$. Luego,

$$\mathbb{C}_2 \leq \frac{\frac{\ell}{2} - \frac{1}{n}}{\mathbb{C}_1 - \frac{1}{n}} \leq \frac{x_n - \frac{1}{n}}{\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n}} \leq 1,$$

donde $\mathbb{C}_1, \mathbb{C}_2$ son independientes de n .

c) Si $\ell_n > \sqrt{\alpha^n(0)}$, entonces $x_n = g_n^{-1}(\ell_n) > g_n^{-1} \left(\sqrt{\alpha^n(0)} \right) = \sqrt{\alpha^n(0)}$ y por (2.35), $\ell_n > x_n$. Luego,

$$1 \leq \frac{x_n - \frac{1}{n}}{\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n}} \leq \frac{\ell_n - \frac{1}{n}}{\sqrt{\alpha_i^{0,n} + \frac{2}{n^2}} - \frac{1}{n}} \leq \frac{\frac{3\ell}{2} - \frac{1}{n}}{\frac{\sqrt{2}-1}{n}} \leq 4\ell n.$$

Resumiendo, hemos demostrado que para todo $n \geq N_0$ resulta

$$\mathbb{C}_2 \leq \frac{x_n - \frac{1}{n}}{\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n}} \leq 4\ell n,$$

lo que a su vez implica que

$$x_n = \ell_n - \frac{1}{n} \ln \left(\frac{x_n - \frac{1}{n}}{\sqrt{\alpha^n(0)} - \frac{1}{n}} \right) \rightarrow \ell, \quad \text{cuando } n \rightarrow \infty.$$

(III) Si $\ell = 0$, probamos que $x_n \rightarrow 0$ por contradicción. Supongamos que x_n no tiende a cero. En ese caso, existe una subsucesión $\{x_{n_k}\}$ que está acotada por debajo por $\mathbb{C}_3 > 0$. Entonces, si \mathbb{C}_1 denota, como antes, una cota superior para $\sqrt{\alpha^n(0)}$, resulta

$$\mathbb{C}_4 \leq \frac{\mathbb{C}_3 - \frac{1}{n_k}}{\mathbb{C}_1 - \frac{1}{n_k}} \leq \frac{x_{n_k} - \frac{1}{n_k}}{\sqrt{\alpha^{n_k}(0)} - \frac{1}{n_k}}.$$

Luego,

$$0 \leq x_{n_k} = \ell_{n_k} - \frac{1}{n_k} \ln \frac{x_{n_k} - \frac{1}{n_k}}{\sqrt{\alpha^{n_k}(0)} - \frac{1}{n_k}} \leq \ell_{n_k} - \frac{1}{n_k} \ln \mathbb{C}_4,$$

que tiende a cero cuando $k \rightarrow \infty$. Esto es una contradicción que provino de suponer que x_n no tiende a cero. □

Veamos que $\ell = \sqrt{a^0(x)} + \frac{\beta_2}{2} \int_0^t (\min \{C, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} d\tau$ y que vale la convergencia de $\ell_n \rightarrow \ell$ cuando $n \rightarrow \infty$ en casi todo $(x, t) \in \Omega \times (0, T)$.

Proposición 2.16. *Se tiene que cuando $n \rightarrow \infty$*

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N_W^n} \left(\sqrt{a_n^0} + \frac{\beta_2}{2} \int_0^t \int_{T_j^n} (\min \{C_n, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} dy d\tau \right) \chi_{T_j^n}(x) \\ \rightarrow \sqrt{a^0(x)} + \frac{\beta_2}{2} \int_0^t (\min \{C, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} d\tau. \end{aligned}$$

en $L^2(\Omega \times [0, T])$ y para casi todo $(x, t) \in \Omega \times [0, T]$.

Demostración. Probaremos primero la convergencia en $L^2(\Omega \times [0, T])$.

La convergencia del primer sumando $\sum_{i=1}^{N_W^n} \sqrt{a_n^0} \chi_{T_j^n}$ a $\sqrt{a^0}$ en $L^2(\Omega)$, y por lo tanto en $L^2(\Omega \times [0, T])$ fue demostrada en la Proposición 2.13.

Para probar la convergencia del segundo sumando, veremos que

$$g_n(x, t) := \sum_{i=1}^{N_W^n} \int_0^t \int_{T_i^n} \min \{C_n(y, \tau), \bar{C}_0\} \sqrt{N(y)} dy d\tau \chi_{T_i^n}(x) \\ \rightarrow \int_0^t \min \{C(x, \tau), \bar{C}_0\} \sqrt{N(x)} d\tau =: g(x, t),$$

en $L^2(\Omega \times [0, T])$. Observemos que para $0 \leq t \leq T$

$$|g_n(x, t) - g(x, t)| \\ \leq \int_0^T \left| \sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} \min \{C_n(y, \tau), \bar{C}_0\} \sqrt{N(y)} dy \chi_{T_i^n}(x) - \min \{C(x, \tau), \bar{C}_0\} \sqrt{N(x)} \right| d\tau.$$

Luego,

$$\|g_n(\cdot, t) - g(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)} \leq T^{1/2} \\ \times \left\| \sum_{i=1}^{N_W^n} \int_{T_i^n} \min \{C_n(y, \tau), \bar{C}_0\} \sqrt{N(y)} dy \chi_{T_i^n}(x) - \min \{C(x, \tau), \bar{C}_0\} \sqrt{N(x)} \right\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))}.$$

Si definimos $X_n = \{v \in L^2(0, T; L^2(\Omega)) : v(\cdot, t) \in W_n\}$, resulta que $\cup_{n=1}^{\infty} X_n$ es denso en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$. Si denotamos con \mathcal{P}_n a la proyección $L^2(\Omega \times (0, T))$ en X_n , la desigualdad anterior resulta,

$$\|g_n(\cdot, t) - g(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)} \leq T^{1/2} \left\| \mathcal{P}_n \left(\min \{C_n, \bar{C}_0\} \sqrt{N} \right) - \min \{C, \bar{C}_0\} \sqrt{N} \right\|_{L^2(\Omega \times (0, T))} \\ \leq T^{1/2} \left\| \mathcal{P}_n \left[\min \{C_n, \bar{C}_0\} \sqrt{N} - \min \{C, \bar{C}_0\} \sqrt{N} \right] \right\|_{L^2(\Omega \times (0, T))} \\ + T^{1/2} \left\| \mathcal{P}_n \left(\min \{C, \bar{C}_0\} \sqrt{N} \right) - \min \{C, \bar{C}_0\} \sqrt{N} \right\|_{L^2(\Omega \times (0, T))}.$$

Como $C_n \rightarrow C$ en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$ resulta que $\min \{C_n, \bar{C}_0\} \sqrt{N} \rightarrow \min \{C, \bar{C}_0\} \sqrt{N}$ en $L^2(\Omega \times [0, T])$. Además, como $N \in L^\infty(\Omega)$, $\|\mathcal{P}_n\| = 1$ resulta que

$$\|g_n(\cdot, t) - g(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)} \rightarrow 0, \text{ para } n \rightarrow \infty. \quad (2.36)$$

Por otro lado, usando (2.19) y la convergencia de (2.30), tenemos que $\|C\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} \leq cte$ y recordando la definición de g , podemos escribir:

$$\begin{aligned} \|g(x, t)\|_{L^2(\Omega)} &= \left\| \int_0^t \text{mín} \{C(x, \tau), \bar{C}_0\} \sqrt{N(x)} d\tau \right\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \|N\|_{L^\infty(\Omega)}^{1/2} \int_0^T \left\| \text{mín} \{C(x, \tau), \bar{C}_0\} \right\|_{L^2(\Omega)} d\tau \leq cte. \end{aligned}$$

Para $\|g_n(x, t)\|_{L^2(\Omega)}$, hacemos como sigue:

$$\begin{aligned} \|g_n(x, t)\|_{L^2(\Omega)} &= \left\| \sum_{i=1}^{N_W^n} \left(\int_0^t \int_{T_j^n} \text{mín} \{C_n, \bar{C}_0\} \sqrt{N} dy d\tau \right) \chi_{T_j^n}(x) \right\|_{L^2(\Omega)} \\ &= \sum_{i=1}^{N_W^n} \left\| \left(\int_0^t \int_{T_j^n} \text{mín} \{C_n, \bar{C}_0\} \sqrt{N} dy d\tau \right) \chi_{T_j^n}(x) \right\|_{L^2(\Omega)} \\ &= \sum_{i=1}^{N_W^n} \left| \int_0^t \int_{T_j^n} \text{mín} \{C_n, \bar{C}_0\} \sqrt{N} dy d\tau \right| |T_j^n|^{1/2} \\ &\leq T^{1/2} \left(\int_0^T \int_{\Omega} (\text{mín} \{C_n, \bar{C}_0\})^2 N dy d\tau \right)^{1/2} \leq cte, \end{aligned}$$

en virtud de (2.19).

Utilizando las últimas cotas encontradas para $\|g_n(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)}$ y $\|g(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)}$, podemos concluir que la función $t \rightarrow \|g_n(\cdot, t) - g(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)}$ está uniformemente acotada. Usando (2.36) y el teorema de la convergencia dominada, tenemos que $g_n \rightarrow g$ en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$. En particular, existe una subsucesión $\{g_{n_\ell}\}$ tal que $g_{n_\ell} \rightarrow g$ en casi todo punto de $\Omega \times [0, T]$.

□

Demostración del Teorema 2.12. Tomemos un $(x, t) \in \Omega \times (0, T)$ tal que vale la convergencia puntual mostrada en la Proposición 2.16. Para dicho (x, t) , vale $\ell_n \rightarrow \ell$ cuando $n \rightarrow \infty$ y por el Lema 2.15 tenemos que $x_n = \sqrt{a_n(x, t)} = \sum_{i=1}^{N_W^n} \alpha_i^n(t) \chi_{T_i^n}(x) \rightarrow \left(\sqrt{a^0(x)} + \frac{\beta_2}{2} \int_0^t (\text{mín} \{C, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} d\tau \right)_+$. Por (2.20) y el teorema de la convergencia dominada, tenemos que

$$\sqrt{a_n} \rightarrow \left(\sqrt{a^0(x)} + \frac{\beta_2}{2} \int_0^t (\text{mín} \{C, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} d\tau \right)_+ =: b, \quad (2.37)$$

con convergencia en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$. Además, como

$$0 \leq a_n \leq (e^T - 1)|\Omega| \left(\beta_2^2 (\bar{C}_0 - C_s)^2 \|\sqrt{N}\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \right) + e^T \|a^0\|_{L^\infty(\Omega)},$$

resulta

$$\|b\|_{L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))} \leq (e^T - 1)|\Omega| \left(\beta_2^2 (\bar{C}_0 - C_s)^2 \|\sqrt{N}\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \right) + e^T \|a^0\|_{L^\infty(\Omega)}. \quad (2.38)$$

Utilizando (2.38),

$$\int_0^T \int_\Omega |a_{n_k} - b^2|^2 dx = \int_0^T \int_\Omega |\sqrt{a_{n_k}} - b|^2 |\sqrt{a_{n_k}} + b|^2 dx \leq 4\mathbb{C} \int_0^T \int_\Omega |\sqrt{a_{n_k}} - b|^2 dx,$$

y por (2.37), obtenemos la convergencia fuerte en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$ de una subsucesión de $\{a_n\}$ a b^2 , luego por unicidad del límite débil y (2.31), tenemos que $b^2 = a$ y

$$\|a\|_{L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))} \leq (e^T - 1)|\Omega| \left(\beta_2^2 (\bar{C}_0 - C_s)^2 \|\sqrt{N}\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \right) + e^T \|a^0\|_{L^\infty(\Omega)}. \quad (2.39)$$

□

Observación 2.17. Es importante notar que la función a obtenida en este proceso de límite es no-negativa en casi todo punto. Una vez establecida la existencia de solución débil, veremos, en la Proposición 2.23 que a es positiva a partir de la ecuación diferencial.

2.3.3. Existencia de solución débil del problema auxiliar

Resumimos los resultados obtenidos en las secciones anteriores respecto a las convergencias en el siguiente teorema:

Teorema 2.18. *Dada la sucesión de pares (C_n, a_n) , $n \in \mathbb{N}$, soluciones de (2.9), existen $C \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$, $a \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$ y una sucesión creciente de números naturales $\{n_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}}$ tal que, para $\ell \rightarrow \infty$,*

$$C_{n_\ell} \rightarrow C \quad \text{en } L^2(0, T; L^2(\Omega)),$$

$$C_{n_\ell} \rightharpoonup C \quad \text{en } L^2(0, T; H^1(\Omega)),$$

$$\begin{aligned}\sqrt{a_{n_\ell}} &\rightarrow \sqrt{a} && \text{en } L^2(0, T; L^2(\Omega)), \\ a_{n_\ell} &\rightarrow a && \text{en } L^2(0, T; L^2(\Omega)).\end{aligned}$$

Además, se tiene una fórmula para a , para casi todo $(x, t) \in \Omega \times [0, T]$:

$$a(x, t) = \left(\sqrt{a^0(x)} + \frac{\beta_2}{2} \int_0^t (\text{mín}\{C, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} \, d\tau \right)_+^2. \quad (2.40)$$

El objetivo de esta sección es demostrar que el par (C, a) dado por este teorema resulta ser un par solución del sistema (2.6).

Sea $\psi \in C^\infty([0, T])$ tal que $\psi(T) = 0$ y $v \in \cup_{n=1}^\infty V_n$, es decir, $v \in V_n$, para algún n . Sea ℓ_0 suficientemente grande tal que $V_n \subset V_{n_{\ell_0}} \subset V_{n_\ell}$ si $n_\ell \geq n_{\ell_0}$. Utilizando integración por partes, tenemos que:

$$\int_0^T (C'_{n_\ell}(t), v)_{L^2(\Omega)} \psi(t) \, dt = - \int_0^T (C_{n_\ell}(t) \psi'(t), v)_{L^2(\Omega)} \, dt - (C_{n_\ell}(0), v)_{L^2(\Omega)} \psi(0),$$

donde, como antes, (\cdot, \cdot) denota el producto escalar de $L^2(\Omega)$. Denotando con $((\cdot, \cdot))$ el producto escalar en $L^2(\Gamma_B)$, usando que C_{n_ℓ} cumple (2.11), tenemos que

$$\begin{aligned}& - \int_0^T (C_{n_\ell}(t) \psi'(t), v) \, dt - (C_{n_\ell}(0), v) \psi(0) \\ &= -D \int_0^T (\nabla C_{n_\ell}, \nabla v) \psi(t) \, dt - k_B \int_0^T ((C_{n_\ell}, v)) \psi(t) \, dt \\ & \quad - \beta_1 \int_0^T (a_{n_\ell} C_{n_\ell}, v) \psi(t) \, dt + \beta_1 C_s \int_0^T (a_{n_\ell}, v) \, dt \\ & \quad + k_B \int_0^T ((C_B, v)) \psi(t) \, dt \\ &= -D \int_0^T (\nabla C_{n_\ell}, \nabla v) \psi(t) \, dt - k_B \int_0^T ((C_{n_\ell}, v)) \psi(t) \, dt \\ & \quad + \beta_1 \int_0^T ((C_s - C_{n_\ell}) a_{n_\ell}, v) \psi(t) \, dt + k_B \int_0^T ((C_B, v)) \psi(t) \, dt.\end{aligned} \quad (2.41)$$

Tomando límite cuando $\ell \rightarrow \infty$ obtenemos

$$\begin{aligned}
& - \int_0^T (C(t)\psi'(t), v) dt - (C^0, v)_{L^2(\Omega)}\psi(0) \\
& = -D \int_0^T (\nabla C, \nabla v)\psi(t) dt - k_B \int_0^T ((C, v))\psi(t) dt \\
& \quad + \beta_1 \int_0^T ((C_s - C)a, v)\psi(t) dt + k_B \int_0^T ((C_B, v))\psi(t) dt.
\end{aligned} \tag{2.42}$$

Estudiemos la convergencia de cada término:

$$\boxed{1} \quad \lim_{n_\ell \rightarrow \infty} \int_0^T \int_\Omega C_{n_\ell}(t)v dx \psi'(t) dt = \int_0^T \int_\Omega C(t)v dx \psi'(t) dt.$$

Como $C_{n_\ell} \rightharpoonup C$ en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$, esta igualdad es cierta porque $v \in L^2(\Omega)$ y $\psi \in C^\infty([0, T])$ implican que $T_v(g) = D \int_0^T \int_\Omega gv dx \psi dt$ es un funcional lineal y acotado en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$.

$$\boxed{2} \quad \lim_{n_\ell \rightarrow \infty} \int_\Omega C_{n_\ell}(0)v dx \psi(0) = \int_\Omega C^0 v dx \psi(0).$$

Por ser $C_{n_\ell}(0)$ la proyección $L^2(\Omega)$ de C^0 en V_{n_ℓ} , y por las propiedades de densidad y anidamiento de la sucesión $\{V_n\}$, tenemos que $\|C_{n_\ell}(0) - C^0\|_{L^2(\Omega)} \rightarrow 0$ cuando $n_\ell \rightarrow \infty$, y como $v \in L^2(\Omega)$ se tiene la convergencia deseada por la desigualdad de Hölder.

Observación 2.19. Observemos que si $C_n(0)$ fuera la proyección H^1 de C^0 en V_n , entonces $C_n(0) \rightarrow C^0$ en $H^1(\Omega)$ y por lo tanto también se da la convergencia en $L^2(\Omega)$ obteniendo la misma afirmación del paso $\boxed{2}$.

$$\boxed{3} \quad \lim_{n_\ell \rightarrow \infty} D \int_0^T \int_\Omega \nabla C_{n_\ell} \nabla v dx \psi dt - k_B \int_0^T \int_{\Gamma_B} C_{n_\ell} v dx \psi dt = D \int_0^T \int_\Omega \nabla C \nabla v dx \psi dt - k_B \int_0^T \int_{\Gamma_B} C v dx \psi dt.$$

Justificamos el límite anterior observando que dado $v \in H^1(\Omega)$ y $\psi \in C^\infty([0, T])$, $T_v(g) = D \int_0^T \int_\Omega \nabla g \nabla v dx \psi dt - k_B \int_0^T \int_{\Gamma_B} gv dx \psi dt$, es un funcional lineal y acotado en $L^2(0, T; H^1(\Omega))$ por el teorema de trazas. Luego, de la convergencia débil de $\{C_{n_\ell}\}$ a C en $L^2(0, T; H^1(\Omega))$ enunciada en (2.24) se sigue la convergencia deseada.

$$\boxed{4} \quad \lim_{n_\ell \rightarrow \infty} \int_0^T \int_\Omega (C_s - C_{n_\ell})a_{n_\ell} v dx \psi(t) dt = \int_0^T \int_\Omega (C_s - C)av dx \psi(t) dt.$$

Para ver que el límite anterior es válido observemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} & \left| \int_0^T \int_{\Omega} (C_s - C_{n_\ell}) a_{n_\ell} v \, dx \, \psi(t) \, dt - \int_0^T \int_{\Omega} (C_s - C) a v \, dx \, \psi(t) \, dt \right| \\ & \leq \left| \int_0^T \int_{\Omega} ((C_s - C) - (C_s - C_{n_\ell})) a_{n_\ell} v \, dx \, \psi(t) \, dt \right| \\ & \quad + \left| \int_0^T \int_{\Omega} (C_s - C) (a_{n_\ell} - a) v \, dx \, \psi(t) \, dt \right|, \end{aligned}$$

y por la desigualdad de Hölder,

$$\begin{aligned} & \leq \|C_{n_\ell} - C\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} \|a_{n_\ell}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} \|v\psi\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))} \\ & \quad + \|C_s - C\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} \|a_{n_\ell} - a\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} \|v\psi\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}. \end{aligned}$$

Por la convergencia fuerte en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$ de C_{n_ℓ} a C y de a_{n_ℓ} a a se obtiene el límite buscado.

□ $k_B \int_0^T \int_{\Gamma_B} C_B v \, dx \, \psi(t) \, dt$ es un término constante respecto de n_ℓ .

Ya que cada término de (2.42) depende linealmente y continuamente de v , para la norma $H^1(\Omega)$, dicha ecuación sigue siendo válida para cualquier $v \in H^1(\Omega)$, pues $\cup_{n=1}^\infty V_n$ es densa en $H^1(\Omega)$.

Escribiendo (2.42) para $\psi \in C_c^\infty(0, T)$, obtenemos la siguiente igualdad, válida en el sentido de las distribuciones en $(0, T)$, para toda $v \in H^1(\Omega)$:

$$\frac{d}{dt}(C, v) = -D(\nabla C, \nabla v) - \beta_1(aC, v) - k_B(C, v)_{L^2(\Gamma_B)} + \beta_1 C_s(a, v) + k_B(C_B, v)_{L^2(\Gamma_B)}.$$

Luego, por ser $H^1(\Omega)$ reflexivo, aplicando el Lema 6.26 con $X = H^{-1}(\Omega)$ y la Definición 6.23, tenemos que $C_t \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$ y vale la ecuación para C en (2.6), es decir, para todo $v \in H^1(\Omega)$ y casi todo $t \in [0, T]$:

$$\langle C_t, v \rangle + D \int_{\Omega} \nabla C \nabla v + \beta_1 \int_{\Omega} a C v + k_B \int_{\Gamma_B} C v = \beta_1 \int_{\Omega} a C_s v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v.$$

Falta ver que se cumple la condición inicial. Para ello, tomando $v \in H^1(\Omega)$ fijo, multiplicamos la ecuación anterior por $\psi \in C^\infty(0, T)$ y tal que $\psi(T) = 0$ e integramos respecto

de t ambos miembros de la ecuación:

$$\begin{aligned} \int_0^T \langle C_t, v \rangle \psi \, dt &= -D \int_0^T \int_{\Omega} \nabla C \nabla v \, dx \, \psi \, dt - \beta_1 \int_0^T \int_{\Omega} a C v \, dx \, \psi \, dt - k_B \int_0^T \int_{\Gamma_B} C v \, \psi \, dt \\ &\quad + \beta_1 \int_0^T \int_{\Omega} a C_s v \, dx \, \psi \, dt + k_B C_B \int_0^T \int_{\Gamma_B} v \, dx \, \psi \, dt. \end{aligned}$$

Utilizando la identidad (6.9) y la afirmación (i) del Lema 6.26, se tiene que:

$$\begin{aligned} - \int_0^T (C, v) \psi' \, dt - (C(0), v) \psi(0) &= -D \int_0^T \int_{\Omega} \nabla C \nabla v \, dx \, \psi \, dt - \beta_1 \int_0^T \int_{\Omega} a C v \, dx \, \psi \, dt \\ &\quad - k_B \int_0^T \int_{\Gamma_B} C v \, dx \, \psi \, dt + \beta_1 \int_0^T \int_{\Omega} a C_s v \, dx \, \psi \, dt + k_B C_B \int_0^T \int_{\Gamma_B} v \, dx \, \psi \, dt. \end{aligned}$$

Comparando la ecuación anterior con (2.42), concluimos que: $(C(0) - C^0, v) \psi(0) = 0$, y así llegamos a que

$$(C(0) - C^0, v) = 0, \quad \forall v \in H^1(\Omega).$$

Luego por el Teorema 6.39, C coincide con una función continua de $[0, T]$ en $L^2(\Omega)$ y $C(0) = C^0$.

Veamos ahora la ecuación para a . Por (2.40) se tiene que

$$a = \left(\sqrt{a^0(x)} + \frac{\beta_2}{2} \int_0^t (\min \{C, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N} \, d\tau \right)_+^2.$$

Luego,

$$a_t = 2\sqrt{a_+} \frac{\beta_2}{2} (\min \{C, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{N}.$$

Como $(\min \{C, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{a_+} \sqrt{N} \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$, se tiene que $a_t \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$ y para cada $w \in L^2(\Omega)$ y casi todo $t \in [0, T]$,

$$(a_t, w) = \left(\beta_2 (\min \{C, \bar{C}_0\} - C_s) \sqrt{a_+} \sqrt{N}, w \right). \quad (2.43)$$

Veamos que vale la condición inicial para a . Hemos observado anteriormente que $a, a_t \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$. Luego por el Lema 6.26 se tiene que a coincide en casi todo punto con una función en $C([0, T]; L^2(\Omega))$. Luego, reemplazando en su ecuación se tiene que $a(0) = a^0$ en $L^2(\Omega)$.

Hemos demostrado entonces el siguiente teorema:

Teorema 2.20. *El par (C, a) del Teorema 2.18 es solución del problema auxiliar (2.6).*

2.3.4. Equivalencia entre el problema auxiliar y el original

Para demostrar la existencia de soluciones del problema original (1.5) veremos que en realidad éste es equivalente al problema auxiliar (2.6).

Notemos que hay sólo dos diferencias entre el problema (2.6) y el problema (1.5). Estas se encuentran en la segunda ecuación, donde aparece $\sqrt{a_+}$ en lugar de \sqrt{a} y $\min\{C, \bar{C}_0\}$ en lugar de C , con $\bar{C}_0 = \max\{\|C^0\|_{L^\infty(\Omega)}, C_s\}$. Habremos probado que toda solución de (2.6) es solución de (1.5) cuando demostremos que $a \geq 0$ y que $C \leq \bar{C}_0$. Lo haremos a través de dos proposiciones.

Proposición 2.21. *Si el par (C, a) es solución del problema auxiliar (2.6) ó de (1.5), entonces $C \leq \bar{C}_0$.*

Demostración. Sea (C, a) un par solución de (2.6). Tomando $v = (C - \bar{C}_0)_+$ en (2.6) o en (1.5), teniendo en cuenta que $\bar{C}_0 = \max\{\|C^0\|_{L^\infty(\Omega)}, C_s\}$ es una constante, obtenemos la siguiente igualdad:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (C - \bar{C}_0)_t (C - \bar{C}_0)_+ + D \int_{\Omega} \left| \nabla (C - \bar{C}_0)_+ \right|^2 + k_B \int_{\Gamma_B} (C - C_B) (C - \bar{C}_0)_+ \\ = \int_{\Omega} \beta_1 a (C_s - C) (C - \bar{C}_0)_+, \end{aligned}$$

o lo que es lo mismo

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left\| (C - \bar{C}_0)_+ \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + D \left\| \nabla (C - \bar{C}_0)_+ \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + k_B \int_{\Gamma_B} (C - C_B) (C - \bar{C}_0)_+ \\ = \int_{\Omega} \beta_1 a (C_s - C) (C - \bar{C}_0)_+. \end{aligned}$$

Ahora, como $C_B \leq C_s \leq \bar{C}_0$, si $(C - \bar{C}_0)_+ \neq 0$ resulta $(C - \bar{C}_0)_+ > 0$ y entonces

- $C > \bar{C}_0 \geq C_B$, que implica $(C - C_B) (C - \bar{C}_0)_+ \geq 0$;
- $C > \bar{C}_0 \geq C_s$, que implica $(C_s - C) (C - \bar{C}_0)_+ \leq 0$.

Resumiendo,

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left\| (C - \bar{C}_0)_+ \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq 0.$$

Por lo tanto,

$$0 \leq \left\| (C(t) - \bar{C}_0)_+ \right\|_{L^2(\Omega)} \leq \left\| (C(0) - \bar{C}_0)_+ \right\|_{L^2(\Omega)} = \left\| (C^0 - \bar{C}_0)_+ \right\|_{L^2(\Omega)} = 0, \quad \forall t > 0.$$

Por lo tanto, $\bar{C}_0 - C \geq 0$ para todo $x \in \Omega$ y todo $t > 0$. \square

De manera análoga, puede demostrarse que si $C^0 \geq C_B$, entonces la solución se mantiene siempre por encima de C_B . Más precisamente:

Proposición 2.22. *Sea (C, a) un par solución de (2.6) o de (1.5), y supongamos que $C_B \leq C_s$ y $C^0(x) \geq C_B$, para casi todo $x \in \Omega$. Entonces $C(x, t) \geq C_B$ para casi todo $(x, t) \in \Omega \times [0, T]$.*

Demostración. La demostración es análoga a la de la proposición anterior, tomando como función de prueba $v = (C_B - C)_+$. \square

Observar que la primera ecuación de ambos sistemas coincide y es la que interviene en la prueba de la Proposición 2.21. Luego en ambos sistemas se cumple que $\min \{\bar{C}_0, C\} = C$. Luego podemos escribir la segunda ecuación del problema auxiliar (2.6) como

$$\int_{\Omega} a_t w = \beta_2 \int_{\Omega} (C - C_s) \sqrt{a_+} \sqrt{N} w, \quad \forall w \in L^2(\Omega) \text{ y c.t.t } t \in [0, T].$$

Proposición 2.23. *Si $a \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$, $a_t \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$ y $C \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$, $C_t \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$ conforman un par solución del problema (2.6), entonces $a = a_+$ y luego a satisface*

$$\int_{\Omega} a_t w = \beta_2 \int_{\Omega} (C - C_s) \sqrt{a} \sqrt{N} w, \quad \forall w \in L^2(\Omega) \text{ y c.t.t } t \in [0, T].$$

Demostración. En

$$\int_{\Omega} a_t w = \beta_2 \int_{\Omega} (C - C_s) \sqrt{a_+} \sqrt{N} w,$$

tomamos $w = a_-$ y recordando que $a = a_+ - a_-$ donde a_+ y a_- tienen dominios disjuntos, nos queda: $\int_{\Omega} (a_+ - a_-)_t a_- = 0$ entonces $\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|a_-(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 = 0$ luego $\|a_-(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 = \|a_-(0)\|_{L^2(\Omega)}^2 = \|a_-^0\|_{L^2(\Omega)}^2 = 0$, porque $a^0 \geq 0$. \square

Como consecuencia de estas proposiciones, concluimos que vale el siguiente teorema:

Teorema 2.24. *El par (C, a) es solución del problema (1.5) si y sólo si es solución del problema (2.6).*

Resumimos los resultados de esta sección en el siguiente teorema:

Teorema 2.25 (Existencia de solución). *Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio acotado con frontera Lipschitz $\partial\Omega = \Gamma_N \cup \Gamma_B$, y sean β_1, β_2, k_B y C_B constantes positivas, $N \in L^\infty(\Omega)$, $N \geq 0$, $0 \leq C_B \leq C_s$, y $C^0, a^0 \in L^\infty(\Omega)$, $a^0, C^0 \geq 0$, $\bar{C}_0 = \max\{\|C^0\|_{L^\infty(\Omega)}, C_s\}$. Entonces existe un par solución (C, a) del problema (1.5), es decir, un par (C, a) que cumple:*

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle C_t, v \rangle + \mathcal{B}[C, v] = \beta_1 \int_{\Omega} a(C_s - C)v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v, \quad \forall v \in H^1(\Omega) \text{ y c.t. } t \in [0, T], \\ \int_{\Omega} a_t w = \beta_2 \int_{\Omega} (C - C_s) \sqrt{N} \sqrt{a} w, \quad \forall w \in L^2(\Omega) \text{ y c.t. } t \in [0, T], \\ C(0) = C^0, \\ a(0) = a^0, \end{array} \right.$$

con $a \in H^1(0, T; L^2(\Omega))$, $a \geq 0$ y $C \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$, $C_t \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$; donde $\langle C_t, v \rangle$ denota la aplicación del funcional $C_t \in H^{-1}(\Omega)$ a $v \in H^1(\Omega)$ en un t fijo y

$$\mathcal{B}[C, v] := D \int_{\Omega} \nabla C \nabla v + k_B \int_{\Gamma_B} C v.$$

Además, valen las siguientes acotaciones:

$$C_B \leq C \leq \bar{C}_0, \quad 0 \leq a, \quad \text{en casi todo } (x, t) \in \Omega \times [0, T]. \quad (2.44)$$

2.4. Unicidad de solución

En esta sección estudiaremos la unicidad de soluciones del problema (1.5). Consideraremos dos situaciones. Un primer caso en el que la condición inicial $C^0 \leq C_s$ en Ω y otro en el cual puede ocurrir que $C^0 \geq C_s$ en alguna región del dominio.

2.4.1. Concentración inicial por debajo de la de saturación

En esta sección suponemos que $C^0(x) \leq C_s$ para casi todo $x \in \Omega$, y por lo tanto, $\bar{C}_0 = \max\{\|C^0\|_{L^\infty(\Omega)}, C_s\} = C_s$, que implica que para todo par solución (C, a) de (1.5) se tiene que $C \leq C_s$, para casi todo $(x, t) \in \Omega \times [0, T]$.

Para demostrar la unicidad supongamos que (C_1, a_1) y (C_2, a_2) son soluciones de (1.5). Escribiendo las ecuaciones correspondientes para a_1 y a_2 y restándolas obtenemos:

$$\int_{\Omega} (a_1 - a_2)_t w = \beta_2 \int_{\Omega} ((C_1 - C_s)\sqrt{a_1} - (C_2 - C_s)\sqrt{a_2})\sqrt{N}w.$$

Sumando y restando $\beta_2 \int_{\Omega} C_2\sqrt{a_1}\sqrt{N}w$ obtenemos la siguiente ecuación:

$$\int_{\Omega} (a_1 - a_2)_t w \, dx = \beta_2 \int_{\Omega} (C_1 - C_2)\sqrt{a_1}\sqrt{N}w \, dx + \beta_2 \int_{\Omega} (C_s - C_2)(\sqrt{a_2} - \sqrt{a_1})\sqrt{N}w \, dx,$$

para $w \in L^2(\Omega)$.

Tomando $w = a_1 - a_2$ obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|a_1 - a_2\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \beta_2 \int \sqrt{N}\sqrt{a_1}(C_1 - C_2)(a_1 - a_2) \\ &\quad + \beta_2 \int \sqrt{N}(C_s - C_2)(\sqrt{a_2} - \sqrt{a_1})(a_1 - a_2). \end{aligned} \tag{2.45}$$

Ahora bien, como $C^0 \leq C_s$ en c.t.p. de Ω , resulta que $\bar{C}^0 = C_s$ y entonces $C_1, C_2 \leq C_s$ en $\Omega \times [0, T]$ y $C_s - C_2 \geq 0$. Además, por la monotonía de la función raíz cuadrada,

$$(\sqrt{a_2} - \sqrt{a_1})(a_1 - a_2) = -(\sqrt{a_1} - \sqrt{a_2})(a_1 - a_2) \leq 0,$$

y la segunda integral de (2.45) resulta menor o igual que cero. Por lo tanto

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|a_1 - a_2\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq \beta_2 \int (C_1 - C_2)(a_1 - a_2) \sqrt{N} \sqrt{a_1}, \\ &\leq \frac{\beta_2^2}{2} \int (C_1 - C_2)^2 + \frac{\|a_1\|_{L^\infty} \|N\|_{L^\infty}}{2} \int (a_1 - a_2)^2. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Tomemos ahora la ecuación para C_1 y C_2 de la formulación débil (1.5) del problema (2.1) y las restamos:

$$\begin{aligned} \langle (C_1 - C_2)_t, v \rangle + D \int_{\Omega} \nabla(C_1 - C_2) \cdot \nabla v + k_B \int_{\Gamma_B} (C_1 - C_2)v \\ = \beta_1 \int_{\Omega} C_s(a_1 - a_2)v + \beta_1 \int_{\Omega} (C_2 a_2 - C_1 a_1)v. \end{aligned}$$

Sumando y restando $\beta_1 \int_{\Omega} C_2 a_1 v$ al lado derecho de la ecuación anterior obtenemos

$$\begin{aligned} \langle (C_1 - C_2)_t, v \rangle + D \int_{\Omega} \nabla(C_1 - C_2) \nabla v + k_B \int_{\Gamma_B} (C_1 - C_2)v \\ = \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C_2)(a_1 - a_2)v - \beta_1 \int_{\Omega} (C_1 - C_2)a_1 v. \end{aligned}$$

Tomando $v = C_1 - C_2$ y aplicando el Teorema 6.39 obtenemos:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|C_1 - C_2\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C_2)(a_1 - a_2)(C_1 - C_2).$$

Como $C_2 \leq C_s$, se tiene que $0 \leq C_s - C_2 \leq C_s$ por lo que

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|C_1 - C_2\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \frac{1}{2} \beta_1^2 C_s^2 \int (C_1 - C_2)^2 + \frac{1}{2} \int (a_1 - a_2)^2. \quad (2.47)$$

Sumando (2.46) y (2.47) obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[\|a_1 - a_2\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|C_1 - C_2\|_{L^2(\Omega)}^2 \right] \\ \leq \max \left\{ 1 + \|a_1\|_{L^\infty} \|N\|_{L^\infty}, \beta_1^2 C_s^2 + \beta_2^2 \right\} \left[\|a_1 - a_2\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|C_1 - C_2\|_{L^2(\Omega)}^2 \right]. \end{aligned}$$

Aplicando la forma diferencial de la Desigualdad de Gronwall (6.6), tenemos que para

todo $t \in [0, T]$ vale:

$$\|(a_1 - a_2)(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|(C_1 - C_2)(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq e^{\max\{1 + \|a_1\|_{L^\infty} \|N\|_{L^\infty}, \beta_1^2 C_s^2 + \beta_2^2\} t} \left[\|(a_1 - a_2)(0)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|(C_1 - C_2)(0)\|_{L^2(\Omega)}^2 \right],$$

y teniendo en cuenta que las condiciones iniciales para (a_1, C_1) y (a_2, C_2) coinciden, tenemos que:

$$\|(a_1 - a_2)(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|(C_1 - C_2)(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq 0,$$

luego, $a_1(t) = a_2(t)$ y $C_1(t) = C_2(t)$ en sentido $L^2(\Omega)$ para todo $t \in [0, T]$.

Hemos probado el siguiente teorema:

Teorema 2.26 (Unicidad de solución). *El problema (1.5) con la hipótesis adicional de $C^0 \leq C_s$ tiene solución única.*

Observación 2.27. Como $H^1(\Omega) \subset L^2(\Omega)$, las Observaciones 2.6, 2.9, 2.19 y la unicidad de la solución del problema acoplado (2.6) para $\bar{C}_0 = C_s$, tenemos que $\{C_n\}$ definida en la Proposición 2.4 y $\{\bar{C}_n\}$ definida en el Comentario 2.6, nos conducen al mismo par solución (C, a) .

2.4.2. Concentración inicial mayor que la de saturación

En esta sección veremos que si permitimos que $C^0 > C_s$ en alguna región del dominio, existe una situación de no-unicidad de soluciones del problema (1.5). Concretamente, el caso más sencillo de no unicidad de soluciones se da cuando existe un conjunto de medida positiva $\Omega_0 \subset \Omega$ donde $C^0 > C_s + \varepsilon > C_s$, para algún $\varepsilon > 0$, y $a^0 \equiv 0$ en Ω . En ese caso, la construcción de las secciones anteriores da un par solución (C_1, a_1) de (1.5) que satisfará lo siguiente:

- Dado un conjunto de medida positiva $\Omega_1 \subset \subset \Omega_0$, existe $t_1 > 0$ tal que

$$C_1(x, t) > C_s, \quad x \in \Omega_1, \quad 0 \leq t < t_1.$$

- Para casi todo $x \in \Omega$, y $t > 0$

$$a_1(x, t) = \left(\frac{\beta_2}{2} \int_0^t (C_1 - C_s) \sqrt{N} \, d\tau \right)_+^2,$$

por lo que $a_1(x, t) > 0$ para casi todo $x \in \Omega_1$ y $0 < t < t_1$.

El primer ítem es consecuencia de la continuidad de $[0, T] \rightarrow L^2(\Omega)$ de C y el segundo se debe a la fórmula (2.40).

Por otro lado, definamos $a_2 \equiv 0$ y sea C_2 la solución débil de la siguiente ecuación (lineal) de difusión, que se obtiene tomando $a \equiv 0$ en (2.1):

$$\begin{cases} C_t - D\Delta C = 0, & \text{en } \Omega \times [0, T], \\ C(0) = C^0 & \text{en } \Omega, \\ D\nabla C \cdot n = 0 & \text{en } \Gamma_N \times [0, T], \\ D\nabla C \cdot n = k_B(C_B - C) & \text{en } \Gamma_B \times [0, T]. \end{cases} \quad (2.48)$$

Entonces el par (C_2, a_2) también es solución de (1.5).

Claramente estos pares son diferentes, y por lo tanto existen dos soluciones diferentes del mismo problema (1.5).

Observación 2.28. Es necesario que $C^0 > C_s$ en alguna región del dominio, además de que $a^0 \equiv 0$ para tener múltiples soluciones. En la sección anterior se consideró el caso $C^0 \leq C_s$, y se vio que la solución es única, sin importar cuál es la condición inicial para a ; sólo suponiendo $a^0 \geq 0$. Si $C^0 \leq C_s$ y $a^0 \equiv 0$, el único par solución de (2.1) se obtiene tomando $a \equiv 0$ y C la única solución débil de (2.48).

Conjeturamos que puede haber múltiples soluciones cuando $C^0 > C_s$ en un conjunto de medida positiva, aunque $a^0 > 0$ en casi todo punto de Ω , en una situación como la siguiente: Si a^0 es pequeño donde $C^0 \ll C_s$, entonces a decrecerá en esa región y puede llegar a cero. Luego, por difusión, la concentración puede aumentar en esa región y en un tiempo $t > 0$ se puede tener que en una región de medida positiva de Ω , sea $a(\cdot, t) = 0$ y $C(\cdot, t) > C_s$. Esto será tema de investigaciones futuras y escapa al alcance de esta tesis.

Regularidad

En este capítulo estudiaremos la regularidad del par solución (C, a) del problema (1.5), bajo las hipótesis que garantizan solución única, es decir, $C^0 \leq C_s$. Bajo estas hipótesis tenemos también que del par solución (C, a) , la variable $a(x, t)$ está dada por la fórmula (2.40)

$$a(x, t) = \left(\sqrt{a^0(x)} + \frac{\beta_2}{2} \int_0^t \sqrt{N} (\min\{C, \bar{C}_0\} - C_s) \, d\tau \right)_+^2,$$

y recordando la definición de $\bar{C}_0 = \max\{\|C^0\|_{L^\infty(\Omega)}, C_s\}$, tenemos que $\bar{C}_0 = C_s$. Luego en la desigualdad (2.44) del Teorema 2.25, se tiene que $C_B \leq C \leq C_s$ en casi todo $(x, t) \in \Omega \times [0, T]$ y entonces $\min\{C, C_s\} - C_s = C - C_s$. Así, en la ecuación para a , el término $\frac{\beta_2}{2} \int_0^t \sqrt{N} (C_s - C) \, d\tau$ es no negativo y podemos concluir que $a \leq a^0$ en casi todo $(x, t) \in \Omega \times [0, T]$.

Veamos que algo similar sucede para las aproximaciones de Galerkin a_n . Nuevamente $\min\{C_n, C_s\} - C_s = -(C_s - C_n)_+$. Luego, de la ecuación de la derivada temporal para $\alpha_i^{n'}$, (2.15), podemos concluir que en este caso,

$$\|a_n\|_{L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))} \leq \|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2, \quad (3.1)$$

y en particular, dicha acotación, también vale para $\|\bar{a}_n\|_{L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))}$.

Para los siguientes resultados se suponen las hipótesis del Teorema de Unicidad de solución 2.26. En cada proposición sólo se enuncian las hipótesis adicionales.

Es interesante notar que los resultados de regularidad tienen una limitación, debida a la aparición de \sqrt{a} en las ecuaciones. Este término implica que a se anula en regiones de medida positiva a tiempo finito, y ocurre que $a(\cdot, t)$ no pertenece a $H^3(\Omega)$ aunque a_0 sea $C^\infty(\Omega)$ o incluso constante.

Proposición 3.1. *Existe la derivada temporal de la raíz de a y $(\sqrt{a})_t \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$ con*

$$(\sqrt{a})_t = -\frac{\beta_2}{2} \sqrt{N}(C_s - C) \chi_{\{\sqrt{a} > 0\}}.$$

Además $(\sqrt{a})_t \in L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))$.

Demostración. Recordemos que para \sqrt{a} tenemos la ecuación:

$$\sqrt{a} = \left(\sqrt{a^0} - \frac{\beta_2}{2} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C) \, d\tau \right)_+.$$

Por el Corolario 6.18, si $\sqrt{N}(C_s - C)$ es integrable, la derivada débil temporal de $\int_0^t \sqrt{N}(C_s - C)$ es $\sqrt{N}(C_s - C)$. Luego podemos aplicar la Proposición 6.6 y como $\sqrt{a^0}$ es independiente de la variable temporal, obtenemos:

$$(\sqrt{a})_t = -\frac{\beta_2}{2} \sqrt{N}(C_s - C) \chi_{\{\sqrt{a^0} - \frac{\beta_2}{2} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C) \, d\tau > 0\}} = -\frac{\beta_2}{2} \sqrt{N}(C_s - C) \chi_{\{\sqrt{a} > 0\}}.$$

Además, tomando t fijo donde vale la igualdad anterior, tenemos que:

$$\|(\sqrt{a})_t\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \frac{\beta_2}{2} \|\sqrt{N}\|_{L^\infty(\Omega)} \|C_s - C\|_{L^\infty(\Omega)},$$

y por el Teorema 2.25, podemos concluir que

$$\|(\sqrt{a})_t\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \frac{\beta_2}{2} C_s |\Omega|^{1/2} \|\sqrt{N}\|_{L^\infty(\Omega)}.$$

Luego $(\sqrt{a})_t \in L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))$. □

Proposición 3.2. *Si $\sqrt{a^0}, \sqrt{N} \in L^\infty(\Omega) \cap H^1(\Omega)$, entonces $\sqrt{a}, a \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$.*

Demostración. Recordemos que para \sqrt{a} tenemos la ecuación:

$$\sqrt{a} = \left(\sqrt{a^0} - \frac{\beta_2}{2} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C) \, d\tau \right)_+,$$

luego por la Proposición 6.34, como $\sqrt{N}(C_s - C) \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$, se tiene que $\int_0^t \sqrt{N}(C_s - C) \in L^\infty(0, T; H^1(\Omega))$ y que $\frac{\partial}{\partial x_i} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C) = \int_0^t \frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{N}(C_s - C)$. Tomando $t \in [0, T]$,

fijo y aplicando la Proposición 6.6, tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{a} = \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{a^0(x)} - \frac{\beta_2}{2} \int_0^t \frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{N}(C_s - C)(x, s) ds \right) \chi_{\{\sqrt{a} > 0\}},$$

y que $\sqrt{a} \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$. Para a tenemos la ecuación:

$$a = \left(\sqrt{a^0} - \frac{\beta_2}{2} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C) \right)_+^2 = (\sqrt{a})^2.$$

Como $\sqrt{a(t)} \in L^\infty(\Omega) \cap H^1(\Omega)$ para t fijo, aplicamos la Proposición 6.5 y tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} a(x, t) &= 2 \left(\sqrt{a^0(x)} - \frac{\beta_2}{2} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C)(x, s) ds \right)_+ \\ &\quad \times \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{a^0(x)} - \frac{\beta_2}{2} \int_0^t \frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{N}(C_s - C)(x, s) ds \right). \end{aligned}$$

Veamos que dicha derivada parcial está en $L^2(\Omega)$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} a(x, t) \right)^2 &= 4 \left(\sqrt{a^0(x)} - \frac{\beta_2}{2} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C)(x, s) ds \right)_+^2 \\ &\quad \times \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{a^0(x)} - \frac{\beta_2}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C)(x, s) ds \right)^2 \\ &\leq 8 \left(a^0(x) + \frac{\beta_2^2}{4} \left(\int_0^t \sqrt{N}(C_s - C)(x, s) ds \right)^2 \right) \\ &\quad \times \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{a^0(x)} - \frac{\beta_2}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C)(x, s) ds \right)^2, \end{aligned}$$

como $0 \leq C$,

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_i} a(x, t) \right)^2 \leq 8 \left(a^0(x) + \frac{\beta_2^2}{4} C_s^2 t^2 N(x) \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{a^0(x)} - \frac{\beta_2}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C)(x, s) ds \right)^2.$$

Luego,

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_\Omega \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial}{\partial x_i} a(x, t) \right)^2 dx dt &\leq 8 \int_0^T \int_\Omega \left(a^0(x) + \frac{\beta_2^2}{4} C_s^2 t^2 N(x) \right) \\ &\quad \times \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{a^0(x)} - \frac{\beta_2}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C)(x, s) ds \right)^2 dx dt, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^T \int_{\Omega} |\nabla_x a(x, t)|^2 dx dt &\leq 8 \int_0^T \left(\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + \frac{\beta_2^2}{4} C_s^2 t^2 \|N\|_{L^\infty(\Omega)} \right) \\
&\quad \times \int_{\Omega} \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{a^0(x)} - \frac{\beta_2}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C)(x, s) ds \right)^2 dx dt, \\
\int_0^T \int_{\Omega} |\nabla_x a(x, t)|^2 dx dt &\leq 8 \left(\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + \frac{\beta_2^2}{4} C_s^2 T^2 \right) \\
&\quad \times \int_0^T \int_{\Omega} \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{a^0(x)} - \frac{\beta_2}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \int_0^t \sqrt{N}(C_s - C)(x, s) ds \right)^2 dx dt,
\end{aligned}$$

y como $\sqrt{a^0} \in H^1(\Omega)$ y $\int_0^t \sqrt{N}(C_s - C)(x, s) ds \in L^\infty(0, T; H^1(\Omega))$ se concluye que $a \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$. \square

Teorema 3.3. Si $C^0 \in H^1(\Omega)$, entonces

$$C \in L^\infty(0, T; H^1(\Omega)), \quad C_t \in L^2(0, T; L^2(\Omega)),$$

y vale la siguiente estimación:

$$\begin{aligned}
\mathbb{C}_1 \sup_{0 \leq t \leq T} \|C(t)\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|C_t\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))}^2 \\
\leq 2\beta_1^2 \frac{\mathbb{C}_5}{\mathbb{C}_4} (\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2)^4 |\Omega| T^2 + \\
+ 2\beta_1^2 (\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2)^2 \left(\frac{k_B}{2\mathbb{C}_4} C_B^2 |\Gamma_B| T + \frac{1}{2\mathbb{C}_4} \|C^0\|_{H^1(\Omega)}^2 + C_s^2 |\Omega| T \right) \\
+ 2\mathbb{C}_2 \|C^0\|_{H^1(\Omega)}^2 + (2\mathbb{C}_2 + \mathbb{C}_1) C_B^2 |\Omega|.
\end{aligned}$$

Demostración. Por la Observación 2.6 tenemos que \bar{C}_n cumple la siguiente ecuación:

$$(\bar{C}_{n,t}, v) + D \int_{\Omega} \nabla \bar{C}_n \nabla v + k_B \int_{\Gamma_B} (\bar{C}_n - C_B) v = \beta_1 \int_{\Omega} \bar{a}_n (C_s - \bar{C}_n) v, \quad \forall v \in V_n.$$

luego, como C_B es constante respecto de x ,

$$(\bar{C}_{n,t}, v) + \mathcal{B} [(\bar{C}_n - C_B), v] = \beta_1 \int_{\Omega} \bar{a}_n (C_s - \bar{C}_n) v, \quad \forall v \in V_n.$$

En la ecuación anterior tomemos $v = v_k$, una función de la base nodal de V_n , y multipliquemos la ecuación por $\bar{c}'_k(t)$ para $1 \leq k \leq N_n^n$. Sumando en k y como C_B es constante

respecto de t , obtenemos:

$$\begin{aligned}
\|\bar{C}_{n,t}\|^2 + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \mathcal{B} [\bar{C}_n - C_B, \bar{C}_n - C_B] &= \beta_1 \int_{\Omega} \bar{a}_n (C_s - \bar{C}_n) \bar{C}_{n,t} \\
&\leq \beta_1 \|\bar{a}_n\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}^2 \|C_s - \bar{C}_n\|_{L^2(\Omega)} \|\bar{C}_{n,t}\|_{L^2(\Omega)} \\
&\leq \frac{\beta_1^2}{2} \|\bar{a}_n\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}^2 \|C_s - \bar{C}_n\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{2} \|\bar{C}_{n,t}\|_{L^2(\Omega)}^2,
\end{aligned}$$

e integrando de 0 a t , con $t \leq T$,

$$\begin{aligned}
\int_0^t \|\bar{C}_{n,t}\|^2 dt + \mathcal{B} [\bar{C}_n - C_B, \bar{C}_n - C_B] (t) &\leq 2\beta_1^2 \|\bar{a}_n\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}^2 \|\bar{C}_n\|_{L^2(0,t;L^2(\Omega))}^2 \\
&\quad + 2\beta_1^2 \|\bar{a}_n\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))}^2 C_s^2 |\Omega| t \\
&\quad + \mathcal{B} [\bar{C}_n - C_B, \bar{C}_n - C_B] (0),
\end{aligned}$$

y recordando la coercitividad y acotación de la forma bilineal, (2.4) y (2.3), y la acotación (3.1), resulta

$$\begin{aligned}
\int_0^t \|\bar{C}_{n,t}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \mathbb{C}_1 \|\bar{C}_n(t) - C_B\|_{H^1(\Omega)}^2 &\leq 2\beta_1^2 (\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2)^2 \|\bar{C}_n\|_{L^2(0,t;L^2(\Omega))}^2 \\
&\quad + 2\beta_1^2 (\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2)^2 C_s^2 |\Omega| t \\
&\quad + \mathbb{C}_2 \|\bar{C}_n(0) - C_B\|_{H^1(\Omega)}^2.
\end{aligned}$$

Además $(\bar{C}_n(0) - C^0, v_j)_{H^1(\Omega)} = 0$, por la Observación 2.9 y usando $\frac{1}{2}a^2 - b^2 \leq |a - b|^2$, se tiene que:

$$\begin{aligned}
\int_0^t \|\bar{C}_{n,t}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\mathbb{C}_1}{2} \|\bar{C}_n(t)\|_{H^1(\Omega)}^2 - \mathbb{C}_1 C_B^2 |\Omega| & \\
\leq 2\beta_1^2 (\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2)^2 \left(\frac{\mathbb{C}_5}{\mathbb{C}_4} (\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2)^2 |\Omega| T^2 + \frac{k_B}{2\mathbb{C}_4} C_B^2 |\Gamma_B| T + \frac{1}{2\mathbb{C}_4} \|C^0\|_{H^1(\Omega)}^2 \right) & \\
+ 2\beta_1^2 (\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2)^2 C_s^2 |\Omega| T + 2\mathbb{C}_2 \|C^0\|_{H^1(\Omega)}^2 + 2\mathbb{C}_2 C_B^2 |\Omega|, &
\end{aligned}$$

luego hemos obtenido:

$$\|\bar{C}_{n,t}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 + \mathbb{C}_1 \sup_{0 \leq t \leq T} \|\bar{C}_n(t)\|_{H^1(\Omega)}^2$$

$$\begin{aligned}
&\leq 2\beta_1^2 (\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2)^2 \frac{\mathbb{C}_5}{\mathbb{C}_4} \|\bar{a}_n\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 T + \\
&\quad + 2\beta_1^2 (\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2)^2 \left(\frac{k_B}{2\mathbb{C}_4} C_B^2 |\Gamma_B| T + \frac{1}{2\mathbb{C}_4} \|C^0\|_{H^1(\Omega)}^2 + C_s^2 |\Omega| T \right) \\
&\quad + 2\mathbb{C}_2 \|C^0\|_{H^1(\Omega)}^2 + (2\mathbb{C}_2 + \mathbb{C}_1) C_B^2 |\Omega|.
\end{aligned}$$

Finalmente, por los Lemas 6.38 y 6.37 y la Observación 2.27, tenemos que vale:

$$\begin{aligned}
&\|C_t\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 + \mathbb{C}_1 \sup_{0 \leq t \leq T} \|C(t)\|_{H^1(\Omega)}^2 \\
&\leq 2\beta_1^2 \frac{\mathbb{C}_5}{\mathbb{C}_4} (\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2)^4 |\Omega| T^2 + \\
&\quad + 2\beta_1^2 (\|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} + 2)^2 \left(\frac{k_B}{2\mathbb{C}_4} C_B^2 |\Gamma_B| T + \frac{1}{2\mathbb{C}_4} \|C^0\|_{H^1(\Omega)}^2 + C_s^2 |\Omega| T \right) \\
&\quad + 2\mathbb{C}_2 \|C^0\|_{H^1(\Omega)}^2 + (2\mathbb{C}_2 + \mathbb{C}_1) C_B^2 |\Omega|.
\end{aligned}$$

□

Observemos que el teorema anterior también podría ser un teorema de existencia de solución de nuestro problema donde tomamos $C^0 \in H^1(\Omega)$ y que para dicha demostración no se necesita el Lema 2.10.

Lema 3.4. *Supongamos que el dato inicial $C(0) \in H^2(\Omega)$ y cumple las condiciones de borde $D \frac{\partial}{\partial n} C = 0$ en Γ_N y $D \frac{\partial}{\partial n} C = k_B(C_B - C)$ en Γ_B . Si \bar{C}_n se define como en la Observación 2.6 con $\bar{C}_n(0) = R_n C(0)$, entonces*

$$\|\bar{C}'_n(0)\|_{L^2(\Omega)} \leq \mathbb{C}$$

donde \mathbb{C} es una constante que depende de $\|C(0)\|_{H^2(\Omega)}$, $\|a(0)\|_{L^\infty(\Omega)}$, T y los parámetros del problema.

Demostración. Por la Observación 2.6 tenemos que \bar{C}_n cumple la siguiente ecuación:

$$(\bar{C}_{n,t}, v) + D \int_{\Omega} \nabla \bar{C}_n \nabla v + k_B \int_{\Gamma_B} (\bar{C}_n - C_B) v = \beta_1 \int_{\Omega} \bar{a}_n (C_s - \bar{C}_n) v, \quad \forall v \in V_n. \quad (3.2)$$

Observemos que C_B es una constante y definamos $f_n := \beta_1 \bar{a}_n (C_s - \bar{C}_n)$. Escribamos la

ecuación anterior en términos de \mathcal{B} y evaluemos dicha ecuación en $t = 0$:

$$(\bar{C}_{n,t}(0), v) + \mathcal{B}[\bar{C}_n(0) - C_B, v] = (f_n(0), v), \quad \forall v \in V_n.$$

Como $C_n(0)$ es la proyección de Ritz de $C(0)$ en V_n tenemos que

$$(\bar{C}_{n,t}(0), v) = (f_n(0), v) - \mathcal{B}[C(0) - C_B, v], \quad \forall v \in V_n.$$

Luego, como $C(0) \in H^2(\Omega)$ tenemos que:

$$\mathcal{B}(C(0) - C_B, v) = D \int_{\Omega} \nabla(C(0) - C_B) \nabla v + k_B \int_{\Gamma_B} (C - C_B)v,$$

integrando por partes y usando que $C(0)$ cumple las condiciones de borde

$$\begin{aligned} &= D \int_{\Omega} \Delta C(0)v + \int_{\Gamma_B} \left(D \frac{\partial}{\partial n} C(0) + k_B(C - C_B) \right) v \\ &= D \int_{\Omega} \Delta C(0)v \leq D \|C(0)\|_{H^2(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Entonces

$$|\mathcal{B}(C(0) - C_B, v)| \leq D \|C(0)\|_{H^2(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)}. \quad (3.3)$$

Nos falta acotar $f_n(0)$ en norma L^2 . Recordando la Observación 2.9, tenemos que

$$\|f_n(0)\|_{L^2(\Omega)} \leq \beta_1 \|\bar{a}_n(0)\|_{L^\infty(\Omega)} \|C_s - \bar{C}_n(0)\|_{H^1(\Omega)} \leq \mathbb{C}.$$

□

Proposición 3.5. Si $C^0 \in H^2(\Omega)$, $D \frac{\partial}{\partial n} C^0 = 0$ en Γ_N , $D \frac{\partial}{\partial n} C^0 = k_B(C_B - C^0)$ en Γ_B , entonces $C_t \in L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^1(\Omega))$ y $C_{tt} \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$.

Demostración. Nuevamente por la Observación 2.6 tenemos que \bar{C}_n cumple la siguiente ecuación:

$$(\bar{C}_{n,t}, v) + \mathcal{B}[\bar{C}_n - C_B, v] = \beta_1 \int_{\Omega} \bar{a}_n (C_s - \bar{C}_n) v, \quad \forall v \in V_n. \quad (3.4)$$

Derivando la expresión anterior respecto de t y denotando con $\tilde{C}_n = \bar{C}_{n,t}$ y $\tilde{a}_n = \bar{a}_{n,t}$, vale

la siguiente ecuación:

$$(\tilde{C}_{n,t}, v) + \mathcal{B}[\tilde{C}_n, v] = \beta_1 \int_{\Omega} \tilde{a}_n(C_s - \bar{C}_n)v - \beta_1 \int_{\Omega} \bar{a}_n \tilde{C}_n v, \quad \forall v \in V_n. \quad (3.5)$$

En la ecuación anterior tomamos $v = v_k$, una función de la base nodal de V_n , y multiplicamos la ecuación por $\tilde{c}_k'(0)$ para $1 \leq k \leq N_V^n$. Sumando en k

$$(\tilde{C}_{n,t}, \tilde{C}_n) + \mathcal{B}[\tilde{C}_n, \tilde{C}_n] = \beta_1 \int_{\Omega} \tilde{a}_n(C_s - \bar{C}_n)\tilde{C}_n - \beta_1 \int_{\Omega} \bar{a}_n \tilde{C}_n^2.$$

Luego, usando la coercitividad de la forma bilineal \mathcal{B} y que $\bar{a}_n \geq 0$,

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\tilde{C}_n\|^2 + \mathbb{C}_4 \|\tilde{C}_n\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \beta_1 \int_{\Omega} \tilde{a}_n(C_s - \bar{C}_n)\tilde{C}_n.$$

Integrando la desigualdad anterior respecto del tiempo y utilizando la desigualdad de Hölder,

$$\frac{1}{2} \|\tilde{C}_n\|^2 + \mathbb{C}_4 \int_0^t \|\tilde{C}_n\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \beta_1 \int_0^t \left(\int_{\Omega} \tilde{a}_n^2(C_s - \bar{C}_n)^2 \right)^{1/2} \left(\int_{\Omega} \tilde{C}_n^2 \right)^{1/2} + \frac{1}{2} \|\tilde{C}_n(0)\|_{L^2}^2.$$

Usando la desigualdad de Cauchy con $\epsilon = \frac{\mathbb{C}_4}{2\beta_1}$ en el primer término de la derecha

$$\frac{1}{2} \|\tilde{C}_n\|^2 + \frac{\mathbb{C}_4}{2} \int_0^t \|\tilde{C}_n\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \frac{\beta_1^2}{2\mathbb{C}_4} \int_0^t \left(\int_{\Omega} \tilde{a}_n^2(C_s - \bar{C}_n)^2 \right) + \frac{1}{2} \|\tilde{C}_n(0)\|_{L^2}^2.$$

A partir de la definición de \bar{a}_n dada en la Observación 2.6 y teniendo en cuenta que $\tilde{a}_n = \bar{a}_{n,t}$, puede demostrarse fácilmente que

$$\int_0^t \int_{\Omega} \tilde{a}_n^2(C_s - C_n)^2 \leq \frac{\beta_2^2}{4} \|\sqrt{N}\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \|\bar{a}_n\|_{L^\infty(\Omega)} \|C_s - C_n\|_{L^4(\Omega)}.$$

Usando que $H^1(\Omega) \subset L^4(\Omega)$ y las cotas de la Proposición 2.7 y la Observación 2.9, obtenemos que

$$\|\tilde{C}_n\|^2 + \mathbb{C}_4 \int_0^t \|\tilde{C}_n\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \mathbb{C} + \|\tilde{C}_n(0)\|_{L^2}^2.$$

Y utilizando el Lema 3.4, obtenemos que

$$\|\tilde{C}_n\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}^2 + \mathbb{C}_4\|\tilde{C}_n\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))}^2 \leq \mathbb{C}.$$

Luego $\{\tilde{C}_n\}$ es una sucesión de funciones en $L^2(0,T;H^1(\Omega))$, que es un espacio reflexivo, por lo que $\{\tilde{C}_n\}$ tiene una subsucesión débilmente convergente. Teniendo en cuenta la Observación 2.27, los Lemas 6.37 y 6.38 podemos afirmar que $C_t \in L^\infty(0,T;L^2(\Omega)) \cap L^2(0,T;H^1(\Omega))$.

Para demostrar que $C_{tt} \in L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))$, observamos que

$$\langle C_{tt}, v \rangle + \mathcal{B}[C_t, v] = \beta_1 \int_{\Omega} a_t(C_s - C)v - \beta_1 \int_{\Omega} aC_tv, \quad \forall v \in H^1(\Omega).$$

Esto se demuestra siguiendo los pasos $\square 1$, $\square 2$ y $\square 3$ de la Sección 2.3, para (3.5), que siguen siendo válidos para las sucesiones intervinientes, y observando que en el análogo al paso $\square 4$ basta con tener convergencia débil de las nuevas sucesiones $\{\tilde{a}_n\}$ y $\{\tilde{C}_n\}$ y que se usa la convergencia $\bar{a}_n \rightarrow a$ en $L^2(0,T;L^2(\Omega))$, $\bar{C}_n \rightarrow C$ en $L^2(0,T;L^2(\Omega))$ y el hecho que $a, C \in L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))$. \square

Teorema 3.6. *Sea $C^0 \in H^2(\Omega)$, tal que $D\frac{\partial}{\partial n}C^0 = 0$ en Γ_N , $D\frac{\partial}{\partial n}C^0 = k_B(C_B - C^0)$ en Γ_B . Si además Ω es un subconjunto de \mathbb{R}^d con frontera $\Gamma \in C^{1,1}$ y tal que $\Gamma = \Gamma_B \cup \Gamma_N$ y $\text{dist}\{\Gamma_B, \Gamma_N\} > 0$, entonces $C \in L^\infty(0,T;H^2(\Omega))$.*

Demostración. Por el Teorema 3.3 sabemos que $C \in L^\infty(0,T;H^1(\Omega))$, $C_t \in L^2(0,T;L^2(\Omega))$ y que para casi todo $t \in [0,T]$, y toda $v \in H^1(\Omega)$ vale:

$$\begin{cases} \langle C_t, v \rangle + \mathcal{B}[C, v] + \beta_1 \int_{\Omega} aCv = \beta_1 \int_{\Omega} aC_s v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v, \\ C(x, 0) = C^0(x), \quad \forall x \in \Omega, \end{cases}$$

con $a \in L^2(0,T;L^2(\Omega))$. Es decir,

$$\begin{cases} \mathcal{B}[C, v] = \int_{\Omega} f v dx + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v, \quad \forall v \in H^1(\Omega) \text{ y c.t. } t \in [0,T], \\ C(x, 0) = C^0(x), \quad \forall x \in \Omega, \end{cases}$$

con $f = \beta_1 C_s a - C_t - \beta_1 a C$. Es decir, en casi todo $t \in [0,T]$, C es solución débil del

siguiente problema:

$$\begin{cases} -D\Delta C = f, \\ D\frac{\partial C}{\partial n} = \begin{cases} 0, & \Gamma_N, \\ -k_B(C - C_B), & \Gamma_B. \end{cases} \end{cases}$$

Por las características de Ω , existe $\theta \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ tal que $\theta|_{\Gamma_B} = 1$ y $\theta|_{\Gamma_N} = 0$. Definamos $g := -k_B(C - C_B)\theta$. Luego aplicando la Proposición 6.5 tenemos que $g(t) \in H^1(\Omega)$ para todo $t \in [0, T]$ porque $C(t) \in L^\infty(\Omega) \cap H^1(\Omega)$ para todo $t \in [0, T]$ y $\theta \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Además $\|g\|_{H^1(\Omega)} \leq \mathbb{C}_1\|C\|_{H^1(\Omega)} + \mathbb{C}_2$ donde $\mathbb{C}_1, \mathbb{C}_2$ dependen de θ, C_B y k_B . Por construcción, $g|_{\Gamma_B} = -k_B(C - C_B)$ y $g|_{\Gamma_N} = 0$, y luego C es solución débil de

$$\begin{cases} -D\Delta C + C = f + C, \\ D\frac{\partial C}{\partial n} = g. \end{cases}$$

Finalmente por el Teorema 6.7, tenemos que $C \in H^2(\Omega)$ y

$$\begin{aligned} \|C\|_{H^2(\Omega)} &\leq \mathbb{C} (\|f + C\|_{L^2(\Omega)} + \|g\|_{H^1(\Omega)}) \\ &\leq \mathbb{C} (\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|C\|_{L^2(\Omega)} + \mathbb{C}_1\|C\|_{H^1(\Omega)} + \mathbb{C}_2), \end{aligned}$$

donde \mathbb{C} depende de Ω y D . Por la Proposición 3.5 y el Teorema 3.3, tenemos que $\|C\|_{L^\infty(0, T; H^2(\Omega))}$ es finita. \square

Observar que en la expresión obtenida para $(\sqrt{a})_t$ interviene $\chi_{\{\sqrt{a}>0\}}$ lo que motiva la siguiente definición:

$$t^* = \inf\{t \in [0, T] : \sqrt{a(\cdot, t)} = 0 \text{ en un subconjunto de medida positiva de } \Omega\}. \quad (3.6)$$

Proposición 3.7. *Si $T < t^*$, $\sqrt{N} \in L^\infty(\Omega) \cap H^1(\Omega)$, entonces $(\sqrt{a})_t \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$.*

Demostración. En la Proposición 3.1 encontramos la siguiente expresión para $(\sqrt{a})_t$:

$$(\sqrt{a})_t = -\frac{\beta_2}{2}\sqrt{N}(C_s - C)\chi_{\{\sqrt{a}>0\}}.$$

Sea $t < T$ fijo, teniendo en cuenta que $C \in L^2(0, T; H^1(\Omega)) \cap L^\infty(\Omega)$ y que $\sqrt{N} \in L^\infty(\Omega) \cap H^1(\Omega)$, podemos aplicar la Proposición 6.5 obteniendo que $(\sqrt{a})_t \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ y la

siguiente expresión para $\frac{\partial}{\partial x_i}(\sqrt{a})_t$:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\sqrt{a})_t = -\frac{\beta_2}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \sqrt{N} (C_s - C) \chi_{\{\sqrt{a} > 0\}} - \frac{\beta_2}{2} \sqrt{N} \frac{\partial}{\partial x_i} C \chi_{\{\sqrt{a} > 0\}}.$$

□

Discretización y Análisis del error

En este capítulo proponemos un método para la resolución numérica y la simulación computacional del fenómeno de difusión-disolución que se estudia en esta tesis. El método numérico consiste en utilizar elementos finitos para la discretización espacial, tal como se hizo para la demostración de existencia de soluciones y en una discretización temporal por diferencias finitas. En la primera sección precisamos los detalles de la discretización y en las siguientes establecemos estimaciones a priori del error, primero de una semi-discretización espacial y luego de una discretización completa. Esta última establece el error que se comete entre la solución exacta y la obtenida computacionalmente.

4.1. Discretización

Consideramos una triangulación conforme y regular $\mathcal{T} = \mathcal{T}_h$ del dominio Ω , que puede tener elementos curvos en el borde de Ω , de manera que $\cup_{T \in \mathcal{T}_h} T = \bar{\Omega}$. Denotamos con $h := \max_{T \in \mathcal{T}_h} h_T$, con h_T el diámetro del elemento T de \mathcal{T}_h y consideraremos los mismos espacios utilizados en el Capítulo 2, es decir

$$\begin{aligned} V_h &= \{v \in H^1(\Omega) : v|_T \in \mathcal{P}_1, \forall T \in \mathcal{T}_h\}, \\ W_h &= \{w \in L^2(\Omega) : w|_T \in \mathcal{P}_0, \forall T \in \mathcal{T}_h\}. \end{aligned}$$

La solución que llamamos *semidiscreta espacial* es la solución (C_h, a_h) del siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias: Hallar $C_h : [0, T] \rightarrow V_h$ y $a_h : [0, T] \rightarrow W_h$

tales que

$$\begin{cases} \int_{\Omega} C_{h,t}v + \mathcal{B}(C_h, v) + \beta_1 \int_{\Omega} a_h C_h v = \beta_1 C_s \int_{\Omega} a_h v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v, \quad \forall v \in V_h, \\ \int_{\Omega} a_{h,t}w = -\beta_2 \int_{\Omega} \sqrt{N}(C_s - C_h)_+ \sqrt{a_{h+}} w, \quad \forall w \in W_h, \\ C_h(0) = C_h^0, \\ a_h(0) = a_h^0, \end{cases} \quad (4.1)$$

donde $\mathcal{B}(C, v) = D \int_{\Omega} \nabla C \cdot \nabla v + k_B \int_{\Gamma_B} C v$ y $C_h^0 \in V_h$, $a_h^0 \in W_h$ son aproximaciones de $C_0 = C(0)$, $a_0 = a(0)$, respectivamente¹. Notar que $a_h \geq 0$ y por lo tanto $(a_h)_+ = a_h$; en lo que sigue, introduciremos la variable r , que representa el *radio* de las microesferas, y al estudiar r_t es conveniente tener explícita la expresión $(a_h)_+$.

La existencia de (C_h, a_h) que satisface (4.1) puede demostrarse en forma análoga a lo hecho en el Capítulo 2 para el estudio de la existencia de las aproximaciones de Galerkin que cumplen (2.9). Observar que a diferencia del problema (2.9), en (4.1), el lado derecho de la ecuación para la derivada temporal del área de las microesferas no es Lipschitz por la presencia de la raíz cuadrada. Sin embargo, igualmente puede asegurarse la existencia y unicidad del par (C_h, a_h) , razonando como en la Sección 2.4.1, dado que el factor que multiplica dicha raíz cuadrada es menor o igual que cero. Además, en (2.9) C_h^0 y a_h^0 son las proyecciones L^2 de C_0 y a_0 en V_h y W_h respectivamente, a diferencia de (4.1), donde C_h^0 y a_h^0 no son proyecciones específicas de C_0 y a_0 .

En la Sección 4.2 estudiamos el error, en términos de h , entre (C, a) y (C_h, a_h) . Si bien este problema no puede resolverse exactamente, el estudio de la semidiscretización espacial siempre es útil para determinar las dificultades y prever cómo puede ser el error del problema completamente discreto, que sí puede implementarse y resolverse en la computadora.

El problema que efectivamente puede resolverse en la computadora, y que implementamos para obtener las simulaciones numéricas del Capítulo 5 se obtiene de la siguiente manera: Discretizamos la variable concentración de manera implícita para ganar estabilidad y definimos la variable r de manera que $a = 4\pi r^2$. Es decir, r denota el radio de

¹En este capítulo denotamos con C_0, a_0 los datos iniciales del problema (1.4), denotados con C^0, a^0 en los capítulos anteriores. El cambio se debe a que para la discretización completa, $C^n, a^n, n = 0, 1, 2, \dots$ denotarán las aproximaciones de $C(t_n), a(t_n)$, respectivamente.

las partículas cuya área por unidad de volumen es a . A partir de la ecuación para a_t obtenemos que

$$r_t = -\frac{\beta_2}{4\sqrt{\pi}}\sqrt{N}(C_s - C),$$

y observamos que el lado derecho es independiente de r . La discretización implícita de este término es entonces inmediata, y el sistema completamente discreto luce así: Dado un parámetro de discretización temporal Δt , hallar $C_n \in V_h$, $r_n \in W_h$, $n = 0, 1, \dots, \lceil T/\Delta t \rceil$ tales que

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} C^n v + \mathcal{B}(C^n, v) + 4\pi\beta_1 \int_{\Omega} (r^{n-1})^2 C^n v \\ \quad = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} C^{n-1} v + 4\pi\beta_1 C_s \int_{\Omega} (r^{n-1})^2 v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v, \quad \forall v \in V_h, \\ r^n = \text{máx}\{0, r^{n-1} - \Delta t \frac{\beta_2}{4\sqrt{\pi}} \sqrt{N}(C_s - \bar{C}^n)_+\}, \\ C^0 = C_h^0, \\ r^0 = r_h^0, \end{cases} \quad (4.2)$$

donde, como antes, $C_h^0 \in V_h$ es una aproximación de C_0 y $r_h^0 \in W_h$ una de $r^0 := \sqrt{\frac{a^0}{4\pi}}$, \sqrt{N} y \bar{C}_n son las proyecciones $L^2(\Omega)$ de \sqrt{N} , C_n en W_h , respectivamente.

Como ya dijimos, en la siguiente sección estudiamos el error en la semidiscretización espacial, i.e. el error entre (C, a) y (C_h, a_h) . En la sección 4.3 estudiaremos el error entre $(C(t_n), a(t_n))$ y (C^n, a^n) .

4.2. Estimación del error en la Semidiscretización espacial

En esta sección suponemos que $C_B \leq C \leq C_s$, $\sqrt{a} \in H^1(0, T; H^1(\Omega))$ $(\sqrt{a})_t \in L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))$ y $C \in H^1(0, T; H^1(\Omega))$.

Definimos $P_h : L^2(\Omega) \rightarrow W_h$ como la proyección L^2 en W_h . Es decir,

$$P_h u \in W_h : \quad (P_h u, w) = (u, w), \quad \forall w \in W_h,$$

que equivale a decir que $(P_h u, \chi_{T_i^h}) = (u, \chi_{T_i^h})$, para todo $T_i^h \in \mathcal{T}_h$. Una propiedad de P_h que utilizaremos es que dicha proyección conmuta con la derivación temporal, es decir,

$$(P_h u)_t = P_h(u_t).$$

Proposición 4.1. Si $u, u_t \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$, entonces $P_h(u_t) = (P_h u)_t$.

Demostración. Por la definición tenemos que $(P_h u_t, w) = (u_t, w)$, $\forall w = \chi_{T_i^h}$. Además, dada $\phi \in C_c^\infty(0, T)$, por definición de derivada temporal débil, tenemos que

$$\int_0^T (u_t, w) \phi = - \int_0^T (u, w) \frac{d}{dt} \phi, = - \int_0^T (P_h u, w) \frac{d}{dt} \phi.$$

Luego, $P_h(u_t) = (P_h u)_t$. □

El siguiente resultado es conocido y su demostración puede verse en [LT]:

Proposición 4.2. Si $u \in H^1(\Omega)$

$$\|P_h u - u\|_{L^2(\Omega)} \leq \mathbb{C}^* h \|u\|_{H^1(\Omega)},$$

donde \mathbb{C}^* es una constante que depende sólo de la dimensión del espacio.

La proyección L^2 sobre W_h , P_h se usará principalmente para \sqrt{a} , mientras que para C vamos a utilizar la proyección ortogonal sobre V_h con respecto al producto interno dado por la forma bilineal $\mathcal{B}(\cdot, \cdot)$ en $H^1(\Omega)$, $R_h : H^1 \rightarrow V_h$ y se define para $C \in H^1$ como:

$$R_h C \in V_h : \quad \mathcal{B}(R_h C - C, v) = 0, \quad \forall v \in V_h.$$

Es decir, $R_h C$ es la *proyección de Ritz* de C en V_h .

Análogamente a la Proposición 4.1 se tiene el siguiente resultado para la proyección de Ritz:

Proposición 4.3. Si $u \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ y $u_t \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$, entonces $R_h(u_t) = (R_h u)_t$.

La teoría estándar de interpolación y de estimación del error de elementos finitos para problemas estacionarios nos dice que [B, BS, Ci]:

Proposición 4.4. Si Ω tiene borde $C^{1,1}$ y $\text{dist}(\Gamma_B, \Gamma_N) > 0$, entonces

$$\|R_h v - v\|_{L^2(\Omega)} \leq \mathbb{C} h \|v\|_{H^1(\Omega)}, \quad \forall v \in H^1(\Omega), \quad (4.3)$$

$$\|R_h v - v\|_{H^1(\Omega)} \leq \tilde{\mathbb{C}} h \|v\|_{H^2(\Omega)}, \quad \forall v \in H^2(\Omega), \quad (4.4)$$

con $\mathbb{C}, \tilde{\mathbb{C}}$ dependientes de la regularidad de la malla.

Observación 4.5. Las hipótesis sobre Ω y la distancia entre las fronteras de distinto tipo garantizan que el problema elíptico tiene regularidad H^2 , es decir, para término fuente en $L^2(\Omega)$ la solución está en $H^2(\Omega)$. La demostración de (4.3) se conoce como *truco de Aubin-Nitsche*. La acotación (4.4) es consecuencia del Lema de Cèa y estimaciones estandar de interpolación.

Para encontrar la estimación del error en norma $L^2(\Omega)$ en todo tiempo $t \in [0, T]$ de nuestra solución semidiscreta para a , escribimos

$$a_h - a = (a_h - (P_h \sqrt{a})^2) + ((P_h \sqrt{a})^2 - a) := \theta_a + \rho_a,$$

y utilizamos la siguiente desigualdad²:

$$\|a_h - a\| \leq \|a_h - (P_h \sqrt{a})^2\| + \|(P_h \sqrt{a})^2 - a\| = \|\theta_a\| + \|\rho_a\|. \quad (4.5)$$

Por un lado, usando la Proposición 4.2,

$$\|\rho_a\| = \|(P_h \sqrt{a})^2 - a\| \leq \|\sqrt{a} + P_h \sqrt{a}\|_{L^\infty(\Omega)} \|\sqrt{a} - P_h \sqrt{a}\| \leq 2\sqrt{A^0} \mathbb{C}^* h \|\sqrt{a}\|_{H^1(\Omega)}, \quad (4.6)$$

para casi todo $t \in [0, T]$, si $A^0 = \|a_0\|_{L^\infty(\Omega)}$. Por otro lado, para acotar $\|\theta_a\| = \|a_h - (P_h \sqrt{a})^2\|$, observamos primero lo siguiente:

$$\int_{\Omega} a_{h,t} w = -\beta_2 \int_{\Omega} \sqrt{N} (C_s - C_h)_+ \sqrt{a_h} w, \quad \forall w \in W_h.$$

$$\int_{\Omega} a_t w = -\beta_2 \int_{\Omega} \sqrt{N} (C_s - C)_+ \sqrt{a} w, \quad \forall w \in L^2(\Omega).$$

Restando ambas ecuaciones, para $w \in W_h$ vemos que

$$\int_{\Omega} (a_h - a)_t w = \beta_2 \left\{ \int_{\Omega} \sqrt{N} (C_s - C)_+ (\sqrt{a} - \sqrt{a_h}) w + \int_{\Omega} ((C_s - C)_+ - (C_s - C_h)_+) \sqrt{N} \sqrt{a_h} w \right\}.$$

²A partir de ahora $\|\cdot\|$ denotará $\|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$. Todas las otras normas serán claramente explicitadas.

Sumando y restando términos apropiados:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (a_h - a)_t w &= \beta_2 \left\{ \int_{\Omega} \sqrt{N} (C_s - C)_+ (\sqrt{a} - P_h \sqrt{a}) w + \int_{\Omega} \sqrt{N} (C_s - C)_+ (P_h \sqrt{a} - \sqrt{a_h}) w \right. \\ &\quad \left. + \int_{\Omega} ((C_s - C)_+ - (C_s - C_h)_+) \sqrt{N} \sqrt{a_h} w \right\}. \end{aligned}$$

Tomando $w = (P_h \sqrt{a})^2 - a_h$, de manera que $(P_h \sqrt{a} - \sqrt{a_h}) w \geq 0$, tenemos:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (a_h - a)_t ((P_h \sqrt{a})^2 - a_h) &\leq \beta_2 \left\{ \int_{\Omega} \sqrt{N} (C_s - C)_+ (\sqrt{a} - P_h \sqrt{a}) ((P_h \sqrt{a})^2 - a_h) \right. \\ &\quad \left. + \int_{\Omega} ((C_s - C)_+ - (C_s - C_h)_+) \sqrt{N} \sqrt{a_h} ((P_h \sqrt{a})^2 - a_h) \right\}. \end{aligned}$$

Además

$$\int_{\Omega} ((P_h \sqrt{a})^2 - a_h)_t ((P_h \sqrt{a})^2 - a_h) = \int_{\Omega} (a - a_h)_t ((P_h \sqrt{a})^2 - a_h) - \int_{\Omega} (a - (P_h \sqrt{a})^2)_t ((P_h \sqrt{a})^2 - a_h),$$

y como $C \geq C_B \geq 0$ en casi todo punto, obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|(P_h \sqrt{a})^2 - a_h\|^2 &\leq \frac{\beta_2^2}{2} C_s^2 \|N\|_{L^\infty(\Omega)} \|\sqrt{a} - P_h \sqrt{a}\|^2 \\ &\quad + \left(\frac{1}{2} + \frac{\beta_2^2 \|a_h\|_{L^\infty} \|N\|_{L^\infty}}{2\epsilon_1} \right) \|(P_h \sqrt{a})^2 - a_h\|^2 \\ &\quad + \epsilon_1 \|C_h - R_h C\|^2 + \epsilon_1 \|R_h C - C\|^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \|(a - (P_h \sqrt{a})^2)_t\|^2 + \frac{1}{2} \|(P_h \sqrt{a})^2 - a_h\|^2. \end{aligned}$$

Como $\theta_a = a_h - (P_h \sqrt{a})^2$, y $\rho_a = (P_h \sqrt{a})^2 - a$, la desigualdad anterior puede reescribirse de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\theta_a\|^2 &\leq \frac{\beta_2^2}{2} C_s^2 \|N\|_{L^\infty} \|\sqrt{a} - P_h \sqrt{a}\|^2 + \left(\frac{1}{2} + \frac{\beta_2^2 \|a_h\|_{L^\infty} \|N\|_{L^\infty}}{2\epsilon_1} \right) \|\theta_a\|^2 \\ &\quad + \epsilon_1 \|\theta_C\|^2 + \epsilon_1 \|\rho_C\|^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \|\rho_{a,t}\|^2 + \frac{1}{2} \|\theta_a\|^2, \end{aligned}$$

donde hemos denotado $\theta_C = (C_h - R_h C)$ y $\rho_C = (R_h C - C)$.

Luego usando las Proposiciones 4.2 y 4.4 y el Lema 4.10,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\theta_a\|^2 &\leq \frac{\beta_2^2}{2} C_s^2 \|N\|_{L^\infty} \mathbb{C}^{*2} h^2 \|\sqrt{a}\|_{H^1}^2 \\
&\quad + \left(1 + \frac{\beta_2^2 \|a_h\|_{L^\infty(\Omega)} \|N\|_{L^\infty}}{2\epsilon_1} \right) \|\theta_a\|^2 \\
&\quad + \epsilon_1 \|\theta_C\|^2 + \epsilon_1 \mathbb{C}^2 h^2 \|C\|_{H^1}^2 \\
&\quad + 2\mathbb{C}^{*2} (\|\sqrt{a}\|_\infty^2 h^2 \|\nabla(\sqrt{a})_t\|^2 + \|P_h(\sqrt{a})_t\|_\infty^2 h^2 \|\nabla\sqrt{a}\|^2).
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Análogamente a lo hecho para a , para la estimación del error de nuestra solución discreta C_h en norma L^2 escribimos $C_h - C$ como:

$$C_h - C = (C_h - R_h C) + (R_h C - C) := \theta_C + \rho_C.$$

Luego,

$$\|C_h - C\| \leq \|C_h - R_h C\| + \|R_h C - C\| = \|\theta_C\| + \|\rho_C\|, \tag{4.8}$$

y por la Proposición 4.4,

$$\|\rho_C\| \leq \mathbb{C}h \|C\|_{H^1(\Omega)} \tag{4.9}$$

para casi todo t .

Para acotar $\|\theta_C\| = \|C_h - R_h C\|$ escribimos la ecuación para C_h en términos de \mathcal{B} :

$$\int_{\Omega} C_{h,t} v + \mathcal{B}[C_h, v] = \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C_h) a_h v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v, \quad \forall v \in V_h.$$

Por ser $R_h C$ la proyección de Ritz de C en V_h , se tiene:

$$\int_{\Omega} C_t v + \mathcal{B}[R_h C, v] = \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C) a v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v, \quad \forall v \in V_h.$$

Luego, para toda $v \in V_h$,

$$\int_{\Omega} (C_h - C)_t v + \mathcal{B}[C_h - R_h C, v] = \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C_h) a_h v - \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C) a v.$$

Como $C_t \in H^1(\Omega)$ para casi todo t , luego sumando y restando $\beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C) a_h v$ y

$\int_{\Omega}(R_h C)_t v$, obtenemos:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega}(C_h - R_h C)_t v + \mathcal{B}[C_h - R_h C, v] &= \beta_1 \int_{\Omega}((C_s - C_h) - (C_s - C))a_h v \\ &+ \beta_1 \int_{\Omega}(C_s - C)(a_h - a)v + \int_{\Omega}(C - R_h C)_t v. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Tomamos $v = C_h - R_h C = \theta_C$, y resulta

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\theta_C\|^2 + \mathcal{B}[\theta_C, \theta_C] &= \beta_1 \int_{\Omega}(C - C_h)a_h(C_h - R_h C) \\ &+ \beta_1 \int_{\Omega}(C_s - C)(a_h - a)\theta_C + \int_{\Omega}(C - R_h C)_t \theta_C. \end{aligned}$$

Sumando y restando $\beta_1 \int_{\Omega}(C - C_h)a_h C$ y observando que $\beta_1 \int_{\Omega}(C - C_h)a_h(C_h - C) \leq 0$,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\theta_C\|^2 + \mathcal{B}[\theta_C, \theta_C] &\leq \beta_1 \int_{\Omega}(C - C_h)a_h(C - R_h C) \\ &+ \beta_1 \int_{\Omega}(C_s - C)(a_h - a)\theta_C + \int_{\Omega}(C - R_h C)_t \theta_C \\ &= \beta_1 \int_{\Omega} \rho_C a_h \rho_C + \int_{\Omega} \theta_C a_h \rho_C \\ &+ \beta_1 \int_{\Omega}(C_s - C)(a_h - a)\theta_C - \int_{\Omega} \rho_{C,t} \theta_C. \end{aligned}$$

Usando la desigualdad de Cauchy con ϵ y nuevamente que $C \geq C_B \geq 0$, resulta

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\theta_C\|^2 + \mathbb{C}(\epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4) \mathcal{B}[\theta_C, \theta_C] &\leq \beta_1 \|a_h\|_{L^\infty} \|\rho_C\|^2 + \frac{\beta_1^2}{2\epsilon_2} \|a_h^2\|_{L^\infty} \|\rho_C\|^2 \\ &+ \frac{\beta_1^2 C_s^2}{\epsilon_3} (\|\theta_a\|^2 + \|\rho_a\|^2) + \frac{1}{2\epsilon_4} \|\rho_{C,t}\|^2. \end{aligned}$$

Como $C_t \in H^1(\Omega)$, la Proposición 4.4 y (4.6) implican

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\theta_C\|^2 + \mathbb{C}(\epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4) \mathcal{B}[\theta_C, \theta_C] &\leq \mathbb{C}^2 \beta_1 h^2 \|a_h\|_{L^\infty} \left(1 + \frac{\beta_1}{2\epsilon_2}\right) \|C\|_{H^1}^2 + \frac{\beta_1^2 C_s^2}{\epsilon_3} \|\theta_a\|^2 \\ &+ \frac{\beta_1^2 C_s^2}{\epsilon_3} 4A^0 \mathbb{C}^{*2} h^2 \|\sqrt{a}\|_{H^1}^2 + \frac{1}{2\epsilon_4} \mathbb{C}^2 h^2 \|C_t\|_{H^1}^2. \end{aligned}$$

Sumando la expresión obtenida para la derivada temporal de $\|\theta_a\|^2$ en (4.7) obtenemos:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\theta_a\|^2 + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\theta_C\|^2 + \mathbb{C}(\epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4) \mathcal{B}[\theta_C, \theta_C] \\
& \leq \frac{C_s^2 \mathbb{C}^{*2}}{2} \left(\beta_2^2 + \frac{2\beta_1^2}{\epsilon_3} A^0 \right) \|\sqrt{a}\|_{H^1}^2 h^2 \\
& \quad + \left(1 + \frac{\beta_2^2 \|a_h\|_{L^\infty} \|N\|_{L^\infty}}{2\epsilon_1} + \frac{\beta_1^2 C_s^2}{\epsilon_3} \right) \|\theta_a\|^2 \\
& \quad + \mathbb{C}^2 \left(\epsilon_1 + \beta_1 \|a_h\|_{L^\infty} + \frac{\beta_1^2}{2\epsilon_2} \|a_h^2\|_{L^\infty} \right) \|C\|_{H^1}^2 h^2 \\
& \quad + 2\mathbb{C}^{*2} (\|\sqrt{a}\|_\infty^2 \|\nabla(\sqrt{a})_t\|^2 + \|P_h \sqrt{a}_t\|_\infty^2 \|\nabla \sqrt{a}\|^2) h^2 \\
& \quad + \epsilon_1 \|\theta_C\|^2 + \frac{1}{2\epsilon_4} \mathbb{C}^2 \|C_t\|_{H^1}^2 h^2.
\end{aligned}$$

Luego, eligiendo $\epsilon_i = \frac{1}{5} \min \left\{ \frac{\min\{\frac{D}{2}, k_B\}}{\mathbb{C}_F^2}, \frac{D}{2}, k_B \right\}$ para $i = 1, 2, 3, 4$, es decir $\epsilon_i = \frac{1}{5} \mathbb{C}_1$, tenemos que:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt} \|\theta_a\|^2 + \frac{d}{dt} \|\theta_C\|^2 \leq C_s^2 \mathbb{C}^{*2} \left(\beta_2^2 + \frac{10\beta_1^2}{\mathbb{C}_1} A^0 \right) \|\sqrt{a}\|_{H^1}^2 h^2 \\
& \quad + 2 \left(1 + \frac{5\beta_2^2 \|a_h\|_{L^\infty} \|N\|_{L^\infty}}{2\mathbb{C}_1} + \frac{2\beta_1^2 C_s^2}{\mathbb{C}_1} \right) \|\theta_a\|^2 \\
& \quad + 2\mathbb{C}^2 \left(\frac{1}{5} \mathbb{C}_1 + \beta_1 \|a_h\|_{L^\infty} + \frac{5\beta_1^2}{2\mathbb{C}_1} \|a_h^2\|_{L^\infty} \right) \|C\|_{H^1}^2 h^2 \\
& \quad + 4\mathbb{C}^{*2} (\|\sqrt{a}\|_\infty^2 \|\nabla(\sqrt{a})_t\|^2 + \|P_h \sqrt{a}_t\|_\infty^2 \|\nabla \sqrt{a}\|^2) h^2 \\
& \quad + \frac{5}{\mathbb{C}_1} \mathbb{C}^2 \|C_t\|_{H^1}^2 h^2.
\end{aligned}$$

Aplicando la desigualdad de Gronwall en forma diferencial (6.6),

$$\begin{aligned}
\|\theta_a\|^2 + \|\theta_C\|^2 & \leq e^{\left(1 + \frac{5\beta_2^2 \|a_h\|_{L^\infty} \|N\|_{L^\infty}}{2\mathbb{C}_1} + \frac{5\beta_1^2 C_s^2}{\mathbb{C}_1}\right) 2t} \times \left\{ \left[\|\theta_a(0)\|^2 + \|\theta_C(0)\|^2 \right] \right. \\
& \quad + h^2 \times \left[\mathbb{C}^{*2} \int_0^t \left(\beta_2^2 + \frac{10\beta_1^2}{\mathbb{C}_1} \|P_h \sqrt{a} + \sqrt{a}\|_{L^\infty}^2 \right) C_s^2 \|\sqrt{a}\|_{H^1}^2 \right. \\
& \quad \quad + \int_0^t \left(\frac{2}{5} \mathbb{C}_1 + 2\beta_1 \|a_h\|_{L^\infty} + \frac{5\beta_1^2}{\mathbb{C}_1} \|a_h^2\|_{L^\infty} \right) \mathbb{C}^2 \|C\|_{H^1}^2 \\
& \quad \quad \left. \left. + \mathbb{C}^{*2} \int_0^t 4(\|\sqrt{a}\|_\infty^2 \|\nabla(\sqrt{a})_t\|^2 + \|P_h \sqrt{a}_t\|_\infty^2 \|\nabla \sqrt{a}\|^2) \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\left. + \int_0^t \frac{5}{\mathbb{C}_1} \mathbb{C}^2 \|C_t\|_{H^1}^2 \right\}.$$

Luego usando (4.6) y (4.9) hemos probado el siguiente teorema, que es uno de los resultados principales de la sección:

Teorema 4.6. *Si $C_B \leq C_0 \leq C_s$, $\sqrt{a} \in H^1(0, T; H^1(\Omega))$, $(\sqrt{a})_t \in L^2(0, T; L^\infty(\Omega))$, $C \in H^1(0, T; H^1(\Omega))$, entonces existe una constante \mathbb{C}_T , que depende de \mathbb{C} , \mathbb{C}^* , A^0 , β_1 , β_2 , C_s , $\|N\|_{L^\infty(\Omega)}$, $\|\sqrt{a}\|_{H^1(0, T; H^1(\Omega))}$, $\|(\sqrt{a})_t\|_{L^2(0, T; L^\infty(\Omega))}$, $\|C\|_{H^1(0, T; H^1(\Omega))}$, y del tiempo final T pero es independiente del parámetro de discretización h tal que*

$$\|C_h(t) - C(t)\| + \|a_h(t) - a(t)\| \leq \mathbb{C}_T [\|a_h(0) - a(0)\| + \|C_h(0) - C(0)\|] + \mathbb{C}_T h,$$

para todo $t \in [0, T]$.

Utilizando los resultados del Capítulo 3 que implican las regularidades necesarias en el teorema anterior, concluimos el siguiente corolario.

Corolario 4.7. *Supongamos que Ω tiene frontera de clase $C^{1,1}$ y $\text{dist}\{\Gamma_B, \Gamma_N\} \neq 0$. Si $a_0, \sqrt{a_0} \in H^1(\Omega) \cap L^\infty(\Omega)$, $C_B \leq C_0 \leq C_s$ y $C_0 \in H^2(\Omega)$ tal que $D_{\frac{\partial}{\partial n}} C_0 = 0$ en Γ_N y $D_{\frac{\partial}{\partial n}} C_0 = k_B(C_B - C_0)$ en Γ_B y $T < t^*$, con t^* definido en (3.6). Entonces existe una constante \mathbb{C}_T , que depende del tiempo final T , de $\|a_0\|_{H^1(\Omega)}$, $\|\sqrt{a_0}\|_{H^1(\Omega)}$, $\|a_0\|_{L^\infty(\Omega)}$, $\|C_0\|_{H^2(\Omega)}$, de $\text{dist}\{\Gamma_B, \Gamma_N\}$ y de los parámetros β_1 , β_2 , C_s , $\|N\|_{L^\infty(\Omega)}$ del problema (1.4) tal que*

$$\begin{aligned} \|C_h - C\|_{L^\infty(0, T; L^2(\Omega))} + \|a_h - a\|_{L^\infty(0, T; L^2(\Omega))} \\ \leq \mathbb{C}_T h + \mathbb{C}_T (\|a_h(0) - a(0)\| + \|C_h(0) - C(0)\|). \end{aligned}$$

A continuación establecemos una cota para $\|C_h - C\|_{L^\infty(0, T; H^1(\Omega))}$.

Teorema 4.8. *Si $C_B \leq C_0 \leq C_s$, $\sqrt{a} \in H^1(0, T; H^1(\Omega))$, $(\sqrt{a})_t \in L^2(0, T; L^\infty(\Omega))$, $C \in H^1(0, T; H^1(\Omega))$, entonces existe una constante \mathbb{C}_T , que depende de \mathbb{C} , \mathbb{C}^* , A^0 , β_1 , β_2 , C_s , $\|N\|_{L^\infty(\Omega)}$, $\|\sqrt{a}\|_{H^1(0, T; H^1(\Omega))}$, $\|(\sqrt{a})_t\|_{L^2(0, T; L^\infty(\Omega))}$, $\|C\|_{H^1(0, T; H^1(\Omega))}$, y del tiempo*

final T pero independiente del parámetro de discretización h tal que

$$\|C_h(t) - R_h C(t)\|_{H^1(\Omega)} \leq \mathbb{C}_T [\|C_h(0) - R_h C(0)\|_{H^1(\Omega)} + \|C_h(0) - C(0)\| + \|a_h(0) - a(0)\|] + \mathbb{C}_T h.$$

Demostración. Recordemos que $\theta_C = C_h - R_h C$. Luego en la ecuación (4.10)

$$\begin{aligned} \mathcal{B}[\theta_C, v] &= \beta_1 \int_{\Omega} ((C_s - C_h) - (C_s - C)) a_h v + \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C)(a_h - a)v \\ &\quad + \int_{\Omega} (C - R_h C)_t v - \int_{\Omega} \theta_{C,t} v. \end{aligned}$$

Allí tomamos $v = (C_h - R_h C)_t = \theta_{C,t}$, y obtenemos

$$\begin{aligned} \|\theta_{C,t}\|^2 + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \mathcal{B}[\theta_C, \theta_C] &= \beta_1 \int_{\Omega} (C - C_h) a_h \theta_{C,t} + \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C)(a_h - a) \theta_{C,t} \\ &\quad + \int_{\Omega} (C - R_h C)_t \theta_{C,t}. \end{aligned}$$

Tomando $\epsilon = 1$ en la desigualdad de Cauchy con ϵ (6.2),

$$\begin{aligned} \|\theta_{C,t}\|^2 + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \mathcal{B}[\theta_C, \theta_C] &\leq \beta_1^2 \|(C - C_h) a_h\|^2 + \frac{1}{4} \|\theta_{C,t}\|^2 \\ &\quad + \beta_1^2 \|(C_s - C)(a_h - a)\|^2 + \frac{1}{4} \|\theta_{C,t}\|^2 \\ &\quad + \|(C - R_h C)_t\|^2 + \frac{1}{4} \|\theta_{C,t}\|^2. \end{aligned}$$

Luego, usando que $C \geq C_B \geq 0$,

$$\frac{1}{4} \|\theta_{C,t}\|^2 + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \mathcal{B}[\theta_C, \theta_C] \leq \beta_1^2 \|a_h^2\|_{L^\infty} \|C - C_h\|^2 + \beta_1^2 C_s^2 \|a_h - a\|^2 + \|(C - R_h C)_t\|^2.$$

Integrando ambos miembros respecto de t ,

$$\begin{aligned} \mathcal{B}[\theta_C(t), \theta_C(t)] &\leq \mathcal{B}[\theta_C(0), \theta_C(0)] + 2\beta_1^2 \|a_h^2\|_{L^\infty} \int_0^t \|C - C_h\|^2 \\ &\quad + 2\beta_1^2 C_s^2 \int_0^t \|a_h - a\|^2 + 2 \int_0^t \mathbb{C}^2 h^2 \|C_t\|_{H^1}^2. \end{aligned}$$

y recordando la equivalencia demostrada en el Lema 2.2 entre la norma generada por \mathcal{B}

y la norma H^1 ,

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_1 \|\theta_C(t)\|_{H^1(\Omega)}^2 &\leq \mathbb{C}_2 \|\theta_C(0)\|_{H^1(\Omega)}^2 + 2\beta_1^2 \|a_h^2\|_{L^\infty} \int_0^t \|C - C_h\|^2 \\ &\quad + 2\beta_1^2 C_s^2 \int_0^t \|a_h - a\|^2 + 2 \int_0^t \mathbb{C}^2 h^2 \|C_t\|_{H^1}^2. \end{aligned}$$

Aplicando el resultado del Teorema 4.6, se concluye la acotación buscada. \square

Corolario 4.9. *Supongamos que Ω tiene frontera de clase $C^{1,1}$ y $\text{dist}\{\Gamma_B, \Gamma_N\} \neq 0$. Si $a_0, \sqrt{a_0} \in H^1(\Omega) \cap L^\infty(\Omega)$, $C_B \leq C_0 \leq C_s$ y $C_0 \in H^2(\Omega)$ tal que $D \frac{\partial}{\partial n} C_0 = 0$ en Γ_N y $D \frac{\partial}{\partial n} C_0 = k_B(C_B - C_0)$ en Γ_B y $T < t^*$. Entonces existe una constante \mathbb{C}_T , que depende del tiempo final T , de $\|a_0\|_{H^1(\Omega)}$, $\|\sqrt{a_0}\|_{H^1(\Omega)}$, $\|a_0\|_{L^\infty(\Omega)}$, $\|C_0\|_{H^2(\Omega)}$, de $\text{dist}\{\Gamma_B, \Gamma_N\}$ y de los parámetros $\beta_1, \beta_2, C_s, \|N\|_{L^\infty(\Omega)}$ del problema (1.4) tal que*

$$\|C_h - C\|_{L^\infty(0,T;H^1(\Omega))} \leq \mathbb{C}_T (\|C_h(0) - C(0)\|_{H^1(\Omega)} + \|a_h(0) - a(0)\| + h).$$

Finalizamos esta sección estableciendo una acotación para $\|((P_h \sqrt{a})^2)_t - a_t\|_{L^2(\Omega)}$ que fue usada en (4.7).

Lema 4.10. *Si $\sqrt{a} \in H^1(0, T; H^1(\Omega))$, $(\sqrt{a})_t \in L^\infty(0, T; L^\infty(\Omega))$, luego*

$$\|((P_h \sqrt{a})^2)_t - a_t\|_{L^2(\Omega)} \leq 2\|\sqrt{a}\|_\infty \mathbb{C}^* h \|\nabla(\sqrt{a})_t\| + 2\|(P_h \sqrt{a})_t\|_\infty \mathbb{C}^* h \|\nabla \sqrt{a}\|$$

Demostración. Para estimar $\|((P_h \sqrt{a})^2 - a)_t\|^2$, utilizamos las Proposiciones 3.1 y 6.5 y calculamos las derivadas temporales involucradas:

$$\begin{aligned} ((P_h \sqrt{a})^2)_t &= 2(P_h \sqrt{a})(P_h \sqrt{a})_t, \\ a_t &= (\sqrt{a}^2)_t = 2\sqrt{a}(\sqrt{a})_t. \end{aligned}$$

Restando ambas expresiones:

$$\begin{aligned} ((P_h \sqrt{a})^2)_t - a_t &= 2(P_h \sqrt{a})(P_h \sqrt{a})_t - 2\sqrt{a}(\sqrt{a})_t \\ &= 2(P_h \sqrt{a})(P_h \sqrt{a})_t - 2\sqrt{a}(P_h \sqrt{a})_t + 2\sqrt{a}(P_h \sqrt{a})_t - 2\sqrt{a}(\sqrt{a})_t \\ &= 2(P_h \sqrt{a})_t(P_h \sqrt{a} - \sqrt{a}) + 2\sqrt{a}((P_h \sqrt{a})_t - (\sqrt{a})_t). \end{aligned}$$

Usando la Proposición 4.1 y $\sqrt{a}_t = \frac{\beta_2}{2}(C - C_s)\chi_{\{(\sqrt{a_0} + \frac{\beta_2}{2} \int_0^t (C - C_s)_+\}^2)}$, entonces $\|(P_h \sqrt{a})_t\|_{L^\infty} \leq \frac{\beta_2}{2} C_s$ y finalmente

$$\begin{aligned} \|((P_h \sqrt{a})^2)_t - a_t\| &\leq 2\|(P_h \sqrt{a})_t(P_h \sqrt{a} - \sqrt{a})\| + 2\|\sqrt{a}((P_h \sqrt{a})_t - (\sqrt{a})_t)\| \\ &\leq 2\|(P_h \sqrt{a})_t\|_\infty \|P_h \sqrt{a} - \sqrt{a}\| + 2\|\sqrt{a}\|_\infty \|(P_h \sqrt{a})_t - (\sqrt{a})_t\| \\ &\leq 2\|(P_h \sqrt{a})_t\|_\infty \mathbb{C}^* h \|\nabla \sqrt{a}\| + 2\|\sqrt{a}\|_\infty \mathbb{C}^* h \|\nabla (\sqrt{a})_t\|, \end{aligned}$$

que es lo que se quería demostrar. \square

4.3. Discretización total

En esta sección establecemos cotas para el error cometido por la discretización completa del problema. La solución de esta discretización es la que efectivamente calculamos en la computadora, por lo que estas estimaciones nos darán una cota para el error real entre la aproximación calculada y la solución exacta.

Existencia

El problema completamente discreto (4.2) se puede escribir, de manera equivalente, como sigue: Sea Δt el paso de tiempo y sean $C^n \in V_h$ y $a^n \in W_h$ las aproximaciones de $C(t_n)$ y $a(t_n)$ en $t_n = n\Delta t$, respectivamente, que se obtienen al resolver la siguiente sucesión de sistemas:

$$\begin{cases} (\bar{\partial}_t C^n, v) + \mathcal{B}(C^n, v) = \beta_1((C_s - C^n)a^{n-1}, v) + k_B(C_B, v)_{\Gamma_B}, \forall v \in V_h, n \geq 1, \\ \sqrt{a^n} = \left(\sqrt{a^{n-1}} - \frac{\beta_2}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sqrt{N}(C_s - \bar{C}^n)_+ \right)_+, n \geq 1, \\ C^0 = C_h^0, \\ a^0 = a_h^0, \end{cases}$$

con $\bar{\partial}_t C^n = \frac{C^n - C^{n-1}}{\Delta t}$, $C^n = \sum_{k=1}^{N_V^h} c_k^n v_k(x)$ y $a^n = \sum_{i=1}^{N_W^h} \alpha_i^n w_i(x)$, donde $\{v_k\}_{k=1}^{N_V^h}$ y $\{w_i\}_{i=1}^{N_W^h}$ son base de los espacios V_h y W_h respectivamente y $c_k^n, \alpha_i^n \in \mathbb{R}$ y \bar{C}^n es la proyección $L^2(\Omega)$ de C^n en W_h . Las condiciones iniciales discretas $C_h^0 \in V_h$ y $a_h^0 \in W_h$ deben elegirse

de manera que

$$\|C^0 - C_0\|_{H^1(\Omega)} + \|a^0 - a_0\|_{L^2(\Omega)} \leq \mathbb{C}h, \quad \text{y} \quad \|a_h^0\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \|a_0\|_{L^\infty(\Omega)} =: A^0.$$

con una constante \mathbb{C} independiente de la malla, que dependerá en general de la regularidad de los datos iniciales $a_0 \in H^1(\Omega)$, $C_0 \in H^2(\Omega)$. Esto se logra, tomando, por ejemplo, C^0 la interpolada de Lagrange de C_0 y a^0 la proyección $L^2(\Omega)$ de a_0 en W_h .

El sistema a resolver en cada paso de tiempo puede escribirse equivalentemente de la siguiente manera:

$$\begin{cases} (C^n, v) + \Delta t \mathcal{B}(C^n, v) + \Delta t \beta_1 (C^n a^{n-1}, v) \\ \quad = \Delta t \beta_1 C_s (a^{n-1}, v) + \Delta t k_B (C_B, v)_{\Gamma_B} + (C^{n-1}, v), \quad \forall v \in V_h, \\ \sqrt{a^n} = \left(\sqrt{a^{n-1}} - \frac{\beta_2}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sqrt{N} (C_s - \bar{C}^n)_+ \right)_+. \end{cases} \quad (4.11)$$

Para el estudio de la existencia de C^n y a^n que cumplen (4.11), observamos primero que en la ecuación de C^n utilizamos el valor de a^n en un paso anterior, luego, el sistema se desacopló.

Definimos $\mathbf{C}^n := (c_k^n)_{k=1}^{N_V^h}$, $M_{i,j} := \int_{\Omega} v_j v_i$, $B_{i,j} := \mathcal{B}(v_j, v_i)$, $M_{i,j}^{a^{n-1}} := \int_{\Omega} v_j a^{n-1} v_i$, $b_i^n := \int_{\Gamma_B} v_i$ y $A_i^{a^{n-1}} := \int_{\Omega} a^{n-1} v_i$. Luego el sistema anterior puede ser escrito en forma matricial como

$$\begin{cases} M \mathbf{C}^n + \Delta t B \mathbf{C}^n + \Delta t \beta_1 M^{a^{n-1}} \mathbf{C}^n = \Delta t \beta_1 C_s A^{a^{n-1}} + \Delta t k_B C_B b_n + M \mathbf{C}^{n-1}, \\ \sqrt{a^n} = \left(\sqrt{a^{n-1}} - \frac{\beta_2}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sqrt{N} (C_s - \bar{C}^n)_+ \right)_+. \end{cases}$$

Es decir, \mathbf{C}^n es solución de

$$(M + \Delta t B + \Delta t \beta_1 M^{a^{n-1}}) \mathbf{C}^n = \Delta t \beta_1 C_s A^{a^{n-1}} + \Delta t k_B C_B b_n + M \mathbf{C}^{n-1},$$

y podemos asegurar que existe tal \mathbf{C}^n pues $M + \Delta t B + \Delta t \beta_1 M^{a^{n-1}}$ es simétrica definida positiva, y por lo tanto invertible.

Veamos la existencia de a^n . Observemos que como C^n no depende del tiempo, la ecuación para a^n puede escribirse también como: $\sqrt{a^n} = \left(\sqrt{a^{n-1}} - \Delta t \frac{\beta_2}{2} \sqrt{N} (C_s - \bar{C}^n)_+ \right)_+$. Luego $\sqrt{\alpha_i^n} = \max \left\{ 0, \sqrt{\alpha_i^{n-1}} - \Delta t \frac{\beta_2}{2} \sqrt{N} (C_s - \bar{C}^n)_+ \right\}$, $i = 1, \dots, N_W^h$.

Estabilidad

En primer lugar analizaremos la estabilidad del método, un ingrediente fundamental a la hora de acotar el error de métodos con discretización temporal.

Para ver la estabilidad de a^n , sólo observamos que $a^n \leq a^{n-1}$, luego $\|a^n\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \|a^0\|_{L^\infty(\Omega)} \leq A^0|\Omega|^{1/2}$, donde $A^0 = \|a_0\|_{L^\infty(\Omega)}$.

Para ver la estabilidad de C^n , en (4.11), tomamos $v = C^n$ y tenemos que:

$$\begin{aligned} (C^n, C^n) + \Delta t \mathcal{B}(C^n, C^n) + \Delta t \beta_1 (C^n a^{n-1}, C^n) \\ = \Delta t \beta_1 C_s (a^{n-1}, C^n) + \Delta t k_B (C_B, C^n)_{\Gamma_B} + (C^{n-1}, C^n) \\ \leq \Delta t \beta_1 C_s \|a^{n-1}\| \|C^n\| + \Delta t k_B C_B |\Gamma_B|^{1/2} \|C^n\|_{\Gamma_B} + \|C^{n-1}\| \|C^n\|. \end{aligned}$$

Luego utilizando la desigualdad de Cauchy con $\epsilon = D/2$,

$$\begin{aligned} (C^n, C^n) + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{B}(C^n, C^n) \\ \leq \frac{\Delta t}{2D} \beta_1^2 C_s^2 \|a^{n-1}\|^2 + \frac{\Delta t}{2} k_B C_B^2 |\Gamma_B| + \frac{1}{2} \|C^{n-1}\|^2 + \frac{1}{2} \|C^n\|^2. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Entonces,

$$\|C^n\|^2 + \Delta t \mathcal{B}(C^n, C^n) \leq \frac{\Delta t}{D} \beta_1^2 C_s^2 \|a^{n-1}\|^2 + \Delta t k_B C_B^2 |\Gamma_B| + \|C^{n-1}\|^2,$$

que podemos escribir más brevemente como

$$\|C^n\|^2 - \|C^{n-1}\|^2 + \Delta t \mathbb{C}_1 \|C^n\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \Delta t (\mathbb{C}_2 \|a^{n-1}\|^2 + \mathbb{C}_3) \leq \mathbb{C}_4 \Delta t.$$

Sumando para n de 1 a $M = \lceil T/\Delta t \rceil$ obtenemos:

$$\max_{1 \leq n \leq M} \|C^n\|^2 + \mathbb{C}_1 \Delta t \sum_{n=1}^M \|C^n\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \|C^0\|^2 + \mathbb{C}_4 T. \quad (4.13)$$

Estimación de errores

En esta sección suponemos que el par solución (C, a) tiene las siguientes regularidades: $a \in H^1(0, T; L^2(\Omega))$, $C \in H^1(0, T; H^1(\Omega))$ y $C_{tt} \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$.

Queremos estimar $\|\sqrt{a(t_n)} - \sqrt{a^n}\|$, para ello recordamos la fórmula para a^n en (4.11):

$$\sqrt{a^n} = \left(\sqrt{a^{n-1}} - \frac{\beta_2}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sqrt{N}(C_s - \bar{C}^n)_+ \right)_+.$$

Para $a(t_n)$, tenemos

$$\sqrt{a(t_n)} = \left(\sqrt{a(t_{n-1})} - \frac{\beta_2}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sqrt{N}(C_s - C)_+ \right)_+.$$

Restando ambas ecuaciones y usando que el mapeo $x \rightarrow (x)_+$ es Lipschitz con constante 1, tenemos

$$\begin{aligned} |\sqrt{a^n} - \sqrt{a(t_n)}| &\leq |\sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})}| + \frac{\beta_2}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sqrt{N} |\bar{C}^n - C(t)| dt \\ &\leq |\sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})}| \\ &\quad + \frac{\beta_2}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sqrt{N} |\bar{C}^n - C^n + C^n - R_h C(t_n) + R_h C(t_n) - C(t_n)| dt \\ &\quad + \frac{\beta_2}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sqrt{N} |C(t_n) - C(t)| dt \\ &\leq |\sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})}| + \Delta t \frac{\beta_2}{2} \sqrt{N} |\bar{C}^n - C^n| + \Delta t \frac{\beta_2}{2} \sqrt{N} |\theta_C^n| \\ &\quad + \Delta t \frac{\beta_2}{2} \sqrt{N} |\rho_C^n| + \frac{\beta_2}{2} \sqrt{N} \int_{t_{n-1}}^{t_n} |C(t_n) - C(t)| dt, \end{aligned}$$

donde $\theta_C^n = C^n - R_h C(t_n)$ y $\rho_C^n = R_h C(t_n) - C(t_n)$, por lo que

$$C^n - C(t_n) = C^n - R_h C(t_n) + R_h C(t_n) - C(t_n) = \theta_C^n + \rho_C^n.$$

Luego

$$\begin{aligned} \left\| \sqrt{a^n} - \sqrt{a(t_n)} \right\| &\leq \left\| \sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})} \right\| \\ &\quad + \Delta t \frac{\beta_2}{2} \left\| \sqrt{N} \right\|_{L^\infty} (\|\bar{C}^n - C^n\| + \|\theta_C^n\| + \|\rho_C^n\|) \\ &\quad + \frac{\beta_2}{2} \left\| \sqrt{N} \right\|_{L^\infty} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \|C(t_n) - C(t)\| dt. \end{aligned}$$

Usando que $(\alpha + \beta)^2 \leq (1 + \Delta t)\alpha^2 + (1 + \frac{1}{\Delta t})\beta^2$ obtenemos

$$\begin{aligned} \left\| \sqrt{a^n} - \sqrt{a(t_n)} \right\|^2 &\leq (1 + \Delta t) \left\| \sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})} \right\|^2 \\ &\quad + (\Delta t)^2 \frac{\beta_2^2}{2} \left(1 + \frac{1}{\Delta t}\right) \left\| \sqrt{N} \right\|_{L^\infty}^2 (\|\bar{C}^n - C^n\| + \|\theta_C^n\| + \|\rho_C^n\|)^2 \\ &\quad + \left(1 + \frac{1}{\Delta t}\right) \frac{\beta_2^2}{2} \left\| \sqrt{N} \right\|_{L^\infty}^2 \left(\int_{t_{n-1}}^{t_n} \|C(t_n) - C(t)\| dt \right)^2. \end{aligned}$$

Llamando $\mathbb{C}_5 = \beta_2^2 \|\sqrt{N}\|_{L^\infty(\Omega)}^2$ y $\eta_n = \int_{t_{n-1}}^{t_n} \|C(t_n) - C(t)\| dt$ arribamos a

$$\begin{aligned} \left\| \sqrt{a^n} - \sqrt{a(t_n)} \right\|^2 &\leq (1 + \Delta t) \left\| \sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})} \right\|^2 \\ &\quad + \mathbb{C}_5 \Delta t (1 + \Delta t) (\|\bar{C}^n - C^n\|^2 + \|\theta_C^n\|^2 + \|\rho_C^n\|^2) \\ &\quad + \mathbb{C}_5 \left(1 + \frac{1}{\Delta t}\right) \eta_n^2. \end{aligned} \tag{4.14}$$

Vemos que en esta última acotación para el error $\left\| \sqrt{a^n} - \sqrt{a(t_n)} \right\|$ aparecen términos con el error para C en el paso n . A continuación estudiamos el error para C . Sabemos que C^n cumple la siguiente ecuación

$$\mathcal{B}(C^n, v) = \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C^n) a^{n-1} v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v - \int_{\Omega} \bar{\partial}_t C^n v,$$

para todo $v \in V_h$ y que para $R_h C(t_n)$ vale

$$\mathcal{B}(R_h C(t_n), v) = \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C(t_n)) a(t_n) v + k_B C_B \int_{\Gamma_B} v - \int_{\Omega} C_t(t_n) v.$$

Si restamos las dos ecuaciones anteriores, obtenemos

$$\underbrace{\mathcal{B}(C^n - R_h C(t_n), v)}_{\theta_C^n} = \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C^n) a^{n-1} v - \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C(t_n)) a(t_n) v + \int_{\Omega} (C_t(t_n) - \bar{\partial}_t C^n) v.$$

Elegimos $v = C^n - R_h C(t_n) = \theta_c^n$, sumando y restando $\beta_1 \int_{\Omega} R_h C(t_n) a^{n-1} \underbrace{(C^n - R_h C(t_n))}_{\theta_c^n}$

y $\beta_1 \int_{\Omega} C(t_n) a^{n-1} \underbrace{(C^n - R_h C(t_n))}_{\theta_C^n}$, resulta

$$\begin{aligned} \mathcal{B}(\theta_C^n, \theta_C^n) &\leq \beta_1 \int_{\Omega} (C_s - C(t_n))(a^{n-1} - a(t_n)) \theta_C^n - \beta_1 \int_{\Omega} \underbrace{(R_h C(t_n) - C(t_n))}_{\rho_C^n} a^{n-1} \theta_C^n \\ &\quad + \int_{\Omega} (C_t(t_n) - \bar{\partial}_t C(t_n) + \underbrace{\bar{\partial}_t C(t_n) - \bar{\partial}_t R_h C(t_n)}_{\bar{\partial}_t \rho_C^n} + \underbrace{\bar{\partial}_t R_h C(t_n) - \bar{\partial}_t C^n}_{-\bar{\partial}_t \theta_C^n}) \theta_C^n. \end{aligned}$$

Entonces

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \underbrace{\bar{\partial}_t \theta_C^n \theta_C^n}_{\frac{1}{\Delta t}(\theta_C^n \theta_C^n - \theta_C^{n-1} \theta_C^n)} + \mathcal{B}(\theta_C^n, \theta_C^n) &\leq \beta_1 \left(C_s \|a^{n-1} - a(t_n)\| + \|a^{n-1}\|_{\infty} \|\rho_C^n\| + \frac{1}{\beta_1} \|\bar{\partial}_t \rho_C^n\| \right) \|\theta_C^n\| \\ &\quad + \|C_t(t_n) - \bar{\partial}_t C(t_n)\|_{H^{-1}(\Omega)} \|\theta_C^n\|_{H^1(\Omega)}, \end{aligned}$$

que a su vez implica

$$\begin{aligned} \|\theta_C^n\|^2 + \frac{1}{4} \Delta t \mathcal{B}(\theta_C^n, \theta_C^n) &\leq \|\theta_C^{n-1}\| \|\theta_C^n\| \\ &\quad + \Delta t \frac{1}{D} \left(\beta_1 C_s \|a^{n-1} - a(t_{n-1})\| + \beta_1 C_s \|a(t_{n-1}) - a(t_n)\| \right. \\ &\quad \left. + \beta_1 \|a^{n-1}\|_{\infty} \|\rho_C^n\| + \|\bar{\partial}_t \rho_C^n\| \right)^2 \\ &\quad + \Delta t \frac{1}{2D} \|C_t(t_n) - \bar{\partial}_t C(t_n)\|_{H^{-1}(\Omega)}^2. \end{aligned}$$

Luego,

$$\begin{aligned} \|\theta_C^n\|^2 + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{B}(\theta_C^n, \theta_C^n) &\leq \|\theta_C^{n-1}\|^2 + \\ &\quad + \Delta t \frac{2}{D} \left(\beta_1 C_s \|\sqrt{a^{n-1}} + \sqrt{a(t_{n-1})}\|_{L^{\infty}} \|\sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})}\| \right. \\ &\quad \left. + \beta_1 C_s \left\| \int_{t_{n-1}}^{t_n} a_t(s) ds \right\| + \beta_1 \|a^{n-1}\|_{\infty} \|\rho_C^n\| + \|\bar{\partial}_t \rho_C^n\| \right)^2 \\ &\quad + \Delta t \frac{1}{D} \|C_t(t_n) - \bar{\partial}_t C(t_n)\|_{H^{-1}(\Omega)}^2. \end{aligned}$$

Como $0 \leq a^{n-1}, a(t_{n-1}) \leq A^0$,

$$\begin{aligned} \|\theta_C^n\|^2 + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{B}(\theta_C^n, \theta_C^n) &\leq \|\theta_C^{n-1}\|^2 + \Delta t \frac{2}{D} \left(\beta_1 C_s 2\sqrt{A^0} \|\sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})}\| \right. \\ &\quad \left. + \beta_1 C_s \underbrace{\left\| \int_{t_{n-1}}^{t_n} a_t(s) ds \right\|}_{\gamma_n} + \beta_1 A^0 \|\rho_C^n\| + \|\bar{\partial}_t \rho_C^n\| \right)^2 \\ &\quad + \Delta t \frac{1}{D} \underbrace{\|C_t(t_n) - \bar{\partial}_t C(t_n)\|_{H^{-1}(\Omega)}^2}_{\xi_n^2}, \end{aligned}$$

y finalmente,

$$\|\theta_C^n\|^2 + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{B}(\theta_C^n, \theta_C^n) \leq \|\theta_C^{n-1}\|^2 + \mathbb{C}_6 \Delta t \left(\|\sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})}\|^2 + \gamma_n^2 + \|\rho_C^n\|^2 + \|\bar{\partial}_t \rho_C^n\|^2 + \xi_n^2 \right), \quad (4.15)$$

y

$$\|\theta_C^n\|^2 \leq \|\theta_C^{n-1}\|^2 + \mathbb{C}_6 \Delta t \left(\|\sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})}\|^2 + \gamma_n^2 + \|\rho_C^n\|^2 + \|\bar{\partial}_t \rho_C^n\|^2 + \xi_n^2 \right). \quad (4.16)$$

Insertando (4.16) en el lado derecho de (4.14) obtenemos

$$\begin{aligned} \|\sqrt{a^n} - \sqrt{a(t_n)}\|^2 &\leq (1 + \Delta t) \|\sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})}\|^2 \\ &\quad + \mathbb{C}_5 \Delta t (1 + \Delta t) \left[\|\bar{C}^n - C^n\|^2 + \|\rho_C^n\|^2 + \|\theta_C^{n-1}\|^2 \right. \\ &\quad \left. + \mathbb{C}_6 \Delta t \left(\|\sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})}\|^2 + \gamma_n^2 + \|\rho_C^n\|^2 + \|\bar{\partial}_t \rho_C^n\|^2 + \xi_n^2 \right) \right] \\ &\quad + \mathbb{C}_5 \left(1 + \frac{1}{\Delta t} \right) \eta_n^2 \\ &= (1 + \Delta t + \mathbb{C}_5 \mathbb{C}_6 \Delta t^2 + \mathbb{C}_5 \mathbb{C}_6 \Delta t^3) \|\sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})}\|^2 \\ &\quad + (\mathbb{C}_5 \Delta t + \mathbb{C}_5 \Delta t^2) \|\theta_C^{n-1}\|^2 + \mathbb{C}_5 \Delta t (1 + \Delta t) (\|\bar{C}^n - C^n\|^2 + \|\rho_C^n\|^2) \\ &\quad + \mathbb{C}_5 \mathbb{C}_6 \Delta t^2 (1 + \Delta t) \left[\gamma_n^2 + \|\rho_C^n\|^2 + \|\bar{\partial}_t \rho_C^n\|^2 + \xi_n^2 \right] + \mathbb{C}_5 \left(1 + \frac{1}{\Delta t} \right) \eta_n^2. \end{aligned}$$

Sumando esta desigualdad con (4.16), y llamando $\mathbb{C}_7 = \max\{\mathbb{C}_6 + 1, \mathbb{C}_5 \mathbb{C}_6, \mathbb{C}_5 + \mathbb{C}_6\}$ resulta

$$\|\sqrt{a^n} - \sqrt{a(t_n)}\|^2 + \|\theta_C^n\|^2 \leq (1 + \mathbb{C}_7 (\Delta t + \Delta t^2 + \Delta t^3)) \left[\|\sqrt{a^{n-1}} - \sqrt{a(t_{n-1})}\|^2 + \|\theta_C^{n-1}\|^2 \right]$$

$$\begin{aligned}
& + \mathbb{C}_7(\Delta t + \Delta t^2 + \Delta t^3) \left[\|\bar{C}^n - C^n\|^2 + \gamma_n^2 + \|\rho_C^n\|^2 + \|\bar{\partial}_t \rho_C^n\|^2 + \xi_n^2 \right] \\
& + \mathbb{C}_7 \left(1 + \frac{1}{\Delta t} \right) \eta_n^2.
\end{aligned}$$

Por inducción en n , usando que $(1 + \mathbb{C}_7(\Delta t + \Delta t^2 + \Delta t^3)) \geq 1$, obtenemos

$$\begin{aligned}
\|\sqrt{a^n} - \sqrt{a(t_n)}\|^2 + \|\theta_C^n\|^2 & \leq (1 + \mathbb{C}_7(\Delta t + \Delta t^2 + \Delta t^3))^n \\
& \times \left\{ \left[\|\sqrt{a^0} - \sqrt{a(t_0)}\|^2 + \|\theta_C^0\|^2 \right] \right. \\
& + \mathbb{C}_7(\Delta t + \Delta t^2 + \Delta t^3) \sum_{j=1}^n \left[\|\bar{C}^j - C^j\|^2 \right. \\
& + \gamma_j^2 + \|\rho_C^j\|^2 + \|\bar{\partial}_t \rho_C^j\|^2 + \xi_j^2 \left. \right] \\
& \left. + \mathbb{C}_7 \left(1 + \frac{1}{\Delta t} \right) \sum_{j=1}^n \eta_j^2 \right\}.
\end{aligned}$$

Definiendo $\mathbb{C}_8 = \mathbb{C}_7(1 + T + T^2)$, tenemos

$$\begin{aligned}
\|\sqrt{a^n} - \sqrt{a(t_n)}\|^2 + \|\theta_C^n\|^2 & \leq (1 + \mathbb{C}_8 \Delta t) \left\{ \left[\|\sqrt{a^0} - \sqrt{a(t_0)}\|^2 + \|\theta_C^0\|^2 \right] \right. \\
& + \mathbb{C}_8 \Delta t \sum_{j=1}^n \left[\|\bar{C}^j - C^j\|^2 + \gamma_j^2 + \|\rho_C^j\|^2 + \|\bar{\partial}_t \rho_C^j\|^2 + \xi_j^2 \right] \\
& \left. + \frac{\mathbb{C}_8}{\Delta t} \sum_{j=1}^n \eta_j^2 \right\}.
\end{aligned}$$

Como $(1 + \mathbb{C}_8 \Delta t)^n \leq e^{\mathbb{C}_8 t_n} \leq e^{\mathbb{C}_8 T} =: \mathbb{C}_T$, resulta,

$$\begin{aligned}
\|\sqrt{a^n} - \sqrt{a(t_n)}\|^2 + \|\theta_C^n\|^2 & \leq \mathbb{C}_T \left[\|\sqrt{a^0} - \sqrt{a(t_0)}\|^2 + \|\theta_C^0\|^2 \right] \\
& + \mathbb{C}_T \Delta t \sum_{j=1}^n \left[\|\bar{C}^j - C^j\|^2 + \gamma_j^2 + \|\rho_C^j\|^2 + \|\bar{\partial}_t \rho_C^j\|^2 + \xi_j^2 \right] \\
& + \frac{\mathbb{C}_T}{\Delta t} \sum_{j=1}^n \eta_j^2.
\end{aligned} \tag{4.17}$$

A continuación estimaremos cada suma del segundo miembro de la última desigualdad. En primer lugar, siendo $\bar{C}^j = P_h C^j$, por la Proposición 4.2 resulta $\|\bar{C}^j - C^j\| \leq$

$\mathbb{C}^*h\|C^j\|_{H^1(\Omega)}$ y por lo tanto

$$\sum_{j=1}^n \|\bar{C}^j - C^j\|^2 \leq \mathbb{C}^{*2}h^2 \sum_{j=1}^n \|C^j\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \mathbb{C}_8h^2, \quad (4.18)$$

donde hemos usado la estabilidad (4.13). Como $\gamma_j^2 = \|\int_{t_{j-1}}^{t_j} a_t(s) ds\|^2 \leq (\int_{t_{j-1}}^{t_j} \|a_t(s)\| ds)^2$, resulta

$$\sum_{j=1}^n \gamma_j^2 \leq \Delta t \int_0^T \|a_t(t)\|^2 dt, \quad (4.19)$$

y como $\rho_C^j = R_h C(t_j) - C(t_j)$ resulta que por la Proposición 4.4, $\|\rho_C^j\| \leq \mathbb{C}h\|C(t_j)\|_{H^1(\Omega)}$, por lo que

$$\|\rho_C^j\| \leq \frac{\mathbb{C}h}{\Delta t} \left[\int_{t_{j-1}}^{t_j} \|C(t_j) - C(s)\|_{H^1(\Omega)} ds + \int_{t_{j-1}}^{t_j} \|C(s)\|_{H^1(\Omega)} ds \right],$$

y entonces,

$$\|\rho_C^j\|^2 \leq \frac{\mathbb{C}^2h^2}{\Delta t^2} \left[\left(\int_{t_{j-1}}^{t_j} \|C(t_j) - C(s)\|_{H^1(\Omega)} ds \right)^2 + \left(\int_{t_{j-1}}^{t_j} \|C(s)\|_{H^1(\Omega)} ds \right)^2 \right].$$

Ahora bien,

$$\begin{aligned} \int_{t_{j-1}}^{t_j} \|C(t_j) - C(s)\|_{H^1(\Omega)}^2 ds &= \int_{t_{j-1}}^{t_j} \left\| \int_s^{t_j} C_t(u) du \right\|_{H^1(\Omega)}^2 ds \\ &\leq \Delta t^2 \int_{t_{j-1}}^{t_j} \|C_t(s)\|_{H^1(\Omega)}^2 ds. \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\sum_{j=1}^n \|\rho_C^j\|^2 \leq \frac{\mathbb{C}^2h^2}{\Delta t} \int_0^T [\|C(s)\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|C_t(s)\|_{H^1(\Omega)}^2] ds. \quad (4.20)$$

Para estimar $\|\bar{\partial}_t \rho_C^j\| = \|\bar{\partial}_t R_h C(t_j) - \bar{\partial}_t C(t_j)\|$, recordamos la Proposición 4.3 y hacemos

$$\bar{\partial}_t \rho_C^j = \bar{\partial}_t R_h C(t_j) - \bar{\partial}_t C(t_j) = \frac{1}{\Delta t} (R_h - I) \int_{t_{j-1}}^{t_j} C_t ds = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_{j-1}}^{t_j} (R_h - I) C_t ds,$$

luego

$$\sum_{j=1}^n \|\bar{\partial}_t \rho_C^j\|^2 \leq \frac{1}{\Delta t^2} \sum_{j=1}^n \left(\int_{t_{j-1}}^{t_j} \mathbb{C}h \|C_t\|_{H^1(\Omega)} \right)^2 \leq \frac{\mathbb{C}^2 h^2}{\Delta t} \int_0^T \|C_t\|_{H^1(\Omega)}^2 ds. \quad (4.21)$$

Para estimar $\xi_j^2 = \|C_t(t_j) - \bar{\partial}_t C(t_j)\|_{H^{-1}(\Omega)}^2$ observamos que

$$C_t(t_j) - \bar{\partial}_t C(t_j) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_{j-1}}^{t_j} (s - t_{j-1}) C_{tt}(s) ds.$$

Así,

$$\sum_{j=1}^n \xi_j^2 \leq \frac{1}{\Delta t^2} \sum_{j=1}^n \left(\int_{t_{j-1}}^{t_j} |s - t_{j-1}| \|C_{tt}(s)\|_{H^{-1}(\Omega)} ds \right)^2 \leq \Delta t \int_0^{t_n} \|C_{tt}(s)\|_{H^{-1}(\Omega)}^2 ds. \quad (4.22)$$

Finalmente, $\eta_j(t)^2 = \left(\int_{t_{j-1}}^{t_j} \|C(t_j) - C(t)\| dt \right)^2$ y resulta

$$\begin{aligned} \left(\int_{t_{j-1}}^{t_j} \|C(t_j) - C(s)\| ds \right)^2 &\leq \Delta t \int_{t_{j-1}}^{t_j} \left\| \int_s^{t_j} C_t(u) du \right\|^2 ds \\ &\leq 2\Delta t^3 \int_{t_{j-1}}^{t_j} \|C_t(s)\|^2 ds. \end{aligned}$$

Sumando para j de 1 a n obtenemos

$$\sum_{j=1}^n \eta_j^2 \leq 2\Delta t^3 \int_0^T \|C_t(t)\|^2 dt. \quad (4.23)$$

A partir de (4.17), las estimaciones (4.18)–(4.23) implican el siguiente teorema.

Teorema 4.11. *Si el par solución (C, a) satisface que $a \in H^1(0, T; L^2(\Omega))$, $C \in H^1(0, T; H^1(\Omega))$ y $C_{tt} \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$ entonces*

$$\begin{aligned} \max_{1 \leq n \leq T/\Delta t} \|C^n - C(t_n)\| + \|\sqrt{a^n} - \sqrt{a(t_n)}\| \\ \leq \mathbb{C}_T^* \left[\|C^0 - C(0)\| + \|\sqrt{a^0} - \sqrt{a(0)}\| \right] + \mathbb{C}_T^*(h + \Delta t), \end{aligned}$$

donde \mathbb{C}_T^* depende de $\|a\|_{H^1(0, T; L^2(\Omega))}$, $\|C\|_{H^1(0, T; H^1(\Omega))}$ y $\|C_{tt}\|_{L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))}$ y de los paráme-

tros del problema, pero es independiente de los parámetros de discretización h y Δt .

Utilizando los resultados de regularidad obtenidos en el Capítulo 3 concluimos el siguiente corolario.

Corolario 4.12. *Si $C^0 \in H^2(\Omega)$, $D \frac{\partial}{\partial n} C^0 = 0$ en Γ_N , $D \frac{\partial}{\partial n} C^0 = k_B(C_B - C^0)$ en Γ_B entonces existe una constante \mathbb{C}_T^* , que depende del tiempo final T , de $\|a_0\|_{L^\infty(\Omega)}$, $\|C_0\|_{H^2(\Omega)}$ y de los parámetros β_1 , β_2 , C_s , $\|N\|_{L^\infty(\Omega)}$ del problema (1.4), pero es independiente de los parámetros de discretización h y Δt , tal que*

$$\begin{aligned} \max_{1 \leq n \leq T/\Delta t} \left(\|C^n - C(t_n)\| + \|\sqrt{a^n} - \sqrt{a(t_n)}\| \right) \\ \leq \mathbb{C}_T^* \left[\|C^0 - C(0)\| + \|\sqrt{a^0} - \sqrt{a(0)}\| \right] + \mathbb{C}_T^*(h + \Delta t). \end{aligned}$$

A continuación suponemos además que $C \in L^\infty(0, T; H^2(\Omega))$ y encontramos una cota para el error $\left(\sum_{j=1}^M \Delta t \|C^j - C(t_j)\|_{H^1(\Omega)}^2 \right)^{1/2}$.

Retomando (4.15),

$$\|\theta_C^j\|^2 - \|\theta_C^{j-1}\|^2 + \frac{\Delta t}{2} \mathcal{B}(\theta_C^j, \theta_C^j) \leq \mathbb{C}_6 \Delta t \left(\|\sqrt{a^{j-1}} - \sqrt{a(t_{j-1})}\|^2 + \gamma_j^2 + \|\rho_C^j\|^2 + \|\bar{\partial}_t \rho_C^j\|^2 + \xi_j^2 \right).$$

y sumando de 1 a $M = \lceil T/\Delta t \rceil$, como se hizo en la demostración de la estabilidad para $\|C^n\|$, obtenemos

$$\|\theta_C^M\|^2 + \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=1}^M \mathcal{B}(\theta_C^j, \theta_C^j) \leq \|\theta_C^0\|^2 + \mathbb{C}_6 \Delta t \sum_{j=1}^M \left(\|\sqrt{a^{j-1}} - \sqrt{a(t_{j-1})}\|^2 + \gamma_j^2 + \|\rho_C^j\|^2 + \|\bar{\partial}_t \rho_C^j\|^2 + \xi_j^2 \right).$$

Recordando la coercitividad de la forma bilineal enunciada en (2.4),

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_1 \Delta t \sum_{j=1}^M \|\theta_C^j\|_{H^1(\Omega)}^2 &\leq \|\theta_C^0\|^2 + \mathbb{C}_6 M \Delta t \max_{1 \leq j \leq M} \|\sqrt{a^{j-1}} - \sqrt{a(t_{j-1})}\|^2 \\ &\quad + \mathbb{C}_6 \Delta t \sum_{j=1}^M \left(\gamma_j^2 + \|\rho_C^j\|^2 + \|\bar{\partial}_t \rho_C^j\|^2 + \xi_j^2 \right), \end{aligned}$$

y usando la estimación encontrada en el Teorema 4.11 y las estimaciones (4.19)–(4.22),

llegamos a

$$\mathbb{C}_1 \left(\Delta t \sum_{j=1}^M \|\theta_C^j\|_{H^1(\Omega)}^2 \right)^{1/2} \leq \|\theta_C^0\| + \mathbb{C}_T^* [\|C^0 - C(0)\| + \|\sqrt{a^0} - \sqrt{a(0)}\|] + \mathbb{C}_T^*(h + \Delta t).$$

Luego hemos demostrado el siguiente Corolario:

Corolario 4.13. *Supongamos que Ω tiene frontera de clase $C^{1,1}$ y $\text{dist}\{\Gamma_B, \Gamma_N\} \neq 0$. Si $C_0 \in H^2(\Omega)$ tal que $D \frac{\partial}{\partial n} C_0 = 0$ en Γ_N y $D \frac{\partial}{\partial n} C_0 = k_B(C_B - C_0)$ en Γ_B , entonces existe una constante $\tilde{\mathbb{C}}_T^*$, que depende del tiempo final T , de $\|a_0\|_{L^\infty(\Omega)}$, $\|C_0\|_{H^2(\Omega)}$ y de los parámetros del problema, pero es independiente de los parámetros de discretización h y Δt ,*

$$\left(\sum_{j=1}^M \Delta t \|C^j - C(t_j)\|_{H^1(\Omega)}^2 \right)^2 \leq \tilde{\mathbb{C}}_T^* [\|C^0 - C(0)\|_{H^1(\Omega)} + \|\sqrt{a^0} - \sqrt{a(0)}\|] + \tilde{\mathbb{C}}_T^*(h + \Delta t).$$

Observación 4.14. Comparando los resultados obtenidos para la semidiscretización espacial y la discretización completa, parecería que el análisis de la semidiscretización espacial podría hacerse de otra manera y obtener resultados mejores, con hipótesis más débiles, análogos a los obtenidos para la discretización completa. Destacamos que en la semidiscretización, la acotación de los errores se obtiene usando la ecuación diferencial que cumple a a diferencia de la discretización completa, donde usamos la fórmula obtenida para a en (2.40).

Experimentos Numéricos

En este capítulo utilizamos el método numérico desarrollado para estudiar propiedades cualitativas y cuantitativas de las soluciones del problema (1.4). El código fue desarrollado en MATLAB y por ahora sólo disponemos de una versión para dominios bidimensionales. Hemos utilizado ideas de [FPW, RV] que permiten un ensamblado rápido de las matrices, aprovechando la vectorización de operaciones de MATLAB. Actualmente estamos trabajando en un código para dominios tridimensionales.

En la primera sección resolvemos con diferentes mallas y diferentes pasos de tiempo Δt a fin de verificar los órdenes de convergencia en comparación con las estimaciones obtenidas en el capítulo anterior. Este paso es también de suma importancia para verificar que no haya errores de programación en el código.

En la segunda sección utilizamos el código para resolver un problema con coeficientes y geometría de un dispositivo intrauterino comercial actualmente utilizado en ganadería para el control de la ovulación de ganado bovino. Presentamos perfiles de concentración de droga disuelta y de área/radio de microesferas de droga sólida. Finalmente presentamos comparación de la droga liberada a lo largo del tiempo con mediciones experimentales sobre un experimento *in vitro*.

5.1. Validación del código

Con el objetivo de verificar los resultados teóricos obtenidos en el capítulo anterior consideramos un problema como (1.4) agregando un término fuente $f(x, t)$ a la ecuación

de la droga disuelta $C(x, t)$ para tener una solución exacta. Precisamente, consideramos

$$\left\{ \begin{array}{l} C_t - D\Delta C = \beta_1(C_s - C)a + f, \quad \text{en } \Omega \times (0, T), \\ a_t = -\beta_2(C_s - C)\sqrt{N(x)}\sqrt{a}, \quad \text{en } \Omega \times (0, T), \\ C(x, 0) = C^0(x) \quad \text{en } \Omega, \\ a(x, 0) = a^0(x) \quad \text{en } \Omega, \\ D\nabla C \cdot n = 0 \quad \text{en } \Gamma_N \times (0, T), \\ D\nabla C \cdot n = k_B(C_B - C) \quad \text{en } \Gamma_B \times (0, T), \end{array} \right.$$

con $\Omega = (0, 1)^2$, $\Gamma_B = \{1\} \times [0, 1]$ y $\Gamma_N = \partial\Omega \setminus \Gamma_B$. Elegimos el término fuente $f = f(x, t)$, y los valores iniciales $C^0 = C^0(x)$ y a^0 de manera que

$$C(x, y, t) = C_s \cos\left(\frac{\pi}{4}x\right) \frac{1}{1+t}, \quad a(x, y, t) = \left(\sqrt{a^0} - \frac{\beta_2}{2} C_s \sqrt{N} \left[t - \cos\left(\frac{\pi}{4}x\right) \frac{1}{1+t} \right] \right)_+^2,$$

constituya el par solución. Resolvimos el sistema totalmente discreto con el código que hemos escrito para MATLAB, fijando los valores de los parámetros del problema como se indica en el Cuadro 5.1, con un tiempo final $T = 4$.

C^0	1 [Kg/m3]
$m_{0,p}$	1 [Kg]
$a_{0,p}$	1 [m ²]
D	1 [m ² /s]
N	1
k_D	1 [m/s]
k_B	$\frac{\pi}{4}$ [m/s]
C_s	1 [Kg/m3]
V_{tot}	1 [m ³]
ρ_s	$4\sqrt{\pi}$ [Kg/m3]
C_B	0

Cuadro 5.1: Parámetros del problema (1.4) para el ejemplo con solución exacta.

En el Cuadro 5.2 mostramos los errores $\|C^n - C\|_{L^\infty(L^2)} := \max_n \|C^n - C(t_n)\|_{L^2(\Omega)}$, $\|\nabla(C^n - C)\|_{L^2(L^2)} := \left(\sum_n \Delta t \|\nabla(C^n - C(t_n))\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2}$ y $\|r^n - r\|_{L^\infty(L^2)} := \max_n \|r^n - r(t_n)\|_{L^2(\Omega)}$, para diferentes mallas uniformes y diferentes valores Δt . Observamos que el primer error decrece como $O(h + \Delta t)^2$, como corresponde al error de aproximación $\|R_h C(t_n) - C(t_n)\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}$. Este comportamiento es mejor que el previsto por nuestra

teoría, que solo asegura $O(h + \Delta t)$, debido al acoplamiento con el error de a y de \sqrt{a} que no puede ser de orden superior a uno, por estar aproximados con constantes a trozos. El error $\|\nabla(C^n - C)\|_{L^2(L^2)}$ y el $\|r^n - r\|_{L^\infty(L^2)}$ decrecen con orden $O(h + \Delta t)$ tal como lo prevén nuestras estimaciones de la Sección 4.3.

h	Δt	$\ C^n - C\ _{L^\infty(L^2)}$		$\ \nabla(C^n - C)\ _{L^2(L^2)}$		$\ r^n - r\ _{L^\infty(L^2)}$	
		error	OEC	error	OEC	error	OEC
0,050000	0,10000	$4,00 \times 10^{-4}$	-	$1,01 \times 10^{-2}$	-	$1,50 \times 10^{-3}$	-
0,025000	0,05000	$1,06 \times 10^{-4}$	1,91	$5,1 \times 10^{-3}$	1,00	$7,66 \times 10^{-4}$	0,97
0,012500	0,02500	$2,73 \times 10^{-5}$	1,96	$2,5 \times 10^{-3}$	1,00	$3,87 \times 10^{-4}$	0,99
0,006250	0,01250	$6,94 \times 10^{-6}$	1,98	$1,3 \times 10^{-3}$	1,00	$1,95 \times 10^{-4}$	0,99
0,003125	0,00625	$1,75 \times 10^{-6}$	2,00	$6,35 \times 10^{-4}$	1,00	$9,76 \times 10^{-5}$	1,00

Cuadro 5.2: Errores en el ejemplo con solución exacta para diferentes mallas y valores de Δt . Se muestra el error para una sucesión de mallas y Δt de manera que cada fila corresponde a h y Δt la mitad de los de la fila anterior. El orden experimental de convergencia (OEC) se calcula como $\log_2\left(\frac{\text{error}_h}{\text{error}_{h/2}}\right)$. Los órdenes observados están de acuerdo con los errores esperables según la teoría de interpolación, aunque algunos son mejores que lo previsto por nuestra teoría.

En el cuadro 5.3 mostramos el comportamiento del error $\|\nabla(C^n - C)\|_{L^\infty(L^2)} := \max_n \|\nabla(C^n - C(t_n))\|_{L^2(\Omega)}$. Aunque no obtuvimos una cota para este error, sí hemos demostrado que el error análogo de la semi-discretización espacial $\|\nabla(C_h - C)\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))}$ tiende a cero como $O(h)$. El mismo orden se observa para el error análogo $\max_n \|\nabla(C^n - C(t_n))\|_{L^2(\Omega)}$ de la formulación completamente discreta, indicando que sería posible obtener una estimación teórica.

h	Δt	$\ \nabla(C^n - C)\ _{L^\infty(L^2)}$	
		error	OEC
0,050000	0,10000	$8,05 \times 10^{-3}$	-
0,025000	0,05000	$4,03 \times 10^{-3}$	1,00
0,012500	0,02500	$2,01 \times 10^{-3}$	1,00
0,006250	0,01250	$1,01 \times 10^{-3}$	1,00
0,003125	0,00625	$5,04 \times 10^{-4}$	1,00

Cuadro 5.3: Errores en el ejemplo con solución exacta para diferentes mallas y valores de Δt . Se muestra el error para una sucesión de mallas y Δt de manera que cada fila corresponde a h y Δt la mitad de los de la fila anterior. El orden experimental de convergencia (OEC) se calcula como $\log_2\left(\frac{\text{error}_h}{\text{error}_{h/2}}\right)$. Los órdenes observados están de acuerdo con los errores esperables según la teoría de la Sección 4.2.

Vale la pena observar que en el ejemplo considerado, la medida del conjunto donde

$a(\cdot, t)$ se anula es positiva para $t > t^* \approx 2,98$; ver definición de t^* en (3.6). Nuestros experimentos numéricos fueron efectuados hasta $T = 4 \gg t^*$ y aún así se observan órdenes de convergencia óptimos. Nuestra teoría sólo garantiza convergencia para los errores medidos sobre $[0, T]$ para $T < t^*$. Sin embargo, a pesar que no fue demostrada la validez de nuestros resultados teóricos una vez superado el t^* , hemos obtenido el orden predicho en las estimaciones de error encontradas en el Capítulo 4. Lo observado puede deberse a que el ejemplo considerado es muy suave y no tan malo como puede ser en general, o a una deficiencia en nuestros resultados de regularidad, que no predicen suficiente regularidad más allá de t^* . Esto será tema de investigación en el futuro próximo.

5.2. Aplicación a un dispositivo comercial

En esta sección presentamos los resultados obtenidos para la liberación de droga desde un dispositivo CIDR (InterAg Manufacturing, New Zealand) de 1.9 g de P4 como el que se muestra en la Figura 5.1.

Esquemáticamente el dispositivo de la figura 5.1 puede verse en la Figura 5.2. Allí observamos la estructura interior a través de dos cortes transversales del dispositivo que en la figura se denotan como A-A' y B-B'.

Los valores de los parámetros que hemos utilizado en la simulación fueron extraídos de [DMNG] y se presentan en el Cuadro 5.4. Allí, C^0 es la condición inicial para la concentración, $m_{0,p}$ y $a_{0,p}$ son la masa y área inicial de una partícula, respectivamente, D_{ap40} y D_{ap60} son los coeficientes de difusión para medios de liberación con 40% y 60% de etanol respectivamente, Num es el número total de partículas en el dispositivo, k_D es la tasa de disolución de las partículas de droga sólida, k_B es el coeficiente de transferencia de masa, C_s es la concentración de saturación, V es el volumen del dispositivo, ρ_s es la densidad intrínseca de las partículas de droga y C_B la concentración de la droga en el medio de liberación.

Es decir, las condiciones iniciales son constantes, tanto para el área por unidad de volumen como para la concentración y suponemos que la concentración inicial es igual a la concentración de saturación, es decir estamos en un caso de unicidad de solución.

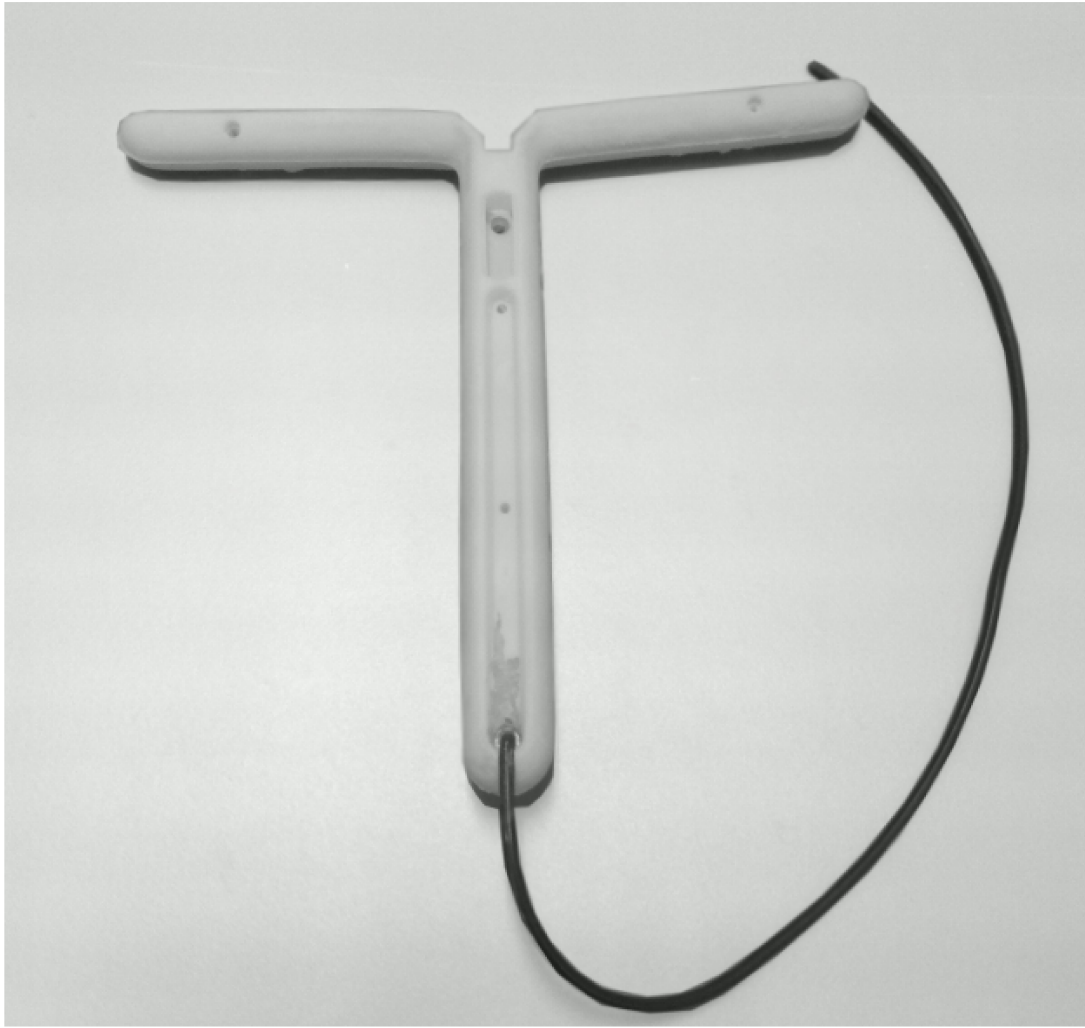


Figura 5.1: Fotografía del dispositivo CIDR (InterAg Manufacturing, New Zealand) de 1.9 g de P4.

C^0	0.513 [Kg/m ³]
$m_{0,p}$	1.0550e-12 [Kg]
$a_{0,p}$	4.5239e-10 [m ²]
D_{ap40}	1.670e-10 [m ² /s]
D_{ap60}	2.701e-10 [m ² /s]
Num	4*4.4791813886256e+8
k_D	6.59e-6 [m/s]
k_B	1e-3 [m/s]
C_s	0.513 [Kg/m ³]
V	4*4.76875e-6 [m ³]
ρ_s	1.166028463149913e+03 [Kg/m ³]
C_B	0

Cuadro 5.4: Condiciones iniciales y constantes del modelo para el dispositivo CIDR.

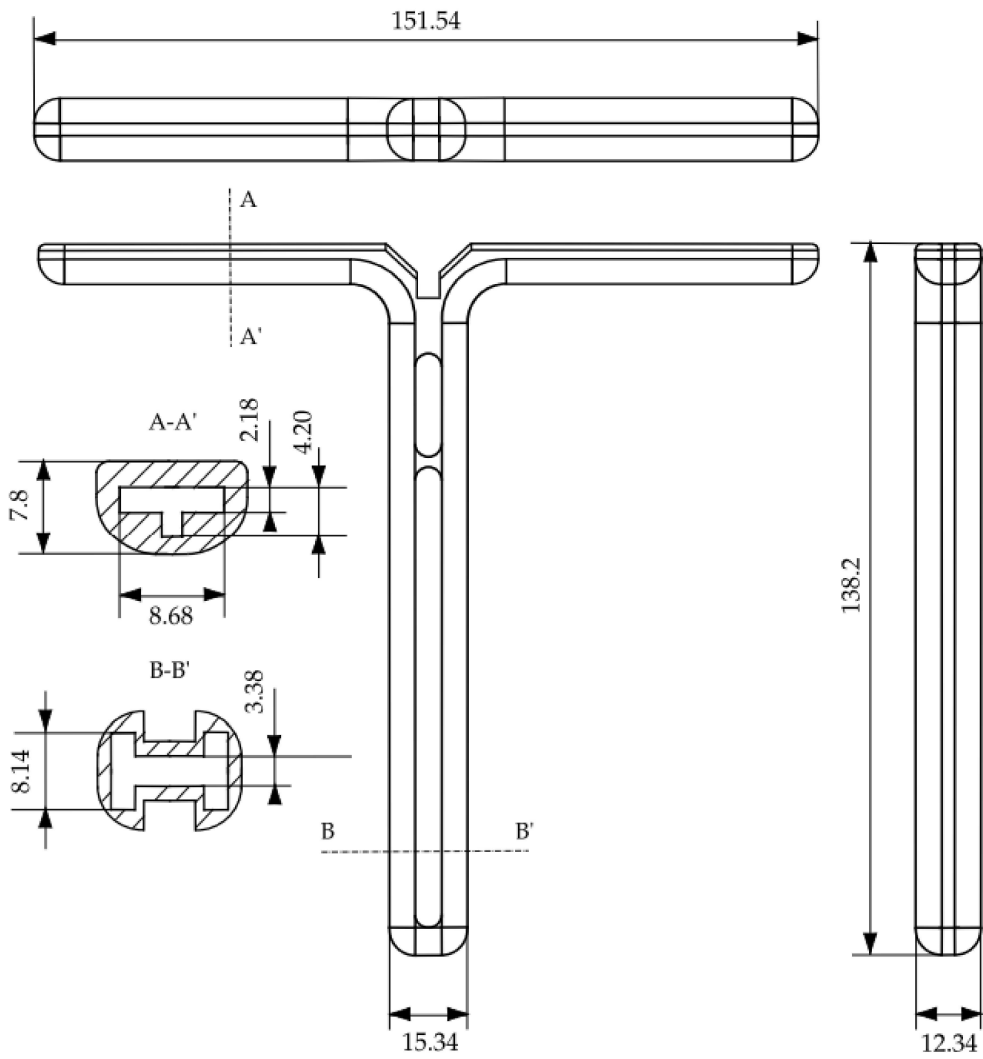


Figura 5.2: Esquema del dispositivo CIDR.

5.2.1. Solución del problema con sección transversal A-A'

Si bien el dispositivo es tridimensional y su geometría no parece indicar que una reducción dimensional es conveniente, realizamos en primer lugar unos cálculos suponiendo que el volumen total se obtiene con un dispositivo de sección transversal como el corte A-A'. Es decir, consideramos un dispositivo con las características materiales especificadas arriba, pero de sección constante, y longitud $L = V/A$, donde V es el volumen del dispositivo CIDR y A es el área de la sección transversal dada por el corte A-A'.

Generamos una malla de la sección transversal, utilizando el software Gmsh versión 2.5.1 con $h = 0,2170e - 07$. Obtuvimos una malla con 22.847 vértices distribuidos en 44.392 elementos, que puede verse en la Figura 5.3.

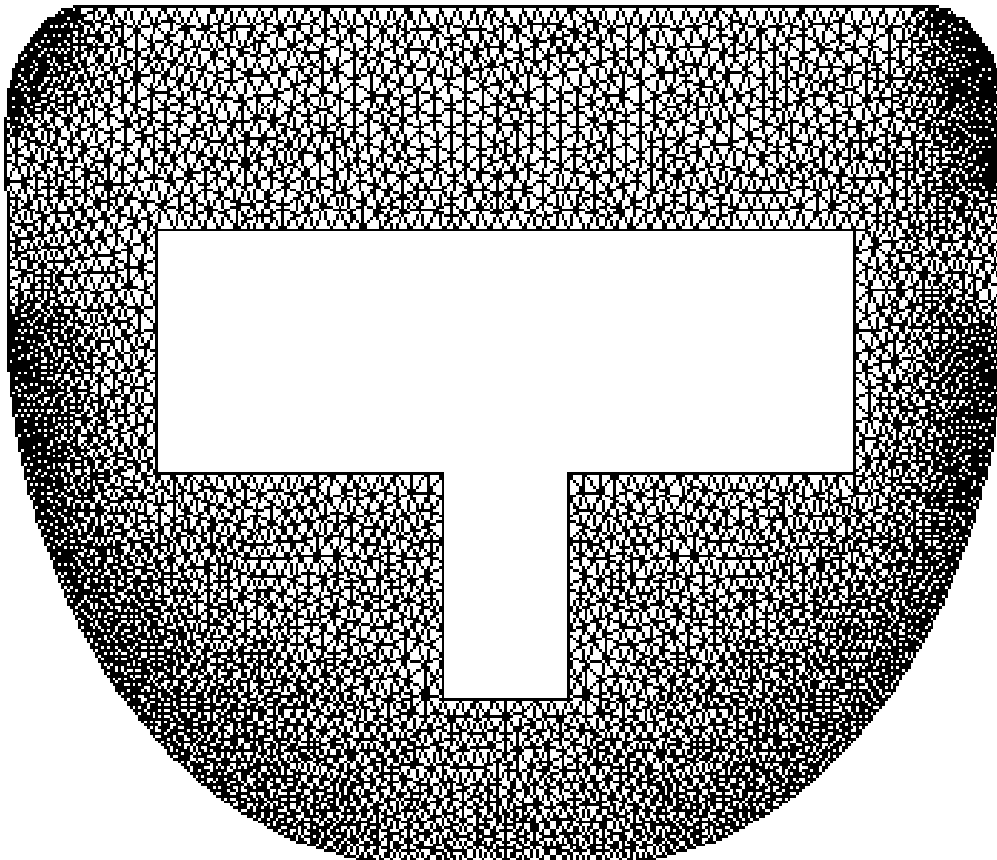


Figura 5.3: Malla de 22.847 vértices y 44.392 elementos, correspondiente a un corte transversal A-A' del dispositivo CIDR.

Resolvimos el problema utilizando el método completamente discreto presentado y

analizado en la Sección 4.3.

En la Figura 5.4 podemos observar la distribución de droga disuelta y del área por unidad de volumen de las partículas de droga sólida, para diferentes instantes de tiempo.

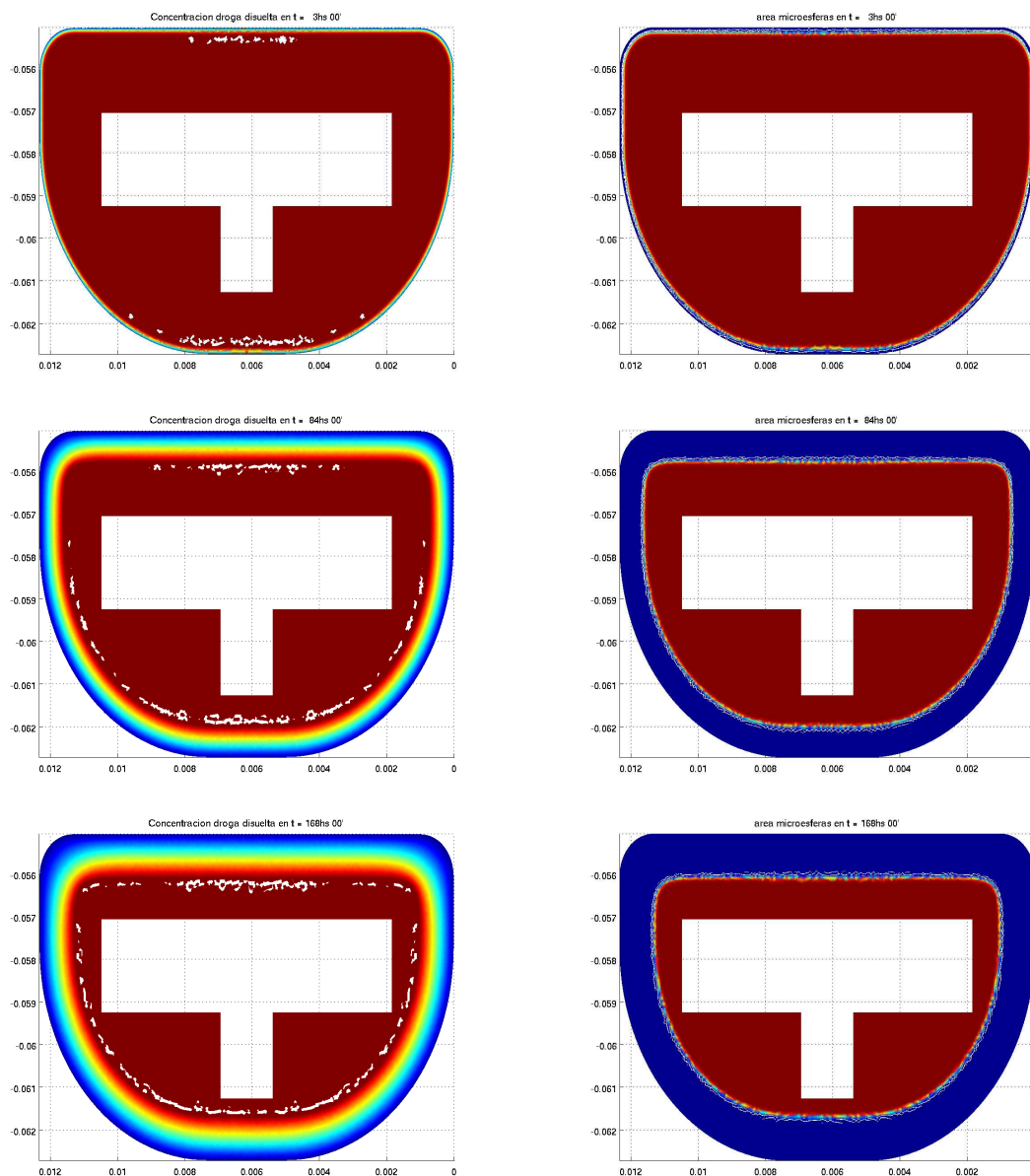


Figura 5.4: Perfil de concentración de droga disuelta (izquierda) y de área de micropartículas de droga sólida por unidad de volumen (derecha) para $t = 3hs$, $84hs$ y $168hs$.

Puede observarse que la función C es más suave que a , debido al efecto regularizante del término $D\Delta C$ en la ecuación diferencial, y también que hay un frente que separa la región donde $a(\cdot, t) = 0$ de la región donde $a(\cdot, t) > 0$. La función C es más suave, y de

manera aproximada satisface una ecuación de difusión en la región donde a se anula, con condición de borde Robin en la frontera exterior del dispositivo y condición de Dirichlet $C = C_s$ en la interfase donde a pasa de ser cero a ser positiva.

Para observar mejor estas características, en la Figura 5.5 mostramos el perfil de concentración de droga disuelta y el área de microesferas de droga sólida con gráficos en perspectiva, para $t = 84hs$ y $t = 168hs$. Allí puede verse que $C \approx C_s$ en la región donde $a > 0$ y que C parece ser solución de una ecuación de difusión en la región donde $a = 0$

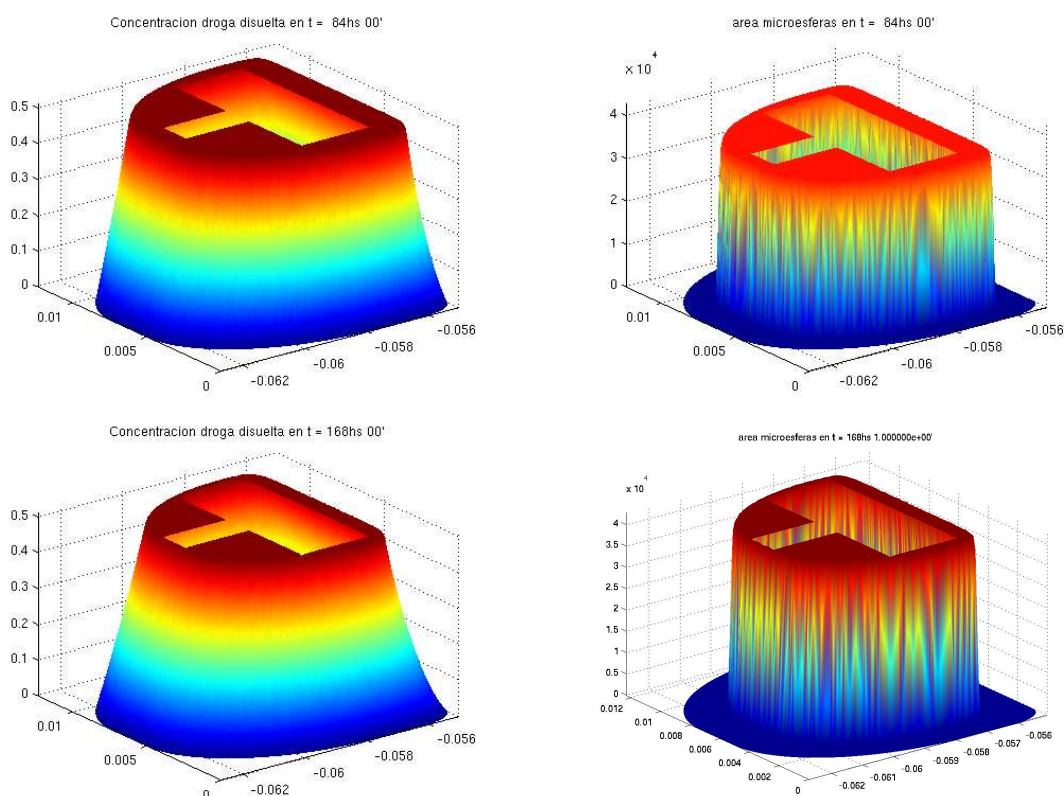


Figura 5.5: Perfil tridimensional de la concentración de droga disuelta (izquierda) y área por unidad de volumen de droga en microesferas (derecha), a tiempo $t = 84hs$ (arriba) y $t = 168hs$ (abajo). Se observa que $C \approx C_s$ en la región donde $a > 0$ y que C parece ser solución de una ecuación de difusión en la región donde $a = 0$, con condición de borde de tipo Robin en la frontera exterior.

También puede percibirse la pérdida de regularidad de la función $a(x, t)$, en comparación con la regularidad de $C(x, t)$, mantenida por el término de difusión.

Finalizamos esta sección mostrando la concentración de droga disuelta y el área de las micropartículas de droga sólida para tiempos mayores a siete días. Si bien el dispositivo

se coloca y mantiene dentro del útero de los animales por siete días, es de interés saber cuánta droga queda y en qué parte del dispositivo, a fin de optimizar su forma.

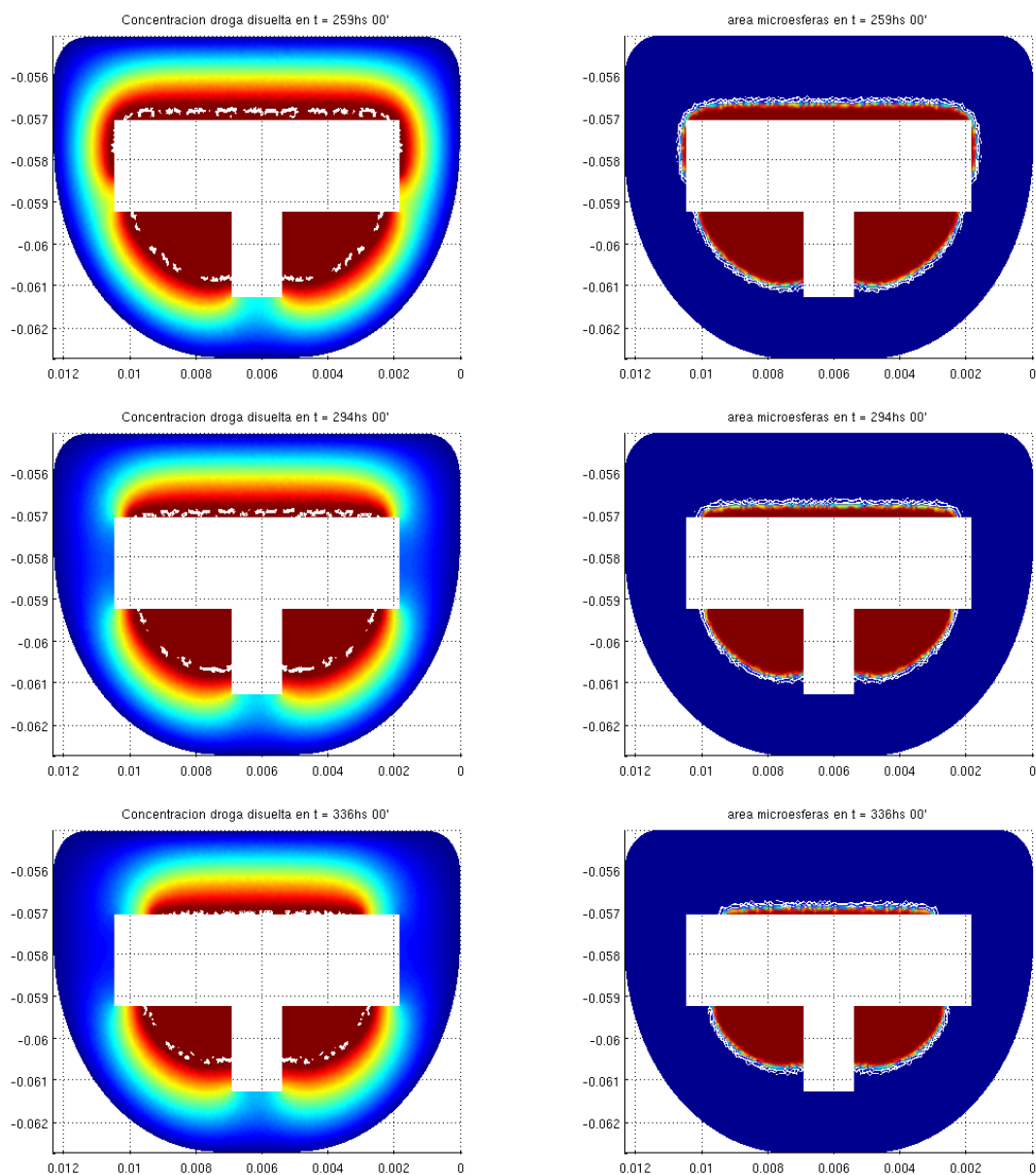


Figura 5.6: Perfil de concentración de droga disuelta (izquierda) y de área de micropartículas de droga sólida por unidad de volumen (derecha) para 259hs, 294hs y 336hs.

5.2.2. Comparación con datos experimentales

En esta sección comparamos datos obtenidos a partir de la solución numérica con mediciones experimentales. En el Grupo de Química Fina del Instituto de Desarrollo

Tecnológico para la Industria Química (INTEC–CONICET–UNL) obtuvieron mediciones de la droga liberada *in vitro* de dispositivos CIDR como el que estamos considerando. Se sumergieron los dispositivos en sendos recipientes conteniendo una solución con un 40 y un 60 por ciento de etanol en agua. Manteniendo los recipientes bien agitados, se midió la droga liberada hacia el medio hidroalcohólico después de 1, 2, 3, 4, 5, 6, 12, 24 horas, y a partir de ese momento, una vez cada 24 horas, hasta un período total de siete días.

Nosotros calculamos el total de droga liberada en el instante t a partir de la siguiente fórmula:

$$Q(t) = \text{total de droga inicial} - \text{total de droga en el tiempo } t,$$

que utilizando los parámetros del problema puede escribirse como:

$$\begin{aligned} Q(t) &= Num \times m_{0,p} - \frac{4}{3}\pi\rho_s L \int_{\Omega} \frac{(r^n)^3}{\sqrt{N}} - L \int_{\Omega} C, \\ &\approx Num \times m_{0,p} - \frac{4}{3}\pi\rho_s L \sum_{T \in \mathcal{T}} |T| \frac{(r^n|_T)^3}{\sqrt{N}}, \end{aligned}$$

donde N es la densidad de cristales por unidad de volumen y L es la longitud del dispositivo. En la última fórmula hemos descartado el término $L \int_{\Omega} C$ pues siempre es un número entre 0 y $C_s \times V \approx 0,001$ gramos, mientras que el total de droga inicial en los cristales es 1,890 gramos, así que para el cálculo de droga contenida en el dispositivo, la droga disuelta es despreciable.

En la Figura 5.7 mostramos la liberación calculada por nuestro método versus la medida experimentalmente. Los circulitos denotan las mediciones y las curvas continuas los valores calculados de droga liberada a tiempo t .

Observamos que lo calculado es aproximadamente un 15 % menor que lo medido en el experimento de laboratorio. Esto puede deberse a que hemos simplificado demasiado el problema al considerar que el dispositivo es una barra de longitud $L_0 = V/|\Omega|$, donde Ω es el dominio bidimensional que estamos utilizando para resolver. Utilizar dominios bidimensionales para el cálculo acelera considerablemente los cálculos, pues podemos resolver con muchos menos grados de libertad, sin embargo estos resultados no resultan satisfactorios.

Antes de abandonar la idea de resolver sobre dominios bidimensionales, intentamos

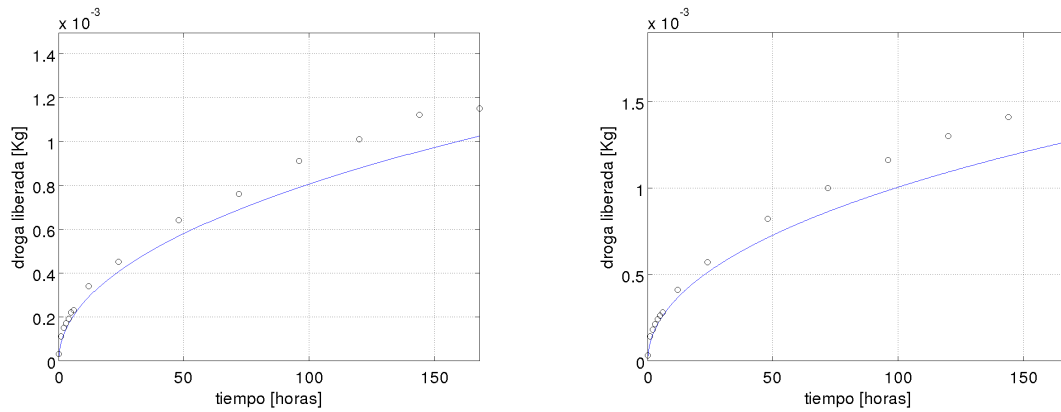


Figura 5.7: Droga liberada según la ecuación resuelta, versus medición experimental, en una solución con 40% de etanol (izquierda) y 60% (derecha) para para un dispositivo de sección transversal constante como la del corte B-B'. El método predice aproximadamente un 15% menos de liberación que las mediciones experimentales.

realizar lo mismo, pero suponiendo que todo el dispositivo tiene una sección transversal como la del corte B-B'.

5.2.3. Solución del problema con sección transversal B-B'

Consideramos ahora un dispositivo con las características materiales especificadas arriba, pero de sección constante, y longitud $L = V/B$, donde V es el volumen del dispositivo CIDR y B es el área de la sección transversal dada por el corte B-B'.

Generamos una malla de la sección transversal, utilizando el software Gmsh versión 2.5.1 con $h = 1,3209e - 04$. Obtuvimos una malla con 16.184 vértices distribuidos en 30.888 elementos, que puede verse en la Figura 5.8.

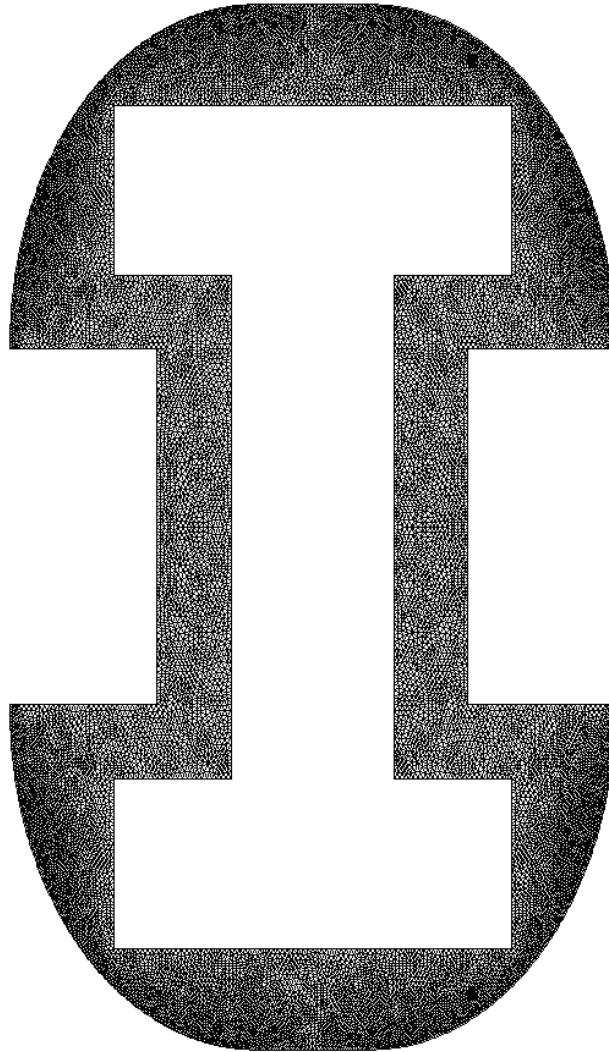


Figura 5.8: Malla de 16.184 vértices y 30.888 elementos, correspondiente a un corte transversal B-B' del dispositivo CIDR.

Resolvimos el problema utilizando el método completamente discreto presentado y analizado en la Sección 4.3.

En la Figura 5.9 podemos observar la distribución de droga disuelta y del área por unidad de volumen de las partículas de droga sólida, para diferentes instantes de tiempo.

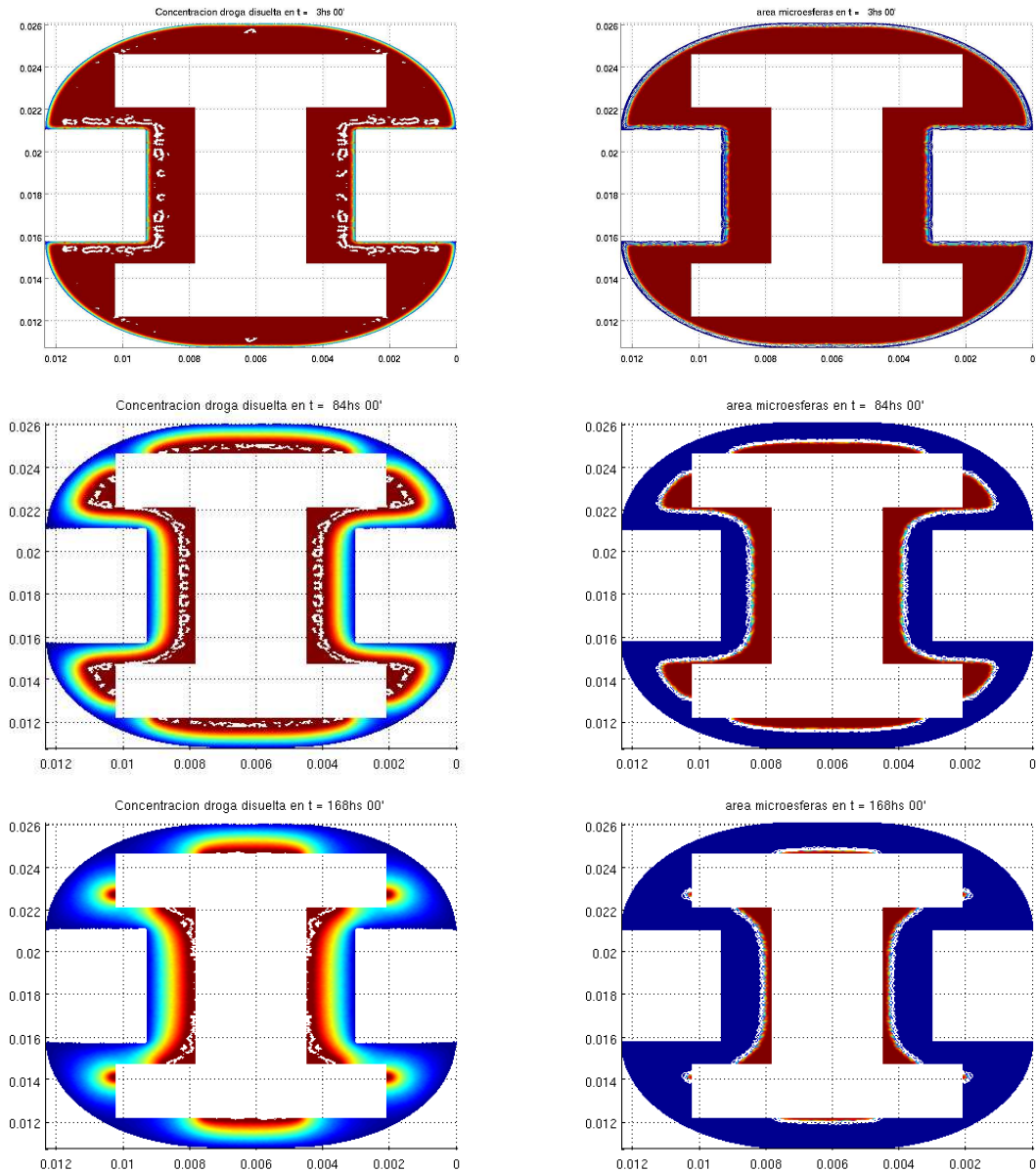


Figura 5.9: Perfil de concentración de droga disuelta (izquierda) y de área de micropartículas de droga sólida por unidad de volumen (derecha) para $t = 3\text{h}$, 84h y 168h .

5.2.4. Comparación con datos experimentales

En la Figura 5.10 mostramos la liberación calculada por nuestro método versus la medida experimentalmente, cuando ahora consideramos que el dispositivo tiene una sección transversal constante como la del corte B-B'.

Observamos que lo calculado es aproximadamente un 15% menor que lo medido en

el experimento de laboratorio. Esto puede deberse a que hemos simplificado demasiado el problema al considerar que el dispositivo es una barra de longitud $L_0 = V/|\Omega|$, donde Ω es el dominio bidimensional que estamos utilizando para resolver. Utilizar dominios bidimensionales para el cálculo acelera considerablemente los cálculos, pues podemos resolver con muchos menos grados de libertad, sin embargo estos resultados no resultan satisfactorios.

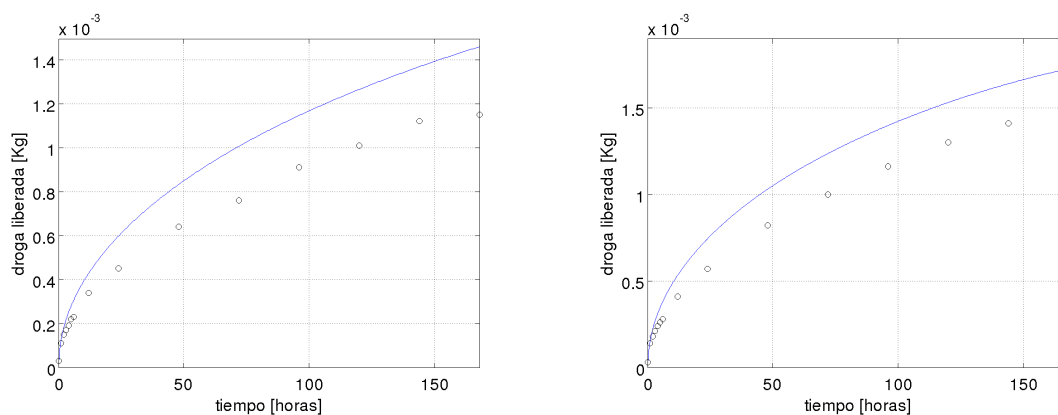


Figura 5.10: Droga liberada según la ecuación resuelta, versus medición experimental, en una solución con 40 % de etanol (izquierda) y 60 % (derecha) para un dispositivo de sección transversal constante como la del corte B-B'. El método predice aproximadamente un 25 % más de liberación que las mediciones experimentales.

Vemos que las distintas partes del dispositivo liberan a diferente velocidad, y que podría obtenerse un modelo satisfactorio suponiendo que el dispositivo está compuesto de dos piezas desconectadas, ambas de sección transversal constante, una con la forma del corte A-A' y la otra con la del corte B-B'.

5.2.5. Combinación con diferentes secciones transversales

Haciendo unas pruebas visuales, encontramos que tomando la longitud de la pieza de sección A-A' igual a 19cm y la de sección B-B' de 10,37cm se obtienen resultados altamente satisfactorios.

Más precisamente, tomando Ω_1 con la forma del corte A-A' y longitud $L_1 = 19\text{cm}$, y Ω_2 con la forma del corte B-B' y longitud $L_2 = 10,37\text{cm}$, resulta que $V = L_1|\Omega_1| + L_2|\Omega_2|$, y la suma de la liberación de las dos piezas puede observarse en la Figura 5.11, versus las mediciones experimentales.

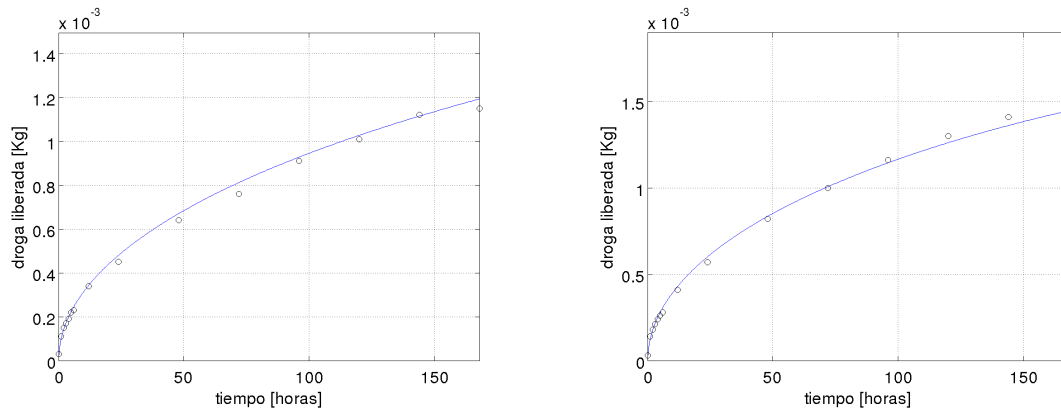


Figura 5.11: Droga liberada según la ecuación resuelta, versus medición experimental, en una solución con 40 % de etanol (izquierda) y 60 % (derecha) para un dispositivo que consta de dos partes: una de sección transversal constante como la del corte A-A' y longitud 19cm y otra de sección transversal constante como la del corte B-B' y longitud 10,37cm. El método predice muy bien la liberación en comparación con las mediciones experimentales, tan bien como la simulación realizada en tres dimensiones usando mallas de más de tres millones de elementos [DMNG].

Observamos que lo calculado de esta manera ajusta muy bien los datos medidos experimentalmente. Además, a simple vista, las curvas obtenidas lucen iguales a las obtenidas en [DMNG], donde se resuelve un problema tridimensional, sobre una malla con 3.816.762 elementos. Es interesante notar que nuestras mallas tienen entre las dos, 75.280 elementos y 39.031 vértices. El costo computacional de nuestra propuesta es significativamente menor.

Apéndice

En este capítulo resumimos algunos resultados ya conocidos del Análisis y del Análisis funcional, poniendo especial énfasis en los resultados que involucran espacios de Hilbert y Banach *espacio-temporales*.

6.1. Desigualdades

a) Desigualdad de Cauchy.

$$ab \leq \frac{a^2}{2} + \frac{b^2}{2} \quad (a, b \in \mathbb{R}). \quad (6.1)$$

b) Desigualdad de Cauchy con *epsilon*.

$$ab \leq \epsilon a^2 + \frac{b^2}{4\epsilon} \quad (a, b > 0, \epsilon > 0). \quad (6.2)$$

c) Desigualdad de Friedrich. Si Ω es un dominio de \mathbb{R}^d con frontera $\partial\Omega$ Lipschitz, entonces

$$\|v\|_{L^2(\Omega)} \leq \mathbb{C}_F (\|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|v\|_{L^2(\partial\Omega)}^2)^{1/2}, \quad \forall v \in C^1(\Omega), \quad (6.3)$$

donde \mathbb{C}_F es una constante que depende de Ω , pero es independiente de la función v considerada. Por densidad, la cota (6.3) vale para toda $v \in H^1(\Omega)$. Más aún, si Γ_B es una porción de $\partial\Omega$ con medida $d - 1$ dimensional positiva, entonces existe una constante, que seguimos llamando \mathbb{C}_F y depende de Ω y Γ_B tal que

$$\|v\|_{L^2(\Omega)} \leq \mathbb{C}_F (\|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|v\|_{L^2(\Gamma_B)}^2)^{1/2}, \quad \forall v \in C^1(\Omega), \quad (6.4)$$

d) Desigualdad general de Hölder. Sean $1 \leq p_1, \dots, p_m \leq \infty$, con $\frac{1}{p_1} + \frac{1}{p_2} + \dots + \frac{1}{p_m} = 1$,

y supongamos que $u_k \in L^{p_k}(\Omega)$ para $k = 1, \dots, m$. Luego

$$\int_{\Omega} |u_1 \dots u_m| \, dx \leq \prod_{k=1}^m \|u_k\|_{L^{p_k}(\Omega)}. \quad (6.5)$$

e) Desigualdad de Gronwall (forma diferencial). Sea $\eta(\cdot)$ una función no negativa, absolutamente continua en $[0, T]$, que satisface en casi todo punto t la desigualdad diferencial

$$\eta'(t) \leq \phi(t)\eta(t) + \psi(t),$$

donde $\phi(t)$ y $\psi(t)$ son funciones no negativas, integrables en $[0, T]$. Luego

$$\eta(t) \leq e^{\int_0^t \phi(s) \, ds} \left[\eta(0) + \int_0^t \psi(s) \, ds \right], \quad (6.6)$$

para todo $0 \leq t \leq T$.

En particular, si $\eta' \leq \phi\eta$ en $[0, T]$ y $\eta(0) = 0$, entonces $\eta \equiv 0$ en $[0, T]$.

f) Desigualdad de Gronwall (forma integral). Sea $\eta(t)$ no negativa, definida e integrable en $[0, T]$ que satisface la siguiente desigualdad integral en casi todo t de $[0, T]$:

$$\eta(t) \leq \mathbb{C}_1 \int_0^t \eta(s) \, ds + \mathbb{C}_2,$$

para $\mathbb{C}_1, \mathbb{C}_2 \geq 0$. Luego

$$\eta(t) \leq \mathbb{C}_2(1 + \mathbb{C}_1 t e^{\mathbb{C}_1 t}), \quad (6.7)$$

para casi todo t tal que $0 \leq t \leq T$.

6.2. Algunos resultados sobre Espacios de Sobolev

Teorema 6.1 (Trazas). [Gr, pág. 38] Sea Ω un subconjunto acotado y abierto de \mathbb{R}^d con frontera Lipschitz. Entonces, el mapeo $u \rightarrow \gamma u$ que está definido para $u \in C^{0,1}(\bar{\Omega})$ ¹ por $\gamma u = u|_{\partial\Omega}$, tiene una única extensión continua como un operador de $W^{1,p}(\Omega)$ en

¹ $u \in C^{m,\beta}(\bar{\Omega})$ denota una función u , m veces continuamente diferenciable en $\bar{\Omega}$ con sus derivadas de orden m Lipschitz de orden β .

$W^{1-1/p,p}(\partial\Omega)$, es decir,

$$\|\gamma u\|_{W^{1-1/p,p}(\partial\Omega)} \leq \mathbb{C}_{\text{traza}} \|u\|_{W^{1,p}(\Omega)}, \quad \forall u \in W^{1,p}(\Omega).$$

Además este operador tiene una inversa a derecha continua independiente de p .

Teorema 6.2. [Gr, pág. 24] Si Ω es un subconjunto de \mathbb{R}^d con frontera Lipschitz, entonces $C^\infty(\bar{\Omega})$ es denso en $W^{s,p}(\Omega)$ para todo $s > 0$.

Teorema 6.3 (Desigualdades generales de Sobolev). [GT, pág. 171] Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio $C^{0,1}$. Entonces,

- (I) Si $kp < d$, el espacio $W^{k,p}(\Omega)$ está continuamente inmerso en $L^{p^*}(\Omega)$, $p^* = dp/(d - kp)$, y compactamente contenido en $L^q(\Omega)$ para cualquier $q < p^*$;
- (II) Si $m \in \mathbb{Z}$ y $0 \leq m \leq k - \frac{d}{p} < m + 1$, el espacio $W^{k,p}(\Omega)$ está continuamente inmerso en $C^{m,\alpha}(\bar{\Omega})$, $\alpha = k - d/p - m$, y compactamente inmerso en $C^{m,\beta}(\bar{\Omega})$ para cualquier $\beta < \alpha$.

Teorema 6.4. [Ga, pág. 40] Sea $u \in W^{k,p}(\Omega)$ y $\zeta \in C^k(\bar{\Omega})$, luego $\zeta u \in W^{k,p}(\Omega)$ y para $|\alpha| \leq k$ vale

$$D^\alpha(\zeta u) = \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} D^\beta \zeta D^{\alpha-\beta} u, \quad \text{donde} \quad \binom{\alpha}{\beta} = \frac{\alpha!}{\beta!(\alpha-\beta)!}.$$

Proposición 6.5 (Regla del producto para derivadas débiles). $f, g \in L^\infty(\Omega) \cap H^1(\Omega)$, entonces $f \cdot g \in H^1(\Omega)$ y vale:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(f \cdot g) = g \frac{\partial}{\partial x_i} f + f \frac{\partial}{\partial x_i} g.$$

Demostración. Dada $g \in H^1(\Omega)$, por el Teorema 6.2, tenemos que existe $\{g_n\} \subset C_c^\infty(\bar{\Omega})$ tal que $g_n \rightarrow g$ en $H^1(\Omega)$. Por el Teorema 6.4, tenemos que

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_i}(f g_n) \phi = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} f \right) g_n \phi + \int_{\Omega} f \left(\frac{\partial}{\partial x_i} g_n \right) \phi,$$

luego

$$-\int_{\Omega} f g_n \frac{\partial}{\partial x_i} \phi = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} f \right) g_n \phi + \int_{\Omega} f \left(\frac{\partial}{\partial x_i} g_n \right) \phi,$$

y usando la convergencia de $g_n \rightarrow g$ en $H^1(\Omega)$ concluimos la igualdad del enunciado.

Para ver que $\frac{\partial}{\partial x_i}(f \cdot g) \in L^2(\Omega)$, hacemos

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_i}(f \cdot g) \right)^2 = \left(g \frac{\partial}{\partial x_i} f + f \frac{\partial}{\partial x_i} g \right)^2 \leq 2g^2 \left(\frac{\partial}{\partial x_i} f \right)^2 + 2f^2 \left(\frac{\partial}{\partial x_i} g \right)^2,$$

luego integrando la última desigualdad respecto de x y usando que $f, g \in L^\infty(\Omega)$, $\frac{\partial}{\partial x_i} f, \frac{\partial}{\partial x_i} g \in L^2(\Omega)$, llegamos a la conclusión de la proposición. \square

Proposición 6.6. [E, pág. 292] Sea $1 \leq p \leq \infty$ y Ω acotado. Entonces si $u \in W^{1,p}(\Omega)$, entonces u_+ y $u_- \in W^{1,p}(\Omega)$ y

$$Du_+ = \begin{cases} Du, & \text{c.t.p. en } \{u > 0\} \\ 0, & \text{c.t.p. en } \{u \leq 0\}, \end{cases}$$

$$Du_- = \begin{cases} Du, & \text{c.t.p. en } \{u < 0\} \\ 0, & \text{c.t.p. en } \{u \geq 0\}. \end{cases}$$

Teorema 6.7 (Regularidad del problema de Neumann). [Gr, pág. 92] Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio con frontera $\partial\Omega$ de clase $C^{1,1}$. Entonces, para $f \in L^2(\Omega)$ y $g \in H^1(\Omega)$ el problema

$$\begin{cases} -D\Delta u + u = f, \\ D\frac{\partial u}{\partial n} = g. \end{cases}$$

tiene una única solución débil que pertenece a $H^2(\Omega)$ y cumple

$$\|u\|_{H^2(\Omega)} \leq \mathbb{C}(\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|g\|_{H^1(\Omega)}),$$

con \mathbb{C} dependiendo de D y Ω .

6.3. Sobre funciones a valores vectoriales

Sea (E, \mathcal{A}) un espacio medible, sea $(X, \|\cdot\|)$ un espacio de Banach, y sea $\mathcal{B}(X)$ la σ -álgebra de Borel de subconjuntos de X (es decir, la σ -álgebra generada por los abiertos de X).

Definición 6.8. Una función $f : E \rightarrow X$ es Borel medible si es medible con respecto a \mathcal{A} y $\mathcal{B}(X)$, es decir, según [F, pág 43], la preimagen de todo conjunto medible en X pertenece a \mathcal{A} . Se dice que f es fuertemente medible, si es Borel medible y tiene rango separable (aquí por rango entendemos el subconjunto $f(E)$ de X). Finalmente, se dice que una función f es simple si toma un número finito de valores, i.e., si $f(E)$ es un conjunto finito.

Observemos que una función simple es fuertemente medible si y sólo si es Borel medible, y que si X es separable, toda función Borel medible es fuertemente medible.

6.3.1. Integral de Bochner

A continuación enunciaremos algunos resultados, las demostraciones faltantes o demostraciones alternativas a las aquí expuestas pueden verse en el Apéndice E de [Co].

Proposición 6.9. Sea (E, \mathcal{A}) un espacio medible y X un espacio de Banach. Luego:

- I) el conjunto de las funciones Borel medibles de E en X es cerrado bajo límites puntuales;
- II) el conjunto de las funciones fuertemente medibles de E en X es cerrado bajo límites puntuales.

es decir, si $\{f_n\}$ es una sucesión de funciones Borel medibles (resp. fuertemente medibles), y $f(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(t)$, para cada $t \in E$, entonces f es Borel medible (resp. fuertemente medible).

Proposición 6.10. Sea (E, \mathcal{A}) un espacio medible, X un espacio de Banach, y $f : E \rightarrow X$ fuertemente medible. Entonces existe una sucesión $\{f_n\}$ de funciones simples fuertemente medibles tales que $f(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(t)$ y $\|f_n(t)\| \leq \|f(t)\|$, $n = 1, 2, \dots$, para cada $t \in E$.

Corolario 6.11. Sea (E, \mathcal{A}) un espacio medible y X un espacio de Banach. Entonces el conjunto de todas las funciones fuertemente medibles de E en X es un espacio vectorial.

Definición 6.12. Sea (E, \mathcal{A}, μ) un espacio de medida y sea X un espacio de Banach. Una función $f : E \rightarrow X$ es integrable (o fuertemente integrable, o Bochner integrable) si es fuertemente medible y la función $t \rightarrow \|f(t)\|$ es integrable.

Observemos que dada $f : E \rightarrow X$ Borel medible, el mapeo $t \rightarrow \|f(t)\|$ de E en \mathbb{R} es \mathcal{A} medible, por ser composición de funciones medibles, ya que el mapeo $t \rightarrow \|t\|$ de E en \mathbb{R} es Borel medible por ser continuo.

La *integral* de las funciones integrables se define como sigue. Primero supongamos que $f : E \rightarrow X$ es simple e integrable. Sean a_1, a_2, \dots, a_n los valores no nulos de f , y supongamos que estos valores son alcanzados en los conjuntos A_1, A_2, \dots, A_n . Por la desigualdad de Chebyshev, sabemos que dado (E, \mathcal{A}, μ) un espacio de medida, y dada $g : E \rightarrow [0, \infty]$ una función \mathcal{A} -medible sobre E , vale la siguiente desigualdad:

$$\mu(\{t \in E : g(t) \geq \alpha\}) \leq \frac{1}{\alpha} \int_{\{t \in E : g(t) \geq \alpha\}} g d\mu \leq \frac{1}{\alpha} \int g d\mu$$

para $\alpha > 0$.

Luego como f es integrable, tenemos que la desigualdad anterior vale para $\|f\|$ y esto implica que cada A_i tiene medida finita bajo μ . Así la expresión $\sum_{i=1}^n a_i \mu(A_i)$ tiene sentido; y definimos la integral de f , y escribimos $\int f d\mu$, como esa suma. Es fácil ver que:

$$\text{I. } \|\int f d\mu\| \leq \int \|f\| d\mu,$$

$$\text{II. } \int (af + bg) d\mu = a \int f d\mu + b \int g d\mu,$$

para f, g funciones simples e integrables y $a, b \in \mathbb{C}$.

La integral de una función f fuertemente medible puede definirse como $\int f d\mu = \lim_{n \rightarrow \infty} \int f_n d\mu$, donde f_n es una sucesión de funciones simples medibles, que existe por la Proposición 6.10. Puede verse que la definición anterior no depende de la sucesión de funciones simples, es decir, que está bien definida.

La integral así definida cumple con las siguientes propiedades, demostradas en [Co].

Proposición 6.13. Sea (E, \mathcal{A}, μ) un espacio de medida y X un espacio de Banach. Supongamos que $f, g : E \rightarrow X$ son integrables y que a y b son números reales (o complejos). Entonces $af + bg$ es integrable, y $\int (af + bg)d\mu = a \int f d\mu + b \int g d\mu$.

Como consecuencia de la Proposición anterior tenemos que el conjunto de las funciones de E en X integrables es en realidad un espacio vectorial y lo denotaremos por $L^1(E; X)$.

Proposición 6.14. Sea (E, \mathcal{A}, μ) un espacio de medida y X un espacio de Banach. Si $f : E \rightarrow X$ es integrable, entonces $\|\int f d\mu\| \leq \int \|f\| d\mu$.

El siguiente resultado es el análogo al Teorema de Convergencia Dominada.

Teorema 6.15. Sea (E, \mathcal{A}, μ) un espacio de medida, X un espacio de Banach y $g : E \rightarrow [0, \infty]$ integrable en E . Supongamos que f y f_1, f_2, \dots son funciones fuertemente medibles X -valuadas en E y que cumplen las relaciones siguientes:

$$f(t) = \lim_n f_n(t) \quad \mu - c.t.p \quad y \quad \|f_n(t)\| \leq g(t), \quad n = 1, 2, \dots \quad \mu - c.t.p.$$

Luego

$$f \text{ y } f_1, f_2, \dots \text{ son integrables y } \int f d\mu = \lim_n \int f_n d\mu.$$

Un resultado de gran utilidad es el siguiente, cuya demostración está en [Co, Appendix E].

Proposición 6.16. Sea (E, \mathcal{A}, μ) un espacio de medida, X un espacio de Banach, y $f : E \rightarrow X$ integrable. Luego

$$\int \phi \circ f d\mu = \phi\left(\int f d\mu\right), \quad \forall \phi \in X^*.$$

Corolario 6.17. Bajo las hipótesis de la proposición anterior con $E = [a, b]$ y μ la medida de Lebesgue, si $\xi \in X$ y $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ integrable, luego $\int_a^b (f(t)\xi) dt = \int_a^b f(t) dt \xi$.

Demostración. Sea $\phi \in X^*$. Por la Proposición 6.16:

$$\phi\left(\int_a^b f(t)\xi dt\right) = \int_a^b \phi\left(f(t)\xi\right) dt = \int_a^b f(t)\phi(\xi) dt,$$

$$= \phi(\xi) \int_a^b f(t) dt = \phi\left(\int_a^b f(t) dt \xi\right).$$

Luego

$$\phi\left(\int_a^b f(t)\xi dt\right) = \phi\left(\int_a^b f(t) dt \xi\right), \quad \forall \phi \in X^*,$$

que implica la afirmación del teorema. □

Corolario 6.18. Sea $\phi \in C_c^\infty(0, T)$ y $g : [0, T] \rightarrow X$ integrable, entonces

$$\int_0^T \left(\int_0^t g(s) ds\right) \phi'(t) dt = - \int_0^T g(t) \phi(t) dt.$$

Demostración. Sea $\eta \in X^*$, luego por la Proposición 6.16, tenemos:

$$\begin{aligned} \eta\left(\int_0^T \left(\int_0^t g(s) ds\right) \phi'(t) dt\right) &= \int_0^T \eta\left(\int_0^t g(s) ds\right) \phi'(t) dt, \\ &= \int_0^T \int_0^t \eta(g(s)) ds \phi'(t) dt. \end{aligned}$$

Por la definición de función integrable, sabemos que $\int_0^T \|g(s)\| ds < \infty$, luego

$$\int_0^T |\eta(g(s))| ds \leq \|\eta\|_{X^*} \int_0^T \|g(s)\|_X ds < \infty$$

y por lo tanto $\eta(g(s)) \in L^1(0, T)$.

Definamos $G(t) = \int_0^t \eta(g(s)) ds$. Por el Teorema de Diferenciación de Lebesgue en \mathbb{R} , tenemos que $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{G(t+h) - G(t)}{h} = \eta(g(t))$ en casi todo $t \in [0, T]$.

Como $\left(\int_0^t \eta(g(s)) ds \phi(t)\right)' = \eta(g(t))\phi(t) + \int_0^t \eta(g(s)) ds \phi'(t)$ en casi todo $t \in [0, T]$, integrando ambos miembros en $(0, T)$, tenemos

$$\int_0^T \left(\int_0^t \eta(g(s)) ds \phi(t)\right)' dt = \int_0^T \eta(g(t))\phi(t) dt + \int_0^T \left(\int_0^t \eta(g(s)) ds\right) \phi'(t) dt, \quad (6.8)$$

luego

$$\eta\left(\int_0^T g(t)\phi(t) dt + \int_0^T \left(\int_0^t g(s) ds\right) \phi'(t) dt\right) = 0,$$

porque ϕ tiene soporte compacto en $(0, T)$. Como η es arbitrario, se sigue lo que queríamos probar. □

Observación 6.19. Observemos que si tomamos una $\phi \in C^\infty(0, T)$ tal que $\phi(T) = 0$, todo lo hecho en la demostración anterior sigue siendo válido hasta la ecuación (6.8). Allí, con las nuevas hipótesis sobre ϕ , sigue siendo válido

$$\int_0^T g(t)\phi(t) dt + \int_0^T \left(\int_0^t g(s) ds \right) \phi'(t) dt = 0. \quad (6.9)$$

6.3.2. Definiciones y resultados útiles

En lo que sigue consideramos $(X, \|\cdot\|)$ un espacio de Banach, 0 y $T \in \mathbb{R}$ y la medida de Lebesgue en $[0, T]$. Recordemos que habíamos definido $L^1(0, T; X)$, como el espacio vectorial de las funciones $f : [0, T] \rightarrow X$ que son integrables. Análogamente a lo que usualmente se hace en funciones a valores reales, diremos que $h : [0, T] \rightarrow X$ es una función *nula* si $\int_0^T \|h\| = 0$, es decir, si h es fuertemente medible y $h(t) = 0$ (en X), en casi todo t . Pueden definirse clases de equivalencia a través de la siguiente relación: diremos que f y g son equivalentes cada vez que $\int \|f - g\| = 0$. Observar que no se ha pedido que f y g sean integrables, sí su diferencia, pero puede verse que si además g es integrable, luego f también lo será. Luego trabajaremos con estas clases de equivalencia.

Así, diremos que f_n converge a f en $L^1(0, T; X)$, si $\int \|f_n - f\| \rightarrow 0$ cuando $n \rightarrow \infty$. Notar entonces que el límite en norma queda definido salvo funciones equivalentes.

Definición 6.20. Una función $f : [0, T] \rightarrow X$ es débilmente medible si para cada $u^* \in X^*$, el mapeo $t \rightarrow \langle u^*, f(t) \rangle$ es Lebesgue medible.

Definición 6.21. Decimos que $f : [0, T] \rightarrow X$ es de rango casi separable si existe un subconjunto $N \subset [0, T]$, con $|N| = 0$, tal que el conjunto $\{f(t) : t \in [0, T] - N\}$ es separable.

Teorema 6.22 (Pettis). [E, pág. 650] El mapeo $f : [0, T] \rightarrow X$ es fuertemente medible si y sólo si f es débilmente medible y de rango casi separable.

Definición 6.23. Sea $u \in L^1(0, T; X)$. Decimos que $v \in L^1(0, T; X)$ es la derivada débil de u y escribimos

$$u' = v$$

si

$$\int_0^T u(t)\phi'(t) dt = - \int_0^T v(t)\phi(t) dt,$$

para toda función $\phi \in C_c^\infty(0, T)$ a valores reales.

Lema 6.24. Si $v : [0, T] \rightarrow X$ integrable y $\int_0^T v(t)\psi'(t) dt = 0, \forall \psi \in C_c^\infty(0, T)$, entonces existe $\xi \in X$ tal que $v(t) = \xi$ en casi todo $t \in [0, T]$.

Demostración. Sea $\phi \in C_c^\infty(0, T)$, se puede escribir como $\phi = \lambda\phi_0 + \psi'$ con $\lambda = \int_0^T \phi(t) dt$ y $\phi_0 \in C_c^\infty(0, T)$ tal que $\int_0^T \phi_0(t) dt = 1$.

Luego $\int_0^T v(t)\phi(t) dt = \lambda \int_0^T v(t)\phi_0(t) dt + \int_0^T v(t)\psi'(t) dt$, pero el último término vale 0 por hipótesis. Entonces

$$\int_0^T v(t)\phi(t) dt = \int_0^T \phi(t) dt \int_0^T v(t)\phi_0(t) dt.$$

Resumiendo, existe $\xi \left(= \int_0^T v(t)\phi_0(t) dt \right) \in X$ tal que

$$\int_0^T (v(t) - \xi)\phi(t) dt = 0, \quad \forall \phi \in C_c^\infty(0, T).$$

Por lo tanto $v = \xi$ en casi todo $t \in [0, T]$.

En efecto, para todo $\eta \in X^*$,

$$\eta \left(\int_0^T (v(t) - \xi)\phi(t) dt \right) = \int_0^T \eta(v(t) - \xi)\phi(t) dt = 0 \quad \forall \phi \in C_c^\infty(0, T),$$

luego

$$\eta(v(t) - \xi) = 0, \text{ en casi todo } t \in [0, T] \quad \forall \eta \in X^*,$$

como el rango de v es separable, se tiene que $v(t) = \xi$ en casi todo $t \in [0, T]$. □

Definición 6.25. Llamamos $C([0, T]; X)$ al espacio que comprende todas las funciones continuas $u : [0, T] \rightarrow X$ con

$$\|u\|_{C([0, T]; X)} = \max_{0 \leq t \leq T} \|u(t)\| < \infty.$$

El siguiente lema establece un resultado fundamental para la definición de derivada en espacios de Banach. Una demostración alternativa se encuentra en [T].

Lema 6.26. *Sea X un espacio de Banach con dual X^* y sean u y g funciones pertenecientes a $L^1(0, T; X)$. Luego, las siguientes condiciones son equivalentes:*

I) *u es igual a una primitiva de la función g en casi todo punto, es decir, existe $\xi \in X$ tal que*

$$u(t) = \xi + \int_0^t g(s) \, ds, \text{ para casi todo } t \in [0, T];$$

II) *Para cada función test $\phi \in C_c^\infty(0, T)$,*

$$\int_0^T u(t)\phi'(t) \, dt = - \int_0^T g(t)\phi(t) \, dt \left(\phi' = \frac{d\phi}{dt} \right);$$

III) *Para cada $\eta \in X^*$,*

$$\frac{d}{dt}\eta(u(t)) = \eta(g(t)),$$

en el sentido de las distribuciones en $(0, T)$, es decir $\int_0^T \eta(u(t))\phi'(t) \, dt = - \int_0^T \eta(g(t))\phi(t) \, dt$, $\forall \phi \in C_c^\infty(0, T)$.

Si (i)-(iii) son satisfechas por u , entonces u es igual en casi todo punto a una función continua de $[0, T]$ en X .

Observación 6.27. El elemento $\xi \in X$ es el valor en $t = 0$ de la función continua que es igual a u en casi todo $t \in [0, T]$. Con un pequeño abuso de notación escribimos $u(0) = \xi$.

Demostración. Veamos primero que (i) implica (ii). Sea $\phi \in C_c^\infty(0, T)$. Luego

$$\int_0^T u(t)\phi'(t) \, dt = \int_0^T \xi\phi'(t) \, dt + \int_0^T \left(\int_0^t g(s) \, ds \right) \phi'(t) \, dt.$$

Luego aplicando el Corolario 6.17 y el hecho que $\int_0^T \phi'(t) \, dt = 0$, obtenemos:

$$\int_0^T u(t)\phi'(t) \, dt = \int_0^T \left(\int_0^t g(s) \, ds \right) \phi'(t) \, dt,$$

y aplicando el Corolario 6.18, obtenemos (ii).

La implicación (i) \Rightarrow (iii), es consecuencia inmediata del Corolario 6.18.

Veamos que (iii) implica (ii). Si se satisface (iii), tenemos que para $\phi \in C_c^\infty(0, T)$, tenemos:

$$\int_0^T \eta(u(t)) \phi'(t) dt = - \int_0^T \eta(g(t)) \phi(t) dt,$$

o lo que es lo mismo,

$$\eta \left(\int_0^T u(t) \phi'(t) dt + \int_0^T g(t) \phi(t) dt \right) = 0, \forall \eta \in X^*,$$

de donde se sigue (ii).

Probemos ahora que (ii) implica (i). Sabemos que vale (ii),

$$\int_0^T u(t) \phi'(t) dt = - \int_0^T g(t) \phi(t) dt \left(\phi' = \frac{d\phi}{dt} \right).$$

Por el Corolario 6.18, sabemos que la igualdad anterior también puede escribirse así:

$$\int_0^T u(t) \phi'(t) dt = \int_0^T \left(\int_0^t g(s) ds \right) \phi'(t) dt,$$

luego

$$\int_0^T \left(u(t) - \left(\int_0^t g(s) ds \right) \right) \phi'(t) dt = 0,$$

luego por el Lema 6.24, tenemos que

$$\exists \xi \in X \text{ tal que } u(t) - \int_0^t g(s) ds = \xi, \text{ en casi todo } t \in [0, T].$$

□

Definición 6.28. Llamamos $L^p(0, T; X)$, al espacio que consiste de todas las funciones $u : [0, T] \rightarrow X$ fuertemente medibles tales que

$$\|u\|_{L^p(0, T; X)} := \left(\int_0^T \|u(t)\|^p dt \right)^{1/p} < \infty,$$

para $1 \leq p < \infty$, y

$$\|u\|_{L^\infty(0, T; X)} := \sup_{0 \leq t \leq T} \|u(t)\| < \infty.$$

Definición 6.29. Sea X un espacio vectorial y $\{x_n\}$ una sucesión en X , diremos que la serie $\sum_1^\infty x_n$ es convergente a x si $\sum_1^N x_n \rightarrow x$ cuando $N \rightarrow \infty$ y diremos que es absolutamente convergente si $\sum_1^\infty \|x_n\| < \infty$.

El siguiente es un resultado muy útil para estudiar la completitud de un espacio vectorial, que se encuentra en [F].

Teorema 6.30. Un espacio vectorial normado X es completo sii toda serie absolutamente convergente en X converge.

Proposición 6.31. $L^p(0, T; X)$ es un espacio de Banach para $1 \leq p \leq \infty$.

Demostración. La demostración es análoga a la que aparece en [F, página 183] para $X = \mathbb{R}$ basándose en el Teorema 6.30 y la omitimos. \square

Proposición 6.32. $L^2(0, T; L^2(\Omega)) = L^2([0, T] \times \Omega)$.

Demostración. Veamos primero que vale $L^2([0, T] \times \Omega) \subset L^2(0, T; L^2(\Omega))$. Para ello, utilizaremos el Teorema 6.22. Sea $v \in L^2([0, T] \times \Omega)$, por Tonelli-Fubini, sabemos que $v(t, \cdot)$ y $v^2(t, \cdot)$ son medibles e integrables sobre Ω para casi todo t . Además $t \rightarrow \int_\Omega v^2(t, x) dx$ es medible e integrable sobre $[0, T]$ y $\int_0^T \int_\Omega v^2(x, t) dx dt = \int_{[0, T] \times \Omega} v^2(u) du < \infty$.

Por lo antedicho $v(t, \cdot) \in L^2(\Omega)$ para casi todo t . Para ver que $v \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$, faltaría ver que v es fuertemente medible. Dado que $L^2(\Omega)$ es separable y queremos usar 6.22, faltaría ver que v es débilmente medible. Sea $\phi \in L^2(\Omega)$, nuevamente por Tonelli-Fubini, $t \rightarrow \int_\Omega v(t, x)\phi(x) dx$ es medible Lebesgue en $[0, T]$. Luego por el Teorema 6.22, se tiene que v es fuertemente medible como función de $[0, T] \rightarrow L^2(\Omega)$.

Para ver la otra contención, tomamos una función simple $\phi \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$, es decir, $\phi(t) = \sum_{j=1}^N \chi_{E_j}(t)f_j$, donde E_j son conjuntos medibles y disjuntos en $[0, T]$ y f_j son funciones en $L^2(\Omega)$. Por definición, tenemos que para cada $t \in [0, T]$, $\phi(t)$ es una función en $L^2(\Omega)$. Llamamos $\bar{\phi}(x, t) = \phi(t)(x)$ y observamos que $\bar{\phi}$ es medible en $L^2([0, T] \times \Omega)$ ya que $\{(x, t) : \bar{\phi}(x, t) > \alpha\} = \cup_j (E_j \times \{x \in \Omega : f_j > \alpha\})$ es medible.

Sea $v \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$, usando la Proposición 6.10, tenemos que existe $\{\phi_k\}$ una sucesión de funciones simples en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$, tal que $\|\phi_k(t)\| \leq \|v(t)\|$ y $\lim_{k \rightarrow \infty} \phi_k(t) = v(t)$ para cada $t \in [0, T]$. Esto es, para cada $t \in [0, T]$, $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\phi_k(t) - v(t)\| = 0$. Además como $\|\phi_k(t)\| \leq \|v(t)\|$, podemos aplicar el teorema de la convergencia dominada para

funciones a valores reales y así podemos asegurar que $\lim_{k \rightarrow \infty} \int_0^T \|\phi_k(t) - v(t)\|^2 dt = 0$. Luego $\{\phi_k\}$ es una sucesión de Cauchy en $L^2(0, T; L^2(\Omega))$. Usando el hecho que $\{\phi_k\} \subset L^2([0, T] \times \Omega)$ tenemos que $\{\bar{\phi}_k\}$ es una sucesión de Cauchy en $L^2([0, T] \times \Omega)$, luego existe u en ese espacio tal que $\lim_{k \rightarrow \infty} \bar{\phi}_k(x, t) = u(x, t)$ y dicha función está en la misma clase de $L^2(0, T; L^2(\Omega))$ que v . En este sentido es que decimos que $L^2(0, T; L^2(\Omega)) \subset L^2([0, T] \times \Omega)$. \square

Teorema 6.33. *Si X es un espacio de Banach reflexivo y $1 < p < \infty$, entonces $L^p(0, T; X)$ es reflexivo.*

Demostración. La demostración es consecuencia del Teorema **1** de [DU, página 100]. \square

Proposición 6.34. *Para $v \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ definimos $u : [0, T] \rightarrow H^1(\Omega)$ por $u(t) = \int_0^t v(x, s) ds$. Luego $u \in L^\infty(0, T; H^1(\Omega))$ y $\frac{\partial u}{\partial x_i}(x, t) = \int_0^t \frac{\partial}{\partial x_i} v(x, s) ds$.*

Demostración. Sea $\phi \in C_c^\infty(\Omega)$, por definición de derivada débil se tiene que:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \int_0^t v(x, s) ds \frac{\partial \phi}{\partial x_i}(x) dx &= \int_0^t \int_{\Omega} v(x, s) \frac{\partial \phi}{\partial x_i}(x) dx ds, \\ &= - \int_0^t \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_i}(x, s) \phi(x) dx ds, \\ &= - \int_{\Omega} \left(\int_0^t \frac{\partial v}{\partial x_i}(x, s) ds \right) \phi(x) dx. \end{aligned}$$

luego $\frac{\partial u}{\partial x_i}(x, t) = \int_0^t \frac{\partial}{\partial x_i} v(x, s) ds$. Para t fijo,

$$\left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)} \leq \left\| \int_0^t \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)} \leq \int_0^t \left\| \frac{\partial v}{\partial x_i} \right\|_{L^2(\Omega)}.$$

\square

Lema 6.35. *Sean X_0 , X y X_1 tres espacios de Banach tales que*

$$X_0 \subset X \subset X_1,$$

la inyección de X en X_1 es continua, y la inyección de X_0 en X es compacta.

Luego para cada $\eta > 0$, existe una constante c_η dependiendo de η (y de los espacios

X_0, X y X_1) tales que:

$$\|v\|_X \leq \eta\|v\|_{X_0} + c_\eta\|v\|_{X_1}, \quad \forall v \in X_0. \quad (6.10)$$

Demostración. La prueba es por contradicción. Decir que (6.10) no es cierta es decir que existe $\eta > 0$ tal que para cada $c \in \mathbb{R}$, existe $v \in X_0$ tal que

$$\|v\|_X \geq \eta\|v\|_{X_0} + c\|v\|_{X_1},$$

Tomando $c = m$, obtenemos una sucesión de elementos $v_m \in X_0$ tal que

$$\|v_m\|_X \geq \eta\|v_m\|_{X_0} + m\|v_m\|_{X_1}.$$

Consideramos la sucesión normalizada

$$w_m = \frac{v_m}{\|v_m\|_{X_0}},$$

que satisface

$$\|w_m\|_X \geq \eta + m\|w_m\|_{X_1}, \forall m. \quad (6.11)$$

Ya que $\|w_m\|_{X_0} = 1$ y X_0 está compactamente contenido en X , la sucesión w_m está acotada en X y (6.11) muestra que

$$\|w_m\|_{X_1} \rightarrow 0, \text{ cuando } m \rightarrow \infty. \quad (6.12)$$

Además, también usando la inclusión compacta de X_0 en X , tenemos que w_m es relativamente compacta en X , luego podemos extraer una subsucesión w_μ fuertemente convergente en X . Por la inyección continua de X en X_1 y por (6.12), tenemos que el límite de w_μ debe ser 0, pero esto contradice (6.11), que implica

$$\|w_\mu\|_X \geq \eta, \quad \forall \mu.$$

□

Corolario 6.36. Sean X_0 , X y X_1 tres espacios de Banach tales que

$$X_0 \subset X \subset X_1,$$

donde las inclusiones son continuas y la inyección de X_0 en X es compacta.

Entonces para cada $\eta > 0$, existe una constante c_η dependiendo de η (y de los espacios X_0 , X y X_1) tales que:

$$\|v\|_{L^{\alpha_0}(0,T;X)} \leq \eta \|v\|_{L^{\alpha_0}(0,T;X_0)} + c_\eta \|v\|_{L^{\alpha_0}(0,T;X_1)}, \quad \forall v \in L^{\alpha_0} \text{ y } \forall 1 \leq \alpha_0 < \infty. \quad (6.13)$$

Demostración. Veamos que vale (6.13). Queremos aplicar el Lema 6.35. Por hipótesis tenemos que $X_0 \hookrightarrow X \hookrightarrow X_1$, luego, expresado en las normas de cada uno de estos espacios, tenemos que:

$$\|v\|_{X_1} \leq c_1 \|v\|_X \leq c_2 \|v\|_{X_0},$$

luego,

$$L^{\alpha_0}(0, T; X_0) \subset L^{\alpha_0}(0, T; X) \subset L^{\alpha_0}(0, T; X_1), \quad (6.14)$$

y por la desigualdad triangular aplicada a la norma $L^{\alpha_0}(0, T; \mathbb{R})$

$$\begin{aligned} \|v\|_{L^{\alpha_0}(0,T;X)} &= \left(\int_0^T \|v\|_X^{\alpha_0} \right)^{\frac{1}{\alpha_0}} \leq \left(\int_0^T \eta^{\alpha_0} \|v\|_{X_0}^{\alpha_0} \right)^{\frac{1}{\alpha_0}} + \left(\int_0^T c_\eta^{\alpha_0} \|v\|_{X_1}^{\alpha_0} \right)^{\frac{1}{\alpha_0}}, \\ &= \eta \|v\|_{L^{\alpha_0}(0,T;X_0)} + c_\eta \|v\|_{L^{\alpha_0}(0,T;X_1)}, \quad \forall v \in L^{\alpha_0}(0, T; X_0). \end{aligned}$$

□

Los espacios de Sobolev de funciones a valores vectoriales se definen de manera análoga al caso de funciones a valores reales.

Lema 6.37. Sea $\{u_k\}_{k=1}^\infty \subset H^1(0, T; L^2(\Omega))$ tal que

$$\begin{cases} u_k \rightharpoonup u \text{ en } L^2(0, T; L^2(\Omega)) \\ u'_k \rightharpoonup v \text{ en } L^2(0, T; L^2(\Omega)) \end{cases}$$

Luego $v = u'$.

Demostración. Sea $\phi \in C_c^\infty(0, T)$, por definición de derivada débil 6.23 para u_k , tenemos que:

$$\int_0^T u'_k \phi \, dt = \int_0^T u_k \phi' \, dt.$$

Sea $w \in L^2(\Omega)$, por la Proposición 6.16 y por ser $L^2(\Omega)$ reflexivo, tenemos que vale:

$$\int_0^T (u'_k, \phi w) \, dt = \int_0^T (u_k, \phi' w) \, dt.$$

Aplicamos límite en ambos lados de la igualdad y obtenemos:

$$\int_0^T (v, \phi w) \, dt = \int_0^T (u, \phi' w) \, dt.$$

Luego, aplicando nuevamente la Proposición 6.16 y la definición de derivada débil 6.23, se tiene que $v = u'$. □

Lema 6.38. [E, pág. 425] Sea H un espacio de Hilbert separable y

$$u_k \rightharpoonup u \in L^2(0, T; H).$$

Suponga además que se tiene la cota uniforme

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \|u_k(t)\| \leq \mathbb{C} \quad (k = 1, \dots),$$

para alguna constante \mathbb{C} . Luego,

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \|u(t)\| \leq \mathbb{C}.$$

Demostración. Sea $v \in H$ y $0 \leq a \leq b \leq T$. Sabemos que $F(g) = \int_a^b (v, g) \, dt$ define un funcional lineal y acotado en $L^2(a, b; H)$. Luego $F(u_k) \rightarrow F(u)$.

Además, por hipótesis se tiene que $\int_a^b (v, u_k(t)) \, dt \leq \mathbb{C} \|v\| \|b-a\|$, luego $\frac{1}{\|b-a\|} \int_a^b (\frac{v}{\|v\|}, u(t)) \, dt \leq \mathbb{C}$.

Tomando límite para $b \rightarrow a$, se tiene que

$$\left(\frac{v}{\|v\|}, u(a) \right) \leq \mathbb{C}, \quad \text{c.t. } a \in [0, T]. \quad (6.15)$$

y como

$$\|u(a)\| = \sup_{v \in H} \left(\frac{v}{\|v\|}, u(a) \right),$$

vale lo que queremos probar. \square

Teorema 6.39. Sean $V \subset H \subset V^*$ tres espacios de Hilbert, siendo V^* el dual de V . Si una función $u \in L^2(0, T; V)$ y su derivada $u' \in L^2(0, T; V^*)$, luego u es igual, salvo un conjunto de medida nula, a una función continua del $[0, T]$ en H y tenemos la siguiente igualdad, que vale en el sentido de las distribuciones en $(0, T)$:

$$\frac{d}{dt}|u|^2 = 2\langle u', u \rangle. \quad (6.16)$$

Demostración. La demostración de este teorema puede verse en [T] pág. 261. \square

Teoremas de compacidad en espacios de Banach

Sean X_0 , X y X_1 tres espacios de Banach tales que

$$X_0 \subset X \subset X_1,$$

donde las inclusiones son continuas, X_i , $i = 0, 1$ son reflexivos y la inyección de X_0 en X es compacta.

Sea $T > 0$ un número finito fijo, y sean α_0 , α_1 , dos números finitos tales que $\alpha_i > 1$, $i = 0, 1$.

Consideramos el siguiente espacio

$$\mathcal{Y} = \mathcal{Y}(0, T; \alpha_0, \alpha_1; X_0, X_1).$$

$$\mathcal{Y} = \left\{ v \in L^{\alpha_0}(0, T; X_0), v' \in L^{\alpha_1}(0, T; X_1) \right\},$$

donde v' es la derivada débil definida en 6.23. En el espacio \mathcal{Y} se define la norma:

$$\|v\|_{\mathcal{Y}} = \|v\|_{L^{\alpha_0}(0, T; X_0)} + \|v'\|_{L^{\alpha_1}(0, T; X_1)}.$$

Veamos que con esta norma, \mathcal{Y} es un espacio de Banach.

Proposición 6.40. \mathcal{Y} es un espacio de Banach reflexivo y $\mathcal{Y} \hookrightarrow \mathcal{C}(0, T; X_1)$.

Demostración. \square **\mathcal{Y} es un espacio de Banach.** Sea v_n una sucesión de Cauchy en \mathcal{Y} . Ya que $L^{\alpha_0}(0, T; X_0)$ y $L^{\alpha_1}(0, T; X_1)$ son espacios de Banach, tenemos que existen v y w tales que

$$v_n \rightarrow v \text{ en } L^{\alpha_0}(0, T; X_0) \text{ y } v'_n \rightarrow w \text{ en } L^{\alpha_1}(0, T; X_1).$$

Nos faltaría comprobar que w es la derivada débil de v . Para ello tomamos una ϕ en $C_c^\infty(0, T)$. Luego

$$\int_0^T v \phi' dt = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T v_n \phi' dt = \lim_{n \rightarrow \infty} (-1) \int_0^T v'_n \phi dt = (-1) \int_0^T w \phi dt.$$

La primera igualdad es consecuencia de

$$\begin{aligned} \left| \int_0^T v \phi' dt - \int_0^T v_n \phi' dt \right|_{X_0} &= \left| \int_0^T (v - v_n) \phi' dt \right|_{X_0} \leq \int_0^T \|v - v_n\|_{X_0} |\phi'| dt \\ &\leq \left(\int_0^T \|v - v_n\|_{X_0}^{\alpha_0} \right)^{\frac{1}{\alpha_0}} \left(\int_0^T |\phi'|^{\alpha'_0} \right)^{\frac{1}{\alpha'_0}}, \end{aligned}$$

y de la inyección continua de X_0 en X_1 , tenemos que el límite anterior vale para $\|\cdot\|_{X_1}$. De forma análoga se demuestra la validez de la última igualdad de la cadena de igualdades arriba mostrada.

\square **\mathcal{Y} es reflexivo.**

Sea v_n una sucesión acotada en \mathcal{Y} . Luego por la definición de este espacio, v_n es una sucesión acotada en $L^{\alpha_0}(0, T; X_0)$ y v'_n es una sucesión acotada en $L^{\alpha_1}(0, T; X_1)$. Por ser estos espacios reflexivos por Teorema 6.33, tenemos que existe una subsucesión v_μ , tal que

$$v_\mu \rightarrow v \text{ débilmente en } L^{\alpha_0}(0, T; X_0),$$

y

$$v'_\mu \rightarrow w \text{ débilmente en } L^{\alpha_1}(0, T; X_1).$$

Para que quede probado que \mathcal{Y} es reflexivo deberíamos mostrar que $w = v'$. Para ello usamos la tercera equivalencia del Lema(6.26), que dice que mostrar que $w = v'$ es equivalente a mostrar $\frac{d}{dt} \eta(v) = \eta(w)$, $\forall \eta \in X_1^*$ en el sentido de las distribuciones.

Tomamos un $\eta \in X_1^*$, $\phi \in C_c^\infty(0, T)$ y definimos $\ell : L^{\alpha_0}(0, T; X_0) \rightarrow \mathbb{R}$ por $\ell(v) = \int_0^T \eta(v)\phi' dt$. Claramente $\ell \in L^{\alpha_0}(0, T; X_0)^*$, pues

$$\left| \int_0^T \eta(v)\phi' dt \right| \leq \int_0^T \|\eta\|_{X_1^*} \|v\|_{X_1} |\phi'| dt \leq C \left(\int_0^T \|v\|_{X_0}^{\alpha_0} \right)^{\frac{1}{\alpha_0}} \left(\int_0^T (\|\eta\|_{X_0^*} |\phi'|)^{\alpha_0'} \right)^{\frac{1}{\alpha_0'}}.$$

Analogamente definimos $\hat{\ell}(w) = \int_0^T \eta(v)\phi dt$ para $w \in L^{\alpha_1}(0, T; X_1)$ y resulta $\hat{\ell} \in L^{\alpha_1}(0, T; X_1)^*$.

Por lo tanto

$$\begin{aligned} \int_0^T \eta(v)\phi' dt = \ell(v) &= \lim_{\mu \rightarrow \infty} \ell(v_\mu) = \lim_{\mu \rightarrow \infty} \int_0^T \eta(v)\phi' dt, = \lim_{\mu \rightarrow \infty} (-1) \int_0^T \eta(v'_\mu)\phi dt \\ &= \lim_{\mu \rightarrow \infty} (-1)\hat{\ell}(v'_\mu) = (-1)\hat{\ell}(w), = (-1) \int_0^T \eta(w)\phi dt. \end{aligned}$$

luego $w = v'$.

□ $\mathcal{Y} \hookrightarrow \mathcal{C}(0, T; X_1)$. Esta inclusión se obtiene de aplicar el teorema 2 de [página 286, [E]], tomando $p = \min\{\alpha_0, \alpha_1\}$, tenemos que dado $v \in \mathcal{Y}$, $v \in L^p(0, T, X_0)$ y $v' \in L^p(0, T, X_1)$ y de las inclusiones continuas de X_0 en X_1 , tenemos que $v \in W^{1,p}(0, T; X_1)$. Aplicando el mencionado teorema obtenemos la inclusión continua deseada. □

Observamos que $\mathcal{Y} \subset L^{\alpha_0}(0, T; X_0)$ por definición, y por la inclusión compacta de X_0 en X , tenemos que $\mathcal{Y} \subset L^{\alpha_0}(0, T; X)$. En el teorema a continuación veremos que esta inclusión en realidad es compacta.

Teorema 6.41. *Bajo las hipótesis anteriores, la inclusión de \mathcal{Y} en $L^{\alpha_0}(0, T; X)$ es compacta.*

Demostración. Sea u_m una sucesión acotada en \mathcal{Y} . Debemos probar que esta sucesión contiene una subsucesión u_μ que converge fuertemente en $L^{\alpha_0}(0, T; X)$.

Por ser \mathcal{Y} reflexivo, tenemos que existe una subsucesión u_μ con

$$u_\mu \rightarrow u \text{ débilmente en } \mathcal{Y}, \text{ cuando } \mu \rightarrow \infty,$$

esto quiere decir que

$$\begin{aligned} u_\mu &\rightarrow u \text{ débilmente en } L^{\alpha_0}(0, T; X_0), \\ u'_\mu &\rightarrow u' \text{ débilmente en } L^{\alpha_1}(0, T; X_1). \end{aligned}$$

El teorema quedará probado si mostramos que $\nu_\mu = u_\mu - u$ converge a 0 en $L^{\alpha_0}(0, T; X)$ fuertemente. Para ello, bastará mostrar que ν_μ converge a 0 en $L^{\alpha_0}(0, T; X_1)$ fuertemente. En efecto, como consecuencia del colorario del Lema 6.35, dado $\eta > 0$, $\exists c_\eta > 0$ tal que

$$\|\nu_\mu\|_{L^{\alpha_0}(0, T; X)} \leq \eta \|\nu_\mu\|_{L^{\alpha_0}(0, T; X_0)} + c_\eta \|\nu_\mu\|_{L^{\alpha_0}(0, T; X_1)},$$

y ya que la sucesión ν_μ es acotada en $\mathcal{B} \subset L^{\alpha_0}(0, T; X_0)$:

$$\|\nu_\mu\|_{L^{\alpha_0}(0, T; X)} \leq c\eta + c_\eta \|\nu_\mu\|_{L^{\alpha_0}(0, T; X_1)},$$

y luego

$$\limsup_{\mu \rightarrow \infty} \|\nu_\mu\|_{L^{\alpha_0}(0, T; X)} \leq c\eta.$$

Puesto que $\eta > 0$ es arbitrario, este límite superior es en realidad 0 y la suficiencia está probada.

Para ver que ν_μ converge a 0 en $L^{\alpha_0}(0, T; X_1)$ fuertemente observamos que de la Proposición 6.40 se sigue que:

$$\|\nu_\mu(t)\|_{X_1} \leq c, \quad \forall t \in [0, T], \quad \forall \mu.$$

De acuerdo al teorema de la convergencia dominada, tenemos que ν_μ converge a 0 en $L^{\alpha_0}(0, T; X_1)$ fuertemente si probamos que, para casi todo $t \in [0, T]$,

$$\nu_\mu(t) \rightarrow 0 \text{ fuertemente en } X_1, \quad \text{cuando } \mu \rightarrow \infty. \quad (6.17)$$

Mostraremos esta afirmación para $t = 0$, la prueba será similar para otro t . Escribimos

$$\nu_\mu(0) = \nu_\mu(t) - \int_0^t \nu'_\mu(\tau) d\tau,$$

y promediando

$$\nu_\mu(0) = \frac{1}{s} \left[\int_0^s \nu_\mu(t) dt - \int_0^s \int_0^t \nu'_\mu(\tau) d\tau dt \right].$$

Aquí

$$\nu_\mu(0) = a_\mu + b_\mu,$$

con

$$a_\mu = \frac{1}{s} \int_0^s \nu_\mu(t) dt, \quad b_\mu = -\frac{1}{s} \int_0^s \int_0^t \nu'_\mu(\tau) d\tau dt.$$

Observemos que

$$b_\mu = -\frac{1}{s} \int_0^s \int_\tau^s \nu'_\mu(\tau) dt d\tau = -\frac{1}{s} \int_0^s (s - \tau) \nu'_\mu(\tau) d\tau.$$

luego,

$$\|b_\mu\|_{X_1} \leq \frac{1}{|s|} \int_0^s |s - \tau| \|\nu'_\mu(\tau)\|_{X_1} d\tau \leq \frac{1}{|s|} |s| \int_0^s \|\nu'_\mu(\tau)\|_{X_1} d\tau \leq \int_0^s \|\nu'_\mu(\tau)\|_{X_1} d\tau.$$

Aplicando Hölder a la última integral encontrada, vemos que:

$$\|b_\mu\|_{X_1} \leq \int_0^s \|\nu'_\mu(\tau)\|_{X_1} d\tau \leq \left(\int_0^s \|\nu'_\mu(\tau)\|_{X_1}^{\alpha_1} d\tau \right)^{1/\alpha_1} \left(\int_0^s d\tau \right)^{1/\alpha'_1}.$$

Luego, como $\|\nu'_\mu\|_{L^{\alpha_1}(0,T;X_1)} \leq M$, pues ν_μ es una sucesión acotada en \mathcal{Y} por hipótesis, tenemos que dado un $\epsilon > 0$, existe s , tal que

$$\|b_\mu\|_{X_1} \leq M s^{1/\alpha'_1} \leq \epsilon/2, \quad \forall \mu.$$

Para este s fijo, observamos que, $a_\mu \rightarrow 0$ débilmente en X_0 cuando $\mu \rightarrow \infty$. En efecto, si $\ell \in X_0^*$,

$$\ell(a_\mu) = \frac{1}{s} \int_0^s \ell(\nu_\mu(t)) dt = \int_0^T \frac{1}{s} \chi_{[0,s]}(t) \ell(\nu_\mu(t)) dt = \tilde{\ell}(\nu_\mu),$$

con $\tilde{\ell}(v) = \int_0^T \frac{1}{s} \chi_{[0,s]}(t) \ell(v(t)) dt$. Como $\tilde{\ell} \in L^{\alpha_0}(0, T; X_0)^*$, tenemos que $\ell(a_\mu) \rightarrow 0$. Como $X_0 \subset\subset X$, a_μ que converge fuertemente en X y por $X \hookrightarrow X_1$, converge fuertemente a 0

en X_1 . Así, para μ lo suficientemente grande

$$\|a_\mu\|_{X_1} \leq \epsilon/2.$$

Hemos probado (6.17) para $t = 0$, el caso arbitrario es análogo. \square

A continuación presentamos un teorema de compacidad que involucra derivadas fraccionarias.

Sean X_0 , X y X_1 espacios de Hilbert con $X_0 \hookrightarrow X \hookrightarrow X_1$ y la primera inclusión compacta.

Definición 6.42. Sea $v : \mathbb{R} \rightarrow X_1$, denotamos por $\hat{v} : \mathbb{R} \rightarrow X_1$ su transformada de Fourier, definida por

$$\hat{v}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i \tau t} v(t) dt, \quad \forall \tau \in \mathbb{R}.$$

La derivada en t de orden γ de v es la transformada de Fourier inversa de $(2\pi i \tau)^\gamma \hat{v}$ o

$$\widehat{D_t^\gamma v}(\tau) = (2\pi i \tau)^\gamma \hat{v}(\tau).$$

$$\|\hat{v}(\tau)\|_{X_1} \leq \int_{-\infty}^{\infty} |e^{-2\pi i \tau t}| \|v(t)\|_{X_1} dt,$$

$$\|\hat{v}(\tau)\|_{X_1} \leq \|v\|_{L^1(\mathbb{R}, X_1)}, \quad \forall \tau.$$

Para $\gamma > 0$, definimos el espacio

$$H^\gamma(\mathbb{R}; X_0, X_1) = \{v \in L^2(\mathbb{R}; X_0), D_t^\gamma v \in L^2(\mathbb{R}; X_1)\}.$$

Esto es un espacio de Hilbert para la norma

$$\|v\|_{H^\gamma(\mathbb{R}; X_0, X_1)} = \{\|v\|_{L^2(\mathbb{R}; X_0)}^2 + \||\tau|^\gamma \hat{v}\|_{L^2(\mathbb{R}; X_1)}\}^{1/2}.$$

Asociamos con cualquier conjunto $K \subset \mathbb{R}$, el subespacio H_K^γ de H^γ definido como el conjunto de funciones u en H^γ con soporte contenido en K :

$$H_K^\gamma = \{u \in H^\gamma(\mathbb{R}; X_0, X_1), \text{ soporte de } u \subset K\}.$$

Teorema 6.43. Sean X_0, X, X_1 espacios de Hilbert con $X_0 \subset\subset X \hookrightarrow X_1$. Luego para cualquier conjunto acotado K y cualquier $\gamma > 0$, la inclusión de $H_K^\gamma(\mathbb{R}; X_0, X_1)$ en $L^2(\mathbb{R}; X)$ es compacta.

Demostración. [1] Sean γ y K fijos, y sea $\{u_m\}$ una sucesión acotada en $H_K^\gamma(\mathbb{R}; X_0, X_1)$. Debemos mostrar que u_m contiene una subsucesión fuertemente convergente en $L^2(\mathbb{R}; X)$.

Ya que $H^\gamma(\mathbb{R}; X_0, X_1)$ es un espacio de Hilbert, la sucesión u_μ contiene una subsucesión débilmente convergente en este espacio a algún elemento u . Es claro que $u \in H^\gamma$, por lo que,

$$v_\mu = u_\mu - u.$$

La sucesión v_μ es acotada en $H_K^\gamma(\mathbb{R}; X_0, X_1)$ y converge débilmente a 0 en H^γ ,

$$v_\mu \rightharpoonup 0 \text{ en } L^2(\mathbb{R}; X_0), \quad (6.18)$$

$$|\tau|^\gamma \hat{v}_\mu \rightharpoonup 0 \text{ en } L^2(\mathbb{R}; X_1).$$

El teorema quedará probado si mostramos que u_μ converge fuertemente a u en $L^2(\mathbb{R}; X)$, es decir,

$$v_\mu \rightarrow 0, \text{ en } L^2(\mathbb{R}; X). \quad (6.19)$$

[2] El segundo punto del teorema es ver que (6.19) estará probado si probamos que

$$v_\mu \rightarrow 0 \text{ en } L^2(\mathbb{R}; X_1). \quad (6.20)$$

Por el Lema 6.35,

$$\|v_\mu\|_{L^2(\mathbb{R}; X)} \leq \eta \|v_\mu\|_{L^2(\mathbb{R}; X_0)} + c_\eta \|v_\mu\|_{L^2(\mathbb{R}; X_1)}$$

y ya que v_μ es acotada en $L^2(\mathbb{R}; X_0)$,

$$\|v_\mu\|_{L^2(\mathbb{R}; X)} \leq c\eta + c_\eta \|v_\mu\|_{L^2(\mathbb{R}; X_1)}. \quad (6.21)$$

Si suponemos (6.20), haciendo $\mu \rightarrow \infty$ en (6.21), obtenemos

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \|v_\mu\|_{L^2(\mathbb{R}; X)} \leq c\eta.$$

Ya que η es arbitrario, este límite superior debe ser cero y se sigue (6.19).

□ Veamos finalmente que vale (6.20). Por la inclusión continua de X_0 en X_1 y de acuerdo al teorema de Parseval,

$$I_\mu = \int_{-\infty}^{\infty} \|v_\mu(t)\|_{X_1}^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} \|\hat{v}_\mu(\tau)\|_{X_1}^2 d\tau, \quad (6.22)$$

donde \hat{v}_μ denota la transformada de Fourier de v_μ .

Debemos mostrar que

$$I_\mu \rightarrow 0 \text{ cuando } \mu \rightarrow \infty. \quad (6.23)$$

Para ello, hacemos

$$\begin{aligned} I_\mu &= \int_{|\tau|>M} \frac{(1+|\tau|^{2\tau})}{(1+|\tau|^{2\tau})} \|\hat{v}_\mu(\tau)\|_{X_1}^2 d\tau + \int_{|\tau|\leq M} \|\hat{v}_\mu(\tau)\|_{X_1}^2 d\tau \\ &\leq \frac{C}{1+M^{2\gamma}} + \int_{|\tau|\leq M} \|\hat{v}_\mu(\tau)\|_{X_1}^2 d\tau, \end{aligned}$$

donde C existe por ser $\int_{|\tau|>M} \|\hat{v}_\mu(\tau)\|_{X_1}^2 d\tau \leq \int_{-\infty}^{\infty} \|\hat{v}_\mu(\tau)\|_{X_1}^2 d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} \|v_\mu(t)\|_{X_1}^2 dt$, v_μ es acotada en H^γ y la inclusión continua de X_0 en X_1 .

Para un $\epsilon > 0$ dado, elijo M tal que $\frac{C}{1+M^{2\gamma}} \leq \frac{\epsilon}{2}$.

Luego

$$I_\mu \leq \int_{|\tau|\leq M} \|\hat{v}_\mu(\tau)\|_{X_1}^2 d\tau + \frac{\epsilon}{2},$$

y (6.23) estará probado si, para este M fijo, mostramos que

$$J_\mu = \int_{|\tau|\leq M} \|\hat{v}_\mu(\tau)\|_{X_1}^2 d\tau \rightarrow 0 \text{ cuando } \mu \rightarrow \infty. \quad (6.24)$$

Para probar ésta última afirmación utilizaremos el teorema de la convergencia dominada 6.15.

Si χ denota la función característica de K , luego $v_\mu \chi = v_\mu$:

$$\hat{v}_\mu(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i \tau t} \chi(t) v_\mu(t) dt,$$

que a su vez implica

$$\begin{aligned} \|\hat{v}_\mu(\tau)\|_{X_1} &\leq \left\| \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i\tau t} \chi(t) v_\mu(t) dt \right\|_{X_1} \\ &\leq \int_{-\infty}^{\infty} |e^{-2\pi i\tau t} \chi(t)| \|v_\mu(t)\|_{X_1} dt \\ &\leq \|e^{-2\pi i\tau t} \chi(t)\|_{L^2(\mathbb{R})} \|v_\mu(\cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}, X_1)}, \end{aligned}$$

y finalmente

$$\|\hat{v}_\mu(\tau)\|_{X_1} \leq cte. \quad (6.25)$$

Observar que también puede obtenerse la siguiente desigualdad en forma análoga a lo hecho para la norma en X_1 :

$$\|\hat{v}_\mu(\tau)\|_{X_0} \leq cte$$

Por otro lado, para cada σ en X_0 , y cada τ fijo,

$$((\hat{v}_\mu(\tau), \sigma))_{X_0} = \int_{-\infty}^{\infty} ((v_\mu(t), e^{-2\pi i\tau t} \chi(t) \sigma))_{X_0} dt$$

donde $e^{-2\pi i\tau t} \chi(t) \sigma \in (L^2(\mathbb{R}; X_0))^*$.

Luego por (6.18), tenemos que $((\hat{v}_\mu(\tau), \sigma))_{X_0} \rightarrow 0, \forall \sigma \in X_0$. Luego la sucesión $\hat{v}_\mu(\tau)$ converge a cero débilmente en X_0 y por lo tanto fuertemente en X y en X_1 .

Con esta última observación y (6.25), el teorema de convergencia dominada implica 6.15 que $J_\mu \rightarrow 0$ cuando $\mu \rightarrow \infty$. □

Bibliografía

- [AV] D. Andreucci, C. Verdi, *Existence, uniqueness, and error estimates for a model of polymer crystallization*, Adv. Math. Sci. Appl. 5 (1995), 391–409.
- [AFPPV] D. Andreucci, A. Fasano, M. Primicerio, M. Paolini, C. Verdi, *Numerical simulation of polymer crystallization*, Math. Models Methods Appl. Sci. 4 (1994), 135–145.
- [ECDD] Encyclopedia of Controlled Drug Delivery, Volumes 1-2, John Wiley & Sons, 1999
- [BSBK] Bajpai, A. K.; Shukla, S. K.; Bhanu, S. y Kankane, S., *Responsive Polymers in Controlled Drug Delivery. Progress in Polymer Science*. Vol: 33 (11), 1088-1118 (2008).
- [B] D. Braess, *Finite elements. Theory, fast solvers, an applications in solid mechanics*, 2nd ed., Cambridge University Press, 2001.
- [BS] S.C. Brenner and L.R. Scott, *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*, Springer, 2nd edition (2002).
- [CLG] Cabrera, M.I.; Luna, J.A.; Grau R.J.A.; *Modeling of Dissolution-Diffusion Controlled Drug Release from Planar Polymeric Systems with Finite Dissolution Rate and Arbitrary Drug Loading*. Journal of Membrane Science, 280, 693-704 (2006).
- [CG] Cabrera, M.I.; Grau, R.J.A.; A Generalized Integral Method for Solving the Design Equations of Dissolution-Diffusion Controlled Drug Release from Planar, Cylindrical and Spherical Matrix Devices. Journal of Membrane Science 293, 1-14 (2007).

- [Ci] P.G. Ciarlet, *The Finite Element Method for Elliptic Problems*, North-Holland, New York, 1978.
- [CL] Earl A. Coddington, Norman Levinson *Theory of Ordinary Differential Equations*, McGraw-Hill, 1955.
- [Co] Donald L. Cohn, *Measure Theory*, Birkhäuser, 1980.
- [DU] J. Diestel and J.J. Uhl, Jr, *Vector Measures*, American Mathematical Society, 1977.
- [E] Lawrence C. Evans, *Partial Differential Equations*, American Mathematical Society, 1998.
- [F] G. Folland, *Real Analysis: Modern techniques and their Applications*, Wiley-Interscience, 1984.
- [FPW] S. Funken, D. Praetorius, P. Wissgott, *Efficient implementation of adaptive P1-FEM in MATLAB*, Comput. Methods Appl. Math. 11 (2011) 460–490.
- [Ga] Eduardo Garau, “Espacios de Sobolev”, Seminario Final de Licenciatura en Matemática, Universidad Nacional de Tucumán, 2005.
- [GT] D. Gilbarg, N.S. Trudinger, *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*, Springer-Verlag, 2001.
- [Gr] P. Grisvard, *Elliptic Problems in Nonsmooth Domains*, Pitman, 1985.
- [HILCG] Helbling, I.M.; Ibarra, J.C.D.; Luna, J.A.; Cabrera, M.I.; Grau, R.J.A.; Modeling of drug delivery from erodible and non-erodible laminated planar devices into finite external medium. *Journal of Membrane Science*, 350, 10-18 (2010).
- [JNV] X. Jiang, R.H. Nochetto, C. Verdi, *A P^1 - P^0 finite element method for a model of polymer crystallization*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 125 (1995), 303–317.
- [LT] Stig Larsson, Vidar Thomee, *Partial Differential Equations with Numerical Methods*, Springer, 2003.

- [L] Lewis, D. H.; Controlled release of bioactive agents from lactide/glycolide polymers. En: Biodegradable Polymers as Drug Delivery Systems. Chasin, M. y Langer, R. (eds.), 1-41. Marcel Dekker, Inc. New York (2008).
- [DMNG] Santiago Márquez Damián, R. Nicolás Mariano, Norberto M. Nigro, Ricardo J.A. Grau, *DEVELOPMENT AND VALIDATION OF A NUMERICAL MODEL FOR CONTROLLED INTRAVAGINAL DRUG RELEASING DEVICES*, Mecánica Computacional Vol XXX, págs. 3439-3448, 1-4 Noviembre 2011, Rosario, Argentina.
- [M] Jan Mikus'inski, The Bochner integral, Academic Press, New York, San Francisco, 1978.
- [RV] Talal Rahman, Jan Valdman, *Fast MATLAB assembly of FEM matrices in 2D and 3D: Nodal elements*, Appl. Math. Comput. 219 (2013) 7151–7158.
- [RB] Ratner, B. D.; Bryant, S. J.; Biomaterials: where we have been and where we are going. Annu Rev Biomed Eng. Vol: 6, 41–75 (2004).
- [RVP] Rojas Cortés, M.G.; Vallejo Díaz, V.M.; Perilla, J.E.; Los biopolímeros como materiales para el desarrollo de productos en aplicaciones farmacéuticas y de uso biomédico. Revista Ingeniería e Investigación. Vol: 28 (1), 57-71 (2008).
- [S] J. Simon, *Compact Sets in the Space $L^p(0, T; B)$* , Annali di Matematica pura ed applicata, IV (1987), Vol. CXLVI, pp. 65-96 .
- [T] Roger Temam, *NAVIER- STOKES EQUATIONS: THEORY AND NUMERICAL ANALYSIS*, North Holland, 1977.