UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Departamento de Matemática
Programa de pós-graduação em Matemática

André Macieira Braga Costa

ANÁLISE NÚMERICA DA EQUAÇÃO DE ALLEN-CAHN

Belo Horizonte
2019

André Macieira Braga Costa

ANÁLISE NÚMERICA DA EQUAÇÃO DE ALLEN-CAHN

Versão final

Dissertação apresentada à Banca Examinadora como exigência parcial para obtenção do título de Mestre em Matemática pela Universidade Federal de Minas Gerais.

Orientador: Prof. Dr. Henrique de Melo Versieux.

Belo Horizonte
2019

Costa, André Macieira Braga.

C837a Análise númerica da equação de Allen-Cahn [recurso eletrônico] / André Macieira Braga Costa — 2019.
1 recurso online (60 f. il, color.) : pdf.

Orientador: Henrique de Melo Versieux.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Minas Gerais, Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Matemática.
Referências: f. 59 – 60

1. Matemática – Teses. 2. Análise Numérica – Teses. 3. Método dos elementos finitos – Teses.I. Versieux , Henrique de Melo. II. Universidade Federal de Minas Gerais, Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Matemática. III.Título.

CDU 51(043)

Ficha catalográfica elaborada pela bibliotecária Belkiz Inez Rezende Costa
CRB 6/1510 Universidade Federal de Minas Gerais - ICEx

ATA DA TRECENTÉSIMA TRIGÉSIMA PRIMEIRA DEFESA DE DISSERTAÇÃO DO ALUNO ANDRÉ MACIEIRA BRAGA COSTA, REGULARMENTE MATRICULADO NO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA, DO INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS, DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS, REALIZADA NO DIA 08 DE AGOSTO DE 2019.

Aos oito dias do mês de agosto de 2019, às 14h00, na sala 3060, reuniram-se os professores abaixo relacionados, formando a Comissão Examinadora homologada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Matemática, para julgar a defesa de dissertação do aluno **André Macieira Braga Costa**, intitulada: *"Análise numérica da equação de Allen-Cahn"*, requisito final para obtenção do Grau de mestre em Matemática. Abrindo a sessão, o Senhor Presidente da Comissão, Prof. Henrique de Melo Versieux, após dar conhecimento aos presentes do teor das normas regulamentares do trabalho final, passou a palavra ao aluno para apresentação de seu trabalho. Seguiu-se a arguição pelos examinadores com a respectiva defesa do aluno. Após a defesa, os membros da banca examinadora reuniram-se sem a presença do aluno e do público, para julgamento e expedição do resultado final. Foi atribuída a seguinte indicação: o aluno foi considerado aprovado sem ressalvas e por unanimidade. O resultado final foi comunicado publicamente ao aluno pelo Senhor Presidente da Comissão. Nada mais havendo a tratar, o Presidente encerrou a reunião e lavrou a presente Ata, que será assinada por todos os membros participantes da banca examinadora. Belo Horizonte, 08 de agosto de 2019.

Henrique Versieux

PROF. DR. HENRIQUE DE MELO VERSIEUX
Orientador (UFMG)

Jean Carlos da Silva

PROF. DR. JEAN CARLOS DA SILVA
Examinador (UFMG)

Luiz Gustavo Farah Dias

PROF. DR. LUIZ GUSTAVO FARAH DIAS
Examinador (UFMG)

Agradecimento

Primeiramente gostaria de agradecer ao Prof. Henrique Versieux pelo apoio e paciência durante toda a elaboração deste trabalho e ao colega Luccas Cassimiro Campos, por diversas discussões sobre EDPs que me foram bastante úteis. Gostaria de citar também meus professores de Olimpíadas de Matemática, que me mostraram, desde os tempos de ensino fundamental, a beleza desta ciência. Não fosse por vocês, eu sequer sonharia em cursar este mestrado. Por fim, agradeço a minha família, aos meus amigos e também a Deus, por nunca me deixarem sozinho nesta díficil caminhada.

Resumo

Neste trabalho, iremos estudar a equação de Allen-Cahn $u_t = \Delta u - \epsilon^{-2} f(u)$. Começaremos analisando a boa colocação do problema de valor de fronteira induzido por esta equação, com condições de fronteira de Neumann. Também mostraremos algumas propriedades da solução, como o Princípio do Máximo. Em seguida, iremos partir para a análise numérica. Mostraremos que um esquema semi-implícito de discretização no tempo é incondicionalmente estável e apresenta um erro que cresce de forma polinomial em ϵ^{-1} desde que o passo de tempo satisfaça algumas hipóteses. Por fim, iremos introduzir uma discretização espacial por elementos finitos e mostrar que, com algumas adaptações nos argumentos, também é possível obter uma estimativa de erro com dependência polinomial em ϵ^{-1}.

Palavras-chave: Equação de Allen-Cahn, Existência e Unicidade, Análise Numérica, Método dos Elementos Finitos

Abstract

In the following thesis, we will study the Allen-Cahn equation $u_t = \Delta u - \epsilon^{-2} f(u)$. We will begin by showing the well-posedness of the boundary value problem induced by this equation with Neumann boundary conditions. In addition, we will prove that its solution satisfies a Maximum Principle and some regularity proprieties. Next, we will move to the numerical analysis and study a semi-implicit discretization in time, showing that it is unconditionally stable and that its error grows only polinomially in ϵ^{-1} if the time-step satisfies some hypothesis. Finally, we will introduce a spatial discretization, using the finite element method, and show that, with certain adaptations in the arguments, it is also possible to obtain an error estimative that depends only polinomially in ϵ^{-1}.

Key-words: Allen-Cahn Equation, Existence and Uniqueness, Numerical Analysis, Finite Element Method

Sumário

Introdução

O objetivo deste trabalho é estudar a equação de Allen-Cahn $u_t - \Delta u + \frac{1}{\epsilon^2} f(u) = 0$ (um tipo especial de equação de reação-difusão com aplicação em Ciência dos Materias) desde suas propriedades mais básicas, como a existência e unicidade de solução até os aspectos mais práticos, como a análise de erro para uma aproximação da solução por elementos finitos. Apesar de nenhum resultado deste trabalho ser original, é desconhecido ao autor uma apresentação dos mesmos com esta amplitude.

A equação de Allen-Cahn é definida como:

$$\begin{cases} u_t - \Delta u + \frac{1}{\epsilon^2} f(u) = 0 & (x,t) \in \Omega \times (0,T) \\ \dfrac{\partial u}{\partial n}|_{\partial\Omega} = 0 \\ u(x,0) = u_0 \end{cases} \tag{AC}$$

em que $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ é um conjunto aberto limitado com fronteira suave e n é o vetor normal a esta fronteira. A função $f(u) = u^3 - u$ é a derivada do potencial $F(u) = \dfrac{1}{4}(u^2 - 1)^2$, que tem mínimos em $u = \pm 1$. Essa equação aparece em diversos fenômenos de dinâmica de interfaces em ciência dos materiais, quando modelados através do método dos campos de fase. Na forma apresentada acima, por exemplo, ela modela um processo de solidificação isotérmica de um material puro. O parâmetro ϵ representa a espessura da interface e, em geral, é muito menor que as dimensões características do problema. A condição de fronteira de fluxo zero significa que não há perda de massa na fronteira do domínio. O nome desta equação refere-se aos pesquisadores Sam Allen e John Cahn, que, na década de 70, publicaram diversos artigos, como por exemplo, **[1**; **7**; **2]** estudando processos de transformação de fase em materiais, e deduziram a equação acima com base em princípios termodinâmicos.

Outra forma de ver a equação (AC) é como um fluxo gradiente do funcional de energia $\Gamma_\epsilon(u) = \int_\Omega \{\frac{1}{2}|\nabla u|^2 + \frac{1}{\epsilon^2} F(u)\} dx$ com relação ao produto interno em $L^2(\Omega)$. Também é possível mostrar que, quando $\epsilon \to 0$, a dinâmica da superfície de nível definida por $u = 0$ aproxima um fluxo de curvatura média. Estes fluxos tem uma grande importância no contexto da geometria diferencial. Veja por exemplo **[13]** e referências ali contidas.

Do ponto de vista numérico, a equação de Allen-Cahn apresenta algumas características que dificultam a obtenção de boas aproximações. Além da não-linearidade, em geral, os sistemas modelados por ela representam fenômenos em que uma interface de espessura $O(\epsilon)$ se move. Desta forma, qualquer tentativa de aproximação da solução por métodos de discretização do espaço deve utilizar sub-regiões de tamanho próximo a ϵ. Isso faz com que os passos de tempo necessários para se obter estabilidade sejam extremamente pequenos, tornando o custo computacional da aproximação altíssimo, devido tanto à quantidade de nós da malha espacial quanto ao número de passos de tempo.

Além dessas dificuldades, uma pergunta importante quando se estuda algoritmos numéricos para este problema, é como o erro de aproximação (diferença entre a solução numérica e analítica) se comporta em função de ϵ. As abordagens mais tradicionais, utilizando argumentos de perturbação e o lema de Gronwall fornecem estimativas para o erro que dependem de ϵ^{-1} exponencialmente, o que as torna pouco relevantes em quase toda aplicação prática desta equação; veja por exemplo **[3]**.

Para contornar este problema, Feng e Prohl **[14]** utilizaram uma estimativa do autovalor principal do operador de Allen-Cahn linearizado $L_{AC} := -\Delta + f'(u)I$ obtida por de Mottoni e Schatzman e Chen **[11; 8]**, e conseguiram estimativas de erro dependendo polinomialmente de ϵ^{-1}, para um esquema numérico implícito no tempo e com discretização espacial usando elementos finitos. Após este trabalho, muitos outros utilizaram-se também desta estimativa espectral para obter melhores estimativas de erro para o problema de Allen-Cahn. Por exemplo, em **[21]**, Yang obtém estimativas de erro muito similares às de Feng e Prohl, para um esquema semi-implícito de discretização no tempo. Em **[17]** Kessler, Nochetto e Schmidt obtém estimativas a posteriori.

Inicialmente, no capítulo 1, iremos estudar a boa colocação e algumas propriedades da solução de (AC). Começaremos apresentando a formulação fraca da equação (AC) e mostrando a existência de uma solução para ela. Em seguida, mostraremos que, sob algumas condições razoáveis, esta solução é única e satisfaz um Princípio do Máximo. Ainda ao final do capítulo, provaremos alguns resultados de regularidade que serão importantes para a subsequente análise numérica.

Nos capítulos seguintes, iremos focar na análise de erro para o esquema semi-implícito de discretização no tempo, seguindo o artigo de Yang **[21]**. Primeiramente, no capítulo 2, vamos demonstrar diversas estimativas de energia, apresentar o esquema de discretização no tempo e provar alguns resultados preliminares do mesmo. Em seguida, no capítulo 3, vamos mostrar como obter uma estimativa para o erro que depende polinomialmente de ϵ^{-1}, utilizando a desigualdade espectral de De Mottoni, Schatzman e Chen.

Já no capítulo 4, vamos introduzir uma discretização espacial por elementos finitos e realizar uma análise de erro da mesma, bastante semelhante à do capítulo 3, obtendo novamente estimativas de erro com dependência polinomial em ϵ^{-1} para o erro. No final, teremos um apêndice, com uma lista de teoremas e resultados importantes que serão utilizados neste trabalho.

Capítulo 1

Propriedades Analíticas

1.1 Considerações Iniciais

Neste capítulo, iremos apresentar uma demonstração da existência de solução para a formulação fraca do problema de Allen-Cahn (AC). Para esta demonstração, utilizaremos o método de Faedo-Galerkin, que consiste em procurar por funções que satisfaçam o problema fraco em subespaços de dimensão finita do espaço de Sobolev onde o problema é formulado. A partir destas soluções, tenta-se obter estimativas a priori que possam garantir a convergência fraca de alguma subsequência destas funções para uma solução do problema.

Após a prova da existência, ainda provaremos alguns resultados sobre a regularidade da solução e mostraremos que ela é única e satisfaz o Princípio do Máximo. Estes resultados serão importantes para as análises que faremos nos capítulos seguintes.

1.2 Existência da Solução

É bastante comum no estudo das Equações Diferenciais Parcias (EDPs), trabalhar-se com a formulação fraca de uma EDP ao invés de sua forma forte. Para o problema de Allen-Cahn, a forma forte é a descrita em (AC). Porém, no que segue, vamos estudar a solução fraca para este problema, que definimos da seguinte forma:

Dado $u_0 \in H^1(\Omega)$, dizemos que u é uma solução fraca do problema de Allen-Cahn (AC) se $u \in L^2(0,T;H^1(\Omega))$, $u_t \in L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))$ e, para todo $v \in H^1(\Omega)$

$$\begin{cases} \langle u_t, v\rangle + (\nabla u, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u), v) = 0, \quad \text{q.t.p. em } (0,T), \\ u(x,0) = u_0. \end{cases} \tag{1.1}$$

Em que $\langle\cdot,\cdot\rangle$ e $(\cdot,\cdot)$ denotam a dualidade entre $H^1(\Omega)$ e $H^{-1}(\Omega)$ e o produto interno em $L^2(\Omega)$(ou $L^2(\Omega)^2$) respectivamente. Daqui em diante, para simplificar as notações, iremos omitir o domínio. Ou seja, usaremos L^2 ao invés de $L^2(\Omega)$ e H^1 ao invés de $H^1(\Omega)$. A derivada u_t é definida através da noção de derivação fraca em espaços de Sobolev. Para uma explicação mais detalhada sobre espaços de Sobolev envolvendo tempo, recomendamos a leitura dos livros **[12]** e **[19]**.

Agora que temos bem definida a noção de solução fraca, vamos mostrar a existência dela.

Teorema 1. Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um conjunto com fronteira suave, $u_0 \in H^1$, e $T > 0$. Então existe $u \in L^2(0, T; H^1)$, com $u_t \in L^2(0, T; H^{-1})$ tal que, para todo $v \in H^1$, vale:

$$\langle u_t, v\rangle + (\nabla u, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u), v) = 0, \quad \text{q.t.p. em } (0, T),$$

e $u(x, 0) = u_0$

Vamos dividir a prova deste teorema em várias partes. Na primeira, vamos mostrar a existência de uma sequência de funções que satisfaz a forma fraca **1.1** em espaços de dimensão crescente, mas finita. Nesta parte precisaremos utilizar o teorema de Picard-Lindelof para garantir a existência local destas funções. Na segunda parte, iremos obter estimativas para estas funções em diversas normas. Como consequência disso, iremos garantir a existência global delas e também a existência de subsequências fracamente convergentes em certos espaços. Por fim, na terceira parte, iremos utilizar o teorema de compacidade de Aubin e Lions para mostrar que o limite fraco dessas subsequências é uma solução fraca para o problema.

Demonstração: Parte I: Inicialmente, vamos escolher os subespaços de dimensão finita onde iremos procurar aproximações para a solução.

Sejam $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ as autofunções do Laplaciano em Ω, normalizadas com relação a norma L^2, com condições de fronteira de Neumman zero. Ou seja,

$$\begin{cases} \Delta\phi_k = \lambda_k \phi_k, & \text{em } \Omega, \\ \dfrac{\partial \phi_k}{\partial n}|_{\partial\Omega} = 0, \\ \|\phi_k\|_0 = 1. \end{cases} \qquad \mathbf{1.2}$$

para todo $k = 1, 2, 3...$

Proposição 1. As seguintes propriedades são válidas:

(i) $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ é uma base ortonormal de L^2 e ortogonal de H^1.

(ii) $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ são funções em $C^\infty(\Omega)$

(iii) $0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3...$

Para uma demonstração destas propriedades, o leitor pode consultar por exemplo **[12]**.

De posse desta base, construímos os seguintes espaços de dimensão finita, para $N = 1, 2, 3...$

$$V_N = \text{span}\ \{\phi_1, \phi_2, ..., \phi_N\}.$$

Claramente,

$$V_N \subset V_{N+1} \ \text{ e } \ \overline{\bigcup_{N\in\mathbb{N}} V_N} = L^2.$$

Em que o fecho é tomada em relação à topologia induzida pela norma L^2.

Fixando N, vamos procurar aproximações para a solução do nosso problema no espaço V_N. Ou seja, queremos uma função u_N que satisfaça:

$$u_N = \sum_{j=1}^{N} c_j(t)\phi_j, \tag{1.3}$$

e,

$$\begin{cases} \langle (u_N)_t, v\rangle + (\nabla u_N, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u_N), v) = 0, \quad q.t.p.\ em\ (0, T), \\ u_N(x, 0) = \sum_{k=1}^{N}(u_0, \phi_k)\phi_k. \end{cases} \tag{1.4}$$

para todo $v \in V_N$.

Como V_N tem dimensão finita, basta que a equação **1.4** seja válida apenas para os elementos da base (pois ela é linear em v), portanto, basta que u_N satisfaça, para $k = 1, 2, ..., N$:

$$\langle (u_N)_t, \phi_k\rangle + (\nabla u_N, \nabla \phi_k) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u_N), \phi_k) = 0, \qquad q.t.p.\ em\ (0, T). \tag{1.5}$$

além é claro, da condição inicial $u_N(x, 0) = \sum_{k=1}^{N}(u_0, \phi_k)\phi_k$.

Substituindo **1.3** em **1.5**, obtemos as seguintes equações para os coeficientes $c_k(t)$:

$$\langle \sum_{j=1}^{N} c_j'(t)\phi_j, \phi_k\rangle + (\nabla \sum_{j=1}^{N} c_j(t)\phi_j, \nabla\phi_k) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(\sum_{j=1}^{N} c_j(t)\phi_j), \phi_k) = 0, \quad q.t.p.\ em\ (0, T). \tag{1.6}$$

que podemos simplificar, obtendo, para $k = 1, 2, ..., N$,

$$c_k'(t) - \lambda_k c_k(t) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(\sum_{j=1}^{N} c_j(t)\phi_j), \phi_k) = 0, \qquad q.t.p.\ em\ (0,T). \qquad \mathbf{1.7}$$

Definindo $C(t) = (c_1(t), c_2(t), ..., c_N(t))$, essa equação pode ser escrita como

$$C'(t) = G(C(t)), \qquad \text{q.t.p. em } (0,T). \qquad \mathbf{1.8}$$

em que

$$G(C(t)) = \begin{pmatrix} \lambda_1 c_1(t) - \frac{1}{\epsilon^2}(f(\sum_{k=1}^{N} c_k(t)\phi_k), \phi_1) \\ \lambda_2 c_2(t) - \frac{1}{\epsilon^2}(f(\sum_{k=1}^{N} c_k(t)\phi_k), \phi_2) \\ : \\ : \\ \lambda_N c_N(t) - \frac{1}{\epsilon^2}(f(\sum_{k=1}^{N} c_k(t)\phi_k), \phi_N) \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{1.9}$$

é uma função em $C^\infty(\mathbb{R}^N; \mathbb{R}^N)$.

Desta forma, pelo teorema de Picard-Lindelof (teorema **9**, enunciado no Apêndice), o problema de valor inicial

$$\begin{cases} C'(t) = G(C(t)), \\ C(0) = ((u_0, \phi_1), (u_0, \phi_2), ..., (u_0, \phi_N)). \end{cases} \qquad \mathbf{1.10}$$

Admite uma solução $C(t)$ num intervalo $(0, \alpha_N)$.

Portanto, reconstruindo a função u_N a partir dos coeficientes $c_k(t)$ podemos dizer que, em $(0, \alpha_N)$, existe $u_N = \sum_{k=1}^{N} c_k(t)\phi_k$ tal que:

$$\begin{cases} ((u_N)_t, v) + (\nabla u_N, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u_N), v) = 0, \quad em\ (0, \alpha_N), \\ u_N(x, 0) = \sum_{k=1}^{N} (u_0, \phi_k)\phi_k, \end{cases} \qquad \mathbf{1.11}$$

para todo $v \in V_N$.

Perceba que, como é conhecido que a solução de uma equação diferencial ordinária (EDO) como **1.10**, é suave, podemos garantir que **1.11** vale em todo intervalo $(0, \alpha_N)$ (não só q.t.p.) e que a dualidade $\langle (u_N)_t, v \rangle$ pode ser trocada pelo produto interno $((u_N)_t, v)$.

É um fato conhecido da teoria de EDOs que, se (t_1, t_2) é o intervalo maximal onde existe uma solução ψ para uma EDO que satisfaz as condições do teorema de Picard-Lindelof, então, ou $\lim_{t \to t_2} \psi(t) = \pm\infty$ ou a solução é global. Portanto, se mostrarmos que a função u_N que obtemos acima é limitada, teremos como consequência que, para todo N, podemos tomar $\alpha_N = T$.

É isto que faremos na próxima parte.

Parte II: Sabendo que, para todo $N = 1, 2, 3...$ existe u_N satisfazendo **1.11**, vamos desenvolver algumas estimativas a priori para diversas normas de u_N. Além destas estimativas serem úteis para provar a existência global das funções u_N, elas também servirão para garantir a existência de subsequências de $\{u_N\}_{N=1}^{\infty}$ que convergem fracamente para uma função u que será nossa candidata a solução do problema original.

Para obter estas estimativas, para N arbitrário, começamos fazendo $v = u_N(t)$ em **1.11** (pode-se fazer isto pois $u_N(t) \in V_N$ para todo t onde u_N está definida) e chegamos a

$$((u_N)_t(t), u_N(t)) + (\nabla u_N(t), \nabla u_N(t)) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u_N(t)), u_N(t)) = 0.$$

Simplificando, e usando a definição de f, obtemos

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|u_N(t)\|_0^2 + \|\nabla u_N(t)\|_0^2 + \frac{1}{\epsilon^2}\int_\Omega u_N(t)^4 dx = \frac{1}{\epsilon^2}\|u_N(t)\|_0^2. \qquad \mathbf{1.12}$$

Donde concluímos que

$$\frac{d}{dt}\|u_N(t)\|_0^2 \leq \frac{2}{\epsilon^2}\|u_N(t)\|_0^2.$$

De posse desta desigualdade, podemos utilizar o lema de Gronwall (teorema **11**, enunciado no Apêndice) e obter a seguinte desigualdade para $\|u_N(t)\|_0$

$$\|u_N(t)\|_0^2 \leq \|u_N(0)\|_0^2 \exp(\frac{2t}{\epsilon^2}) \leq \|u_0\|_0^2 \exp(\frac{2T}{\epsilon^2}) \qquad \mathbf{1.13}$$

Como $\|u_N(t)\|_0^2 = \sum_{i=1}^N c_i^2(t)$, a desigualdade **1.13** nos dá uma estimativa a priori global para as funções $c_i(t)$, o que nos garante a existência de solução global para **1.4**.

Além disso, devido a esta desigualdade, concluímos que $u_N \in L^\infty(0, T; L^2)$.

De posse desta cota para $\|u_N(t)\|_0^2$, podemos aplicá-la no lado direito de **1.12** e integrar ambos lados de 0 a T, para obter

$$\frac{1}{2}(\|u_N(T)\|_0^2 - \|u_N(0)\|_0^2) + \int_0^T \|\nabla u_N(t)\|_0^2\, dt + \frac{1}{\epsilon^2}\int_0^T \|u_N(t)\|_{L^4}^4\, dt \leq \frac{T}{\epsilon^2}\|u_0\|_0^2 \exp(\frac{2T}{\epsilon^2}). \qquad \mathbf{1.14}$$

Donde concluímos que:

$$\int_0^T \|\nabla u_N(t)\|_0^2 \, dt \leq c(\epsilon, T)\|u_0\|_0^2, \tag{1.15}$$

e,

$$\int_0^T \|u_N(t)\|_{L^4}^4 \, dt \leq c(\epsilon, T)\|u_0\|_0^2. \tag{1.16}$$

Como já sabemos que $\|u_N(t)\|_0^2$ é limitada, segue de **1.15** que $\int_0^T \|u_N(t)\|_{H^1}^2$ também é limitada. Portanto, $\{u_N\}_{N=1}^\infty$ é limitada em $L^2(0,T;H^1)$. Além disso, por **1.16**, $\{u_N\}_{N=1}^\infty$ é limitada também em $L^4(0,T;L^4(\Omega)) = L^4([0,T]\times\Omega)$.

Vamos agora tentar obter alguma estimativa para a norma da derivada temporal de u_N. Para isto, façamos $v = (u_N)_t(t)$ em **1.11**, o que nos dá:

$$\|(u_N)_t\|_0^2 + \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\|\nabla u_N\|_0^2 + \frac{1}{\epsilon^2}\int_\Omega F(u_N)dx\right) = 0, \quad \text{em} \quad (0,T). \tag{1.17}$$

Integrando a equação acima de 0 a s ($s \in [0,T]$ arbitrário), obtemos

$$\int_0^s \|(u_N)_t(t)\|_0^2 \, dt + \frac{1}{2}\|\nabla u_N(s)\|_0^2 + \frac{1}{\epsilon^2}\int_\Omega F(u_N(s))dx = \frac{1}{2}\|\nabla u_N(0)\|_0^2 + \frac{1}{\epsilon^2}\int_\Omega F(u_N(0))dx. \tag{1.18}$$

Perceba agora que, pela escolha dos espaços V_N, temos que $u_N(0) \to u_0$ fortemente em L^2. Todavia, utilizando a definição das funções ϕ_k, não é difícil provar que, para uma função $\psi \in H^1$, suas projeções com relação aos produtos internos de L^2 e de H^1 em V_N coincidem. Portanto, podemos afirmar que $u_N(0) \to u_0$ fortemente em H^1.

Em primeiro lugar, isso nos garante que $\|\nabla u_N(0)\|_0^2 \leq \|u_0\|_{H^1}^2$. Além disso, como estamos em dimensão dois, $H^1 \subset\subset L^p(\Omega), \quad \forall p < \infty$ ($\subset\subset$ significa imersão compacta). Portanto, $F(u_N(0))$ converge fortemente para $F(u_0)$ em qualquer espaço $L^p(\Omega), p < \infty$, pois a função F é um polinômio. Em particular, isto implica que $\int_\Omega F(u_N(0)) \leq C\int_\Omega F(u_0)$.

Desta forma, é possível chegar na seguinte desigualdade:

$$\int_0^s \|(u_N)_t(t)\|_0^2 \, dt + \frac{1}{2}\|\nabla u_N(s)\|_0^2 + \frac{1}{\epsilon^2}\int_\Omega F(u_N(s))dx \leq \|u_0\|_{H^1} + \frac{C}{\epsilon^2}\int_\Omega F(u_0)dx. \tag{1.19}$$

Portanto, como $F(u_N(s)) \geq 0$ (pela definição de F), segue que

$$\|\nabla u_N(s)\|_0^2 \leq \|u_0\|_{H^1} + \frac{C}{\epsilon^2}\int_\Omega F(u_0)dx, \quad \forall s \in [0,T], \tag{1.20}$$

e, fazendo $s = T$ em **1.19**:

$$\int_0^T \|(u_N)_t(t)\|_0^2 \, dt \leq \|u_0\|_{H^1} + \frac{C}{\epsilon^2}\int_\Omega F(u_0)dx. \qquad \mathbf{1.21}$$

Logo, $\{(u_N)_t\}_{N=1}^\infty$ é limitada em $L^2(0,T;L^2)$ e $\{u_N\}_{N=1}^\infty$ é limitada em $L^\infty(0,T;H^1)$.

Vamos agora agrupar os resultados que temos.

Por **1.15**, **1.16** e **1.20**, a sequência de funções $\{u_N\}_{N=1}^\infty$ é limitada nos espaços: $L^2(0,T;H^1)$, $L^4(0,T;L^4(\Omega))$, e $L^\infty(0,T;H^1)$. Como os dois primeiros são reflexivos, segue, do teorema de Banach-Alaoglu que essa sequência terá um subsequência fracamente convergente nestes espaços. Denotando por $\{u_m\}_{m=1}^\infty$ esta subsequência, temos então que

$$u_m \to u \text{ fracamente em } \quad L^2(0,T;H^1) \text{ e } L^4(0,T;L^4(\Omega)). \qquad \mathbf{1.22}$$

Também teremos a seguinte convergência

$$u_m \to u \text{ na topologia fraca-estrela de } \quad L^\infty(0,T;H^1). \qquad \mathbf{1.23}$$

Além disso, temos que, por **1.21**, $\{(u_N)_t\}_{N=1}^\infty$ é limitada em $L^2(0,T;L^2)$, e, como este espaço também é reflexivo, tomando outra subsequência, temos que existe uma função $\hat{u} \in L^2(0,T;L^2)$ tal que

$$(u_m)_t \to \hat{u} \text{ fracamente em } \quad L^2(0,T;L^2) \qquad \mathbf{1.24}$$

Usando a definição da derivada fraca, é fácil ver que $\hat{u} = u_t$.

Esta função u definida por estes limites fracos é a nossa candidata a solução fraca do problema de Allen-Cahn. Se este problema fosse linear, seria bastante simples mostrar que de fato, u é uma solução da equação fraca. Todavia, a não-linearidade torna essa passagem muito mais complicada, uma vez que não é óbvio que

$$\lim_{m\to\infty}(f(u_m(t)), v) = (f(u(t)), v), \quad \text{para todo } \ v \in H^1. \qquad \mathbf{1.25}$$

A prova deste resultado é a parte mais importante que ainda nos falta fazer e será tratada na parte III, com o auxílio do seguinte resultado de compacidade de Aubin e Lions.

Lema 1. (Aubin e Lions, 1963) Sejam X_0, X e X_1 espaços de Banach, com $X_0 \subseteq X \subseteq X_1$. Suponha que X_0 esteja compactamente imerso em X e que X esteja continuamente imerso em X_1. Dados $1 \leq p, q \leq \infty$, defina:

$$W = \{u \in L^p(0,T;X_0) | u_t \in L^q(0,T;X_1)\}.$$

Tem-se então que:

(i) Se $p < \infty$, a imersão de W em $L^p(0,T;X)$ é compacta.

(ii) Se $p = \infty$ e $q > 1$, a imersão de W em $C(0,T;X)$ é compacta.

Para uma prova deste resultado, o leitor é convidado a consultar **[20]**.

Parte III: Nesta terceira parte, vamos utilizar o lema acima para mostrar que a função u, definida por **1.22** é de fato a solução que procuramos.

Primeiramente, vamos aplicar o lema de Aubin e Lions com $X_0 = H^1$, $X = X_1 = L^2$, e $p = q = 2$.

Desta forma, temos que $W_1 = \{u \in L^2(0,T;H^1)|u_t \in L^2(0,T;L^2)\}$ está imerso compactamente em $L^2(0,T,L^2)$, portanto, a partir da convergência fraca de $\{u_m\}_{m=1}^{\infty}$ para u, que tínhamos em W_1, podemos garantir a convergência forte desta sequência em $L^2(0,T,L^2)$ e esta convergência forte nos garante (a menos de subsequência) convergência q.t.p. em $(0,T) \times \Omega$.

Portanto,

$$u_m \to u \text{ fortemente em } \quad L^2(0,T;L^2) = L^2([0,T]\times\Omega) \text{ e q.t.p em } (0,T)\times\Omega. \quad \mathbf{1.26}$$

Além disso, considerando $W_2 = \{u \in L^\infty(0,T;H^1)|u_t \in L^2(0,T;L^2)\}$, podemos usar a segunda parte do lema **1** e **1.23** para obter mais uma convergência forte

$$u_m \to u \text{ fortemente em } \quad C(0,T;L^2). \quad \mathbf{1.27}$$

Porém, estes resultados ainda não são suficientes para completarmos a prova. Precisaremos de mais um último lema da teoria da medida.

Lema 2. Seja $1 < p < \infty$ um número real e $\{g_m\}_{m=1}^{\infty}$ uma sequência de funções mensuráveis num espaço de medida (X, A, μ). Se a sequência $\{\|g_m\|_{L^p}\}_{m=1}^{\infty}$ for limitada e $g_m \to g$ μ-q.t.p em X, então $g_m \to g$ fracamente em $L^p(X)$.

Para uma prova deste lema, o leitor pode consultar por exemplo a página 207 do livro **[15]**.

O uso deste lema nos garante uma convergência importante no nosso problema. Para usá-lo, note que $f(u_m) = u_m^3 - u_m$, donde concluímos que

$$\|f(u_m)\|_{L^{\frac{4}{3}}([0,T]\times\Omega)} = \left(\int_{[0,T]\times\Omega} |u_m^3 - u_m|^{\frac{4}{3}} dx\right)^{\frac{3}{4}} \le 2^{\frac{1}{4}} \left(\int_{[0,T]\times\Omega} |u_m^3|^{\frac{4}{3}} + |u_m|^{\frac{4}{3}} dx\right)^{\frac{3}{4}}. \quad \mathbf{1.28}$$

Portanto,

$$\|f(u_m)\|_{L^{\frac{4}{3}}([0,T]\times\Omega)} \leq C(\|u_m\|^3_{L^4([0,T]\times\Omega)} + \|u_m\|_{L^{\frac{4}{3}}([0,T]\times\Omega)}). \qquad \mathbf{1.29}$$

Lembrando agora que, por **1.16**, $\|u_m\|_{L^4([0,T]\times\Omega)}$ é limitada e, como o conjunto Ω é finito, $\|u_m\|_{L^{\frac{4}{3}}([0,T]\times\Omega)}$ também será limitada. Portanto, concluímos que a sequência $\{\|f(u_m)\|_{L^{\frac{4}{3}}}\}_{m=1}^{\infty}$ é limitada. Além disso, como $u_m \to u$ q.t.p em $(0,T)\times\Omega$, segue que $f(u_m) \to f(u)$ q.t.p em $(0,T)\times\Omega$. Desta forma, a sequência de funções $\{f(u_m)\}_{m=1}^{\infty}$ satisfaz as hipóteses do lema **2**, e como consequência, temos que $f(u_m) \to f(u)$ fracamente em $L^{\frac{4}{3}}(([0,T]\times\Omega))$.

Isto significa que

$$\lim_{N\to\infty} \epsilon^{-2} \int_{[0,T]\times\Omega} f(u_N)v \; dxdt = \epsilon^{-2} \int_{[0,T]\times\Omega} f(u)v \; dxdt, \quad \forall v \in L^4([0,T]\times\Omega). \qquad \mathbf{1.30}$$

Além disso, por **1.22** e **1.24**, temos que

$$\lim_{N\to\infty} \int_0^T (\nabla u_N, \nabla v)dt = \int_0^T (\nabla u, \nabla v)dt, \quad \forall v \in L^2(0,T;H^1),$$

$$\lim_{N\to\infty} \int_0^T ((u_N)_t, v)dt = \int_0^T (u_t, v)dt, \quad \forall v \in L^2(0,T;H^1).$$

Somando estes três limites e lembrando que $L^4(0,T;H^1) \subset L^2(0,T;H^1) \cap L^4(0,T;L^4(\Omega))$, segue que, para todo $v \in L^4(0,T;H^1)$,

$$\lim_{N\to\infty} \int_0^T \left[((u_N)_t, v) + (\nabla u_N, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}\langle f(u_N), v\rangle)\right] dt = \int_0^T \left[(u_t, v) + (\nabla u, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}\langle f(u), v\rangle\right] dt$$

em que $\langle\cdot,\cdot\rangle$ denota a dualidade entre $L^{\frac{4}{3}}(\Omega)$ e $L^4(\Omega)$.

Defina agora o espaço $\mathcal{W}_N = \{w = \sum_{k=1}^N \alpha_k(t)\phi_k \mid \alpha_k \in C^\infty([0,T])\}$. Claramente $\mathcal{W}_N \subset L^4(0,T;H^1)$, e, portanto, se $v \in \mathcal{W}_N$, então existe N_0 tal que, se $N > N_0$, vale, para cada $t \in [0,T]$

$$((u_N)_t(t), v(t)) + (\nabla u_N(t), \nabla v(t)) + \frac{1}{\epsilon^2}\langle f(u_N(t)), v(t)\rangle = 0.$$

Segue que, se $v \in \mathcal{W}_N$, então,

$$\lim_{N\to\infty}\int_0^T \left[((u_N)_t, v) + (\nabla u_N, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}\langle f(u_N), v\rangle\right] dt$$
$$= \int_0^T \left[(u_t, v) + (\nabla u, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}\langle f(u), v\rangle\right] dt = 0.$$

Mas, como $\mathcal{W}_N$ é denso em $L^4(0,T;H^1)$, podemos concluir que, para todo $v \in L^4(0,T;H^1)$,

$$\int_0^T \left[(u_t, v) + (\nabla u, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}\langle f(u), v\rangle\right] dt = 0. \qquad \mathbf{1.31}$$

O último passo é mostrar que, para quase todo $t \in [0,T]$ e $\forall v \in H^1$

$$(u_t(t), v) + (\nabla u(t), \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u(t)), v) = 0. \qquad \mathbf{1.32}$$

Para isso, vamos supor por absurdo que exista um conjunto $A \subset [0,T]$, de medida positiva e uma função $\widetilde{v} \in H^1$, tais que **1.32** não seja válido. Neste caso, poderemos decompor A em dois conjuntos disjuntos A_1 e A_2, tais que

$$\begin{aligned} &(u_t(t), v) + (\nabla u(t), \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u(t)), v) > 0, \quad \text{em} A_1, \\ &(u_t(t), v) + (\nabla u(t), \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u(t)), v) < 0, \quad \text{em} A_2. \end{aligned} \qquad \mathbf{1.33}$$

Certamente, um destes conjuntos terá medida positiva. Suponhamos, sem perda de generalidade que seja A_1. Defina então

$$\begin{cases} v_A(t) = \widetilde{v} \ \text{ se } \ t \in A_1, \\ v_A(t) = 0 \ \text{ caso contrário.} \end{cases} \qquad \mathbf{1.34}$$

Claramente, $v_A \in L^4(0,T;H^1)$, portanto podemos fazer $v = v_A$ em **1.31**, e obter

$$\int_{A_1} \left[(u_t, v_A) + (\nabla u, \nabla v_A) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u), v_A)\right] dt = 0 \qquad \mathbf{1.35}$$

O que é um absurdo, pois $(u_t(t), v) + (\nabla u(t), \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u(t)), v) > 0$ em A_1 e $\mu(A_1) > 0$. Isso prova **1.32**.

Finalmente, para concluir a prova do teorema **1**, basta provar que $u(0,x) = u_0$, mas isto segue diretamente de **1.27**.

Observação: Note que provamos que a função u_t está em $L^2(0,T;L^2)$, o que é um pouco mais forte que a hipótese do teorema, que afirma que u_t está em $L^2(0,T;H^{-1})$. Isto aconteceu porque, na verdade, o teorema é válido mesmo se $u_0 \in L^2$, e, como usamos $u_0 \in H^1$ como hipótese, ganhamos um pouco mais de regularidade.

1.3 Unicidade e Princípio do Máximo

Após provarmos a existência de uma solução fraca para o problema de Allen-Cahn, uma pergunta natural é quanto a unicidade desta solução. Nesta seção, vamos mostrar que, desde que nossa condição inicial u_0 satisfaça $|u_0(x)| \leq 1$ q.t.p em Ω, teremos de fato a unicidade da solução. Um subproduto desta prova será o Princípio do Máximo, que diz que, $u(t,x) \leq 1$ q.t.p em $[0,T] \times \Omega$.

Vamos começar enunciando precisamente o teorema que iremos provar:

Teorema 2. (Príncipio do Máximo e Unicidade) Se u é uma solução fraca do problema de Allen-Cahn e $|u_0(x)| \leq 1$ q.t.p em Ω, então $u(t,x) \leq 1$ q.t.p em $[0,T] \times \Omega$. Sob esta condição, u é uma solução única.

Demonstração: A prova aqui é bem mais simples do que a da seção anterior. Primeiramente, mostramos que dada um solução qualquer u, podemos construir a partir dela uma solução $\widetilde{u}$, que satisfaz o Princípio do Máximo. Depois, usando que f é monótona em $(-\infty,-1)$ e $(1,\infty)$ obtemos uma desigualdade interessante para a diferença $u - \widetilde{u}$, a partir da qual podemos concluir que $u = \widetilde{u}$. Isto facilita bastante a prova da unicidade, pois poderemos tomar uma limitação uniforme para a função f, já que ela só irá agir no intervalo $[-1,1]$. Com isso, e mais uma outra aplicação do lema de Gronwall, poderemos concluir a prova.

Vamos então a prova. Seja $\widetilde{u}$ a função obtida truncando u no intervalo $[-1,1]$. Ou seja,

$$\widetilde{u} = \min\{1, \max\{-1, u(t,x)\}\}. \qquad \textbf{1.36}$$

Não é díficil ver que $\widetilde{u}$ satisfaz as propriedades de regularidade de u provadas no teorema **1**. Ou seja, $\widetilde{u} \in L^2(0,T;H^1)$ e $\widetilde{u}_t \in L^2(0,T;L^2)$. Além disso, temos que

$$\widetilde{u}_t = u_t, \quad \nabla\widetilde{u} = \nabla u \ \text{ e } \ f(\widetilde{u}) = f(u) \quad \text{em} \quad \{(t,x) \in [0,T] \times \Omega \ : \ u(t,x) < 1\}. \qquad \textbf{1.37}$$

e, pelo lema de Stampacchia (teorema **12**, enunciado no Apêndice)

$$\widetilde{u}_t = 0, \quad \nabla\widetilde{u} = 0 \ \text{ e } \ f(\widetilde{u}) = 0 \quad \text{caso contrário.} \qquad \textbf{1.38}$$

Desta forma, fica fácil ver que $\widetilde{u}$ é também uma solução fraca do problema de Allen-Cahn. Portanto, valem,

$$(u_t, v) + (\nabla u, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u), v) = 0, \qquad \mathbf{1.39}$$

$$(\widetilde{u}_t, v) + (\nabla \widetilde{u}, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(\widetilde{u}), v) = 0, \qquad \mathbf{1.40}$$

Subtraindo estas equações, concluímos que a diferença $\delta = u - \widetilde{u}$ satisfaz,

$$(\delta_t, v) + (\nabla \delta, \nabla v) = -\frac{1}{\epsilon^2}(f(u) - f(\widetilde{u}), v). \qquad \mathbf{1.41}$$

Perceba que, caso obtenhamos uma forma de cotar o último termo da equação **1.41** com alguma função que só dependa de δ, poderemos utilizar esta equação para obter estimativas para δ. Para isto, vamos utilizar a convexidade da função f. Observe que, se $\widetilde{u} \neq u$, então, $u \geq 1$ ou $u \leq -1$. No primeiro caso, como f é convexa em $[1, \infty]$, vale

$$f(u) - f(\widetilde{u}) \geq f'(\widetilde{u})(u - \widetilde{u}) = f'(1)(u - \widetilde{u}) = 2(u - \widetilde{u}). \qquad \mathbf{1.42}$$

No outro, como f é concâva em $[-\infty, -1]$,

$$f(u) - f(\widetilde{u}) \leq f'(\widetilde{u})(u - \widetilde{u}) = f'(-1)(u - \widetilde{u}) = 2(u - \widetilde{u}). \qquad \mathbf{1.43}$$

Multiplicando ambas desigualdades por $u - \widetilde{u}$, concluímos que

$$(f(u) - f(\widetilde{u}))(u - \widetilde{u}) \geq 2|u - \widetilde{u}|^2, \quad \text{q.t.p em } [0, T] \times \Omega. \qquad \mathbf{1.44}$$

De posse desta desigualdade, vamos testar **1.41** com $v = \delta$, de modo a obter

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|\delta\|_0^2 + \|\nabla \delta\|_0^2 \leq -\frac{2}{\epsilon^2}\|\delta\|_0^2. \qquad \mathbf{1.45}$$

Lembrando que $\delta(0) = 0$, fica fácil de ver que $\delta = 0$, q.t.p em $[0, T] \times \Omega$.

Portanto, $u = \widetilde{u}$, q.t.p em $[0, T] \times \Omega$, o que concluí a prova do Princípio do Máximo.

Para provar a unicidade, considere duas soluções u_1 e u_2. Pelo Princípio do Máximo, podemos supor que $|u_1|, |u_2| \leq 1$ q.t.p em $[0, T] \times \Omega$.

Seja $c_f = \sup_{s \in [-1,1]} |f'(s)|$. Temos então que

$$|f(u_1) - f(u_2)| \leq c_f |u_1 - u_2|, \quad \text{q.t.p. em } [0, T] \times \Omega. \qquad \mathbf{1.46}$$

Além disso, a diferença $\widetilde{\delta} = u_1 - u_2$ satisfaz

$$(\widetilde{\delta}_t, v) + (\nabla\widetilde{\delta}, \nabla v) = -\frac{1}{\epsilon^2}(f(u_1) - f(u_2), v). \qquad \mathbf{1.47}$$

Testando com $v = \widetilde{\delta}$ e utilizando **1.46**, concluímos que

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|\delta\|_0^2 + \|\nabla\delta\|_0^2 \leq \frac{c_f}{\epsilon^2}\|\delta\|_0^2. \qquad \mathbf{1.48}$$

Lembrando que $\widetilde{\delta}(0) = 0$ e aplicando o lema de Gronwall, obtemos que $u_1 = u_2$, q.t.p em $[0,T] \times \Omega$. Isto conclui a prova da unicidade.

É importante ressaltar aqui, que, apesar da hipótese $|u_0| \leq 1$ parecer um pouco restritiva, na prática, ela não é. Na maioria dos sistemas modelados através da equação de Allen-Cahn, a variável u representa um parâmetro que indica a fase ou a concentração de um composto, e apenas valores entre -1 e 1 possuem sentido físico.

1.4 Regularidade

Para a análise de erro que faremos nos capítulos seguintes, precisaremos de alguns resultados mais fortes sobre a regularidade da solução fraca do problema de Allen-Cahn. Para isso, precisaremos fortalecer um pouco a hipótese do teorema **1**. Vamos pedir que a condição inicial u_0 esteja em $H^2(\Omega)$. Com isso, poderemos provar que $u \in L^2(0,T;H^2(\Omega))$, $u_t \in L^2(0,T;H^1)$, e $u_{tt} \in L^2(0,T;H^{-1})$ (note que, na formulação fraca original **1.1**, sequer sabíamos da existência da segunda derivada no tempo de u). Após isto, vamos mostrar que, com uma hipótese adicional sobre o comportamento das funções $\nabla(u_N)_t$ na vizinhança da condição inicial, é possível mostrar também que $u_t \in L^2(0,T;H^2(\Omega))$ e $u_{tt} \in L^2(0,T;L^2(\Omega))$.

Para provar estes resultados, precisaremos de outras estimativas para as normas das funções u_N, diferentes de **1.15**, **1.16** e **1.21**. A ordem em que provamos estes resultados é bastante importante, pois o primeiro é útil para provar o segundo e ambos são importantes para provar o terceiro. Uma propriedade essencial para a obtenção destas estimativas é que as funções u_N estão em $C^\infty((0,T) \times \Omega)$, pois as funções ϕ_N estão em $C^\infty(\Omega)$ por **1.2** e as funções c_N estão em $C^\infty(0,T)$, pois são soluções de uma EDO suave.

Teorema 3. Considere as mesmas hipóteses do teorema **1**, porém, suponha que $u_0 \in H^2(\Omega)$, e $\|u_0\|_{L^\infty} \leq 1$. Então, além das conclusões do teorema **1**, também valem:

(i) $u \in L^2(0,T;H^2(\Omega))$,

(ii) $u_t \in L^2(0,T;H^1)$,

(iii) $u_{tt} \in L^2(0,T;H^{-1})$.

Demonstração: Para obter as estimativas que precisamos, comece testando **1.4** com $v = \Delta u_N$

$$((u_N)_t(t), \Delta u_N(t)) + (\nabla u_N(t), \nabla(\Delta u_N(t))) + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u_N(t)), \Delta u_N(t)) = 0, \quad \text{em } (0,T). \tag{1.49}$$

Utilizando integração por partes,

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|\nabla u_N(t)\|_0^2 - \|\Delta u_N(t)\|_0^2 - \frac{1}{\epsilon^2}(f'(u_N(t))\nabla u_N(t), \nabla u_N(t)) = 0, \tag{1.50}$$

usando agora que $f'(u) = 3u^2 - 1$, segue que,

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|\nabla u_N(t)\|_0^2 + \frac{1}{\epsilon^2}\|\nabla u_N(t)\|_0^2 = \|\Delta u_N(t)\|_0^2 + \frac{3}{\epsilon^2}\|u_N(t)\nabla u_N(t)\|_0^2. \tag{1.51}$$

Integrando na variável temporal, de 0 a T, obtemos a seguinte desigualdade

$$\int_0^T \|\Delta u_N(t)\|_0^2 \, dt \leq \|\nabla u_N(T)\|_0^2 - \|\nabla u_N(0)\|_0^2 + \frac{1}{\epsilon^2}\int_0^T \|\nabla u_N(t)\|_0^2 \, dt, \tag{1.52}$$

e, por **1.20**, $u_N \in L^\infty(0,T;H^1)$. Então, podemos concluir que $(u_N)_{N=1}^\infty$ é limitada em $L^2(0,T;H^2(\Omega))$, uma vez $\|u_N\|_{H^2} \leq C(\|\Delta u_N\|_0 + \|u_N\|_0)$. (Este último resultado segue da teoria de regularidade dos operadores elípticos. Para mais detalhes, veja por exemplo **[19]**).

Para provar (ii), tome a derivada no tempo de **1.4** e teste com $v = (u_N)_t$,

$$((u_N)_{tt}(t), (u_N)_t(t)) + (\nabla(u_N)_t(t), \nabla(u_N)_t(t)) + \frac{1}{\epsilon^2}(f'(u_N(t))(u_N)_t(t), (u_N)_t(t)) = 0, \quad \text{em } (0,T).$$

Utilizando integração por partes,

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|(u_N)_t(t)\|_0^2 + \|\nabla(u_N)_t(t)\|_0^2 + \frac{1}{\epsilon^2}(f'(u_N(t))(u_N)_t(t), (u_N)_t(t)) = 0,$$

donde concluímos que

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|(u_N)_t(t)\|_0^2 + \|\nabla(u_N)_t(t)\|_0^2 + \frac{3}{\epsilon^2}\|(u_N)_t(t)u_N(t)\|_0^2 = \frac{1}{\epsilon^2}\|(u_N)_t(t)\|_0^2. \tag{1.53}$$

Aplicando o lema de Gronwall, não é difícil mostrar que, para qualquer $t \in (0, T]$,

$$\|(u_N)_t(t)\|_0^2 \leq C \lim_{t \to 0^+} \|(u_N)_t(t)\|_0^2 \qquad \mathbf{1.54}$$

Observe agora que, testando **1.4** com $v = (u_N)_t$, fazendo uma integração por partes e usando a desigualdade de Schwartz, obtemos,

$$\begin{aligned}\|(u_N)_t(t)\|_0^2 &= (\Delta u_N(t) - \epsilon^{-2} f(u_N(t)), (u_N)_t(t)) \\ &\leq \frac{1}{\epsilon^4}\|\Delta u_N(t)\|_0^2 + \frac{1}{\epsilon^4}\|f(u_N(t))\|_0^2 + \frac{1}{2}\|(u_N)_t(t)\|_0^2. \qquad \mathbf{1.55}\end{aligned}$$

Portanto, fazendo $t \to 0^+$ e usando a regularidade H^2 de u_0,

$$\lim_{t \to 0^+} \|(u_N)_t(t)\|_0^2 \leq C_1 \epsilon^{-4}(\|u_0\|_{H^2} + \|f(u_0)\|_0^2) \qquad \mathbf{1.56}$$

Agora, integrando **1.53** de 0 a T, podemos obter a seguinte desigualdade

$$\int_0^T \|\nabla (u_N)_t(t)\|_0^2 \, dt \leq CC_1 \epsilon^{-4}(\|u_0\|_{H^2} + \|f(u_0)\|_0^2) + \frac{1}{\epsilon^2}\int_0^T \|(u_N)_t(t)\|_0^2 \, dt. \qquad \mathbf{1.57}$$

Donde podemos usar **1.21** para concluir que $((u_N)_t)_{N=1}^{\infty}$ é limitada em $L^2(0, T; H^1)$. Note também que, por **1.54** e **1.56**, segue que $((u_N)_t)_{N=1}^{\infty}$ é limitada em $L^{\infty}(0, T; L^2)$.

Para (iii), vamos usar novamente a derivada temporal de **1.4**

$$((u_N)_{tt}, v) + (\nabla (u_N)_t, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}(f'(u_N)(u_N)_t, v) = 0, \quad \text{em } (0, T). \qquad \mathbf{1.58}$$

Integrando no tempo de 0 a T, chegamos a,

$$\int_0^T ((u_N)_{tt}, v) dt = -\int_0^T (\nabla (u_N)_t, \nabla v) dt - \frac{1}{\epsilon^2}\int_0^T (f'(u_N)(u_N)_t, v) dt. \qquad \mathbf{1.59}$$

Usando a desigualdade de Holder para estimar o primeiro termo do lado direito, segue que

$$\int_0^T ((u_N)_{tt}, v) dt \leq \|(u_N)_t\|_{L^2(0,T;H^1)}\|v\|_{L^2(0,T;H^1)} + \frac{1}{\epsilon^2}\|f'(u_N)\|_0 \|(u_N)_t\|_{L^4}\|v\|_{L^4}. \qquad \mathbf{1.60}$$

Observe agora que $f'(u_N) = 3u_N^2 - 1$, portanto, como $u_N \in L^\infty(0,T;H^1)$, segue que $f'(u_N) \in L^\infty(0,T;L^1)$, e portanto,

$$\begin{aligned}\int_0^T (f'(u_N)(u_N)_t, v)dt &\leq \|f'(u_N)\|_{L^\infty(0,T;L^1)} \int_0^T ((u_N)_t, v)dt \\ &\leq \|f'(u_N)\|_{L^\infty(0,T;L^1)} \|(u_N)_t\|_{L^2(0,T;L^2)} \|v\|_{L^2(0,T;L^2)} \qquad \textbf{1.61}\end{aligned}$$

de onde segue que,

$$\begin{aligned}\int_0^T ((u_N)_{tt}(t), v)dt \leq{}& \|(u_N)_t\|_{L^2(0,T;H^1)} \|v\|_{L^2(0,T;H^1)} \\ &+ \epsilon^{-2} \|f'(u_N)\|_{L^\infty(0,T;L^1)} \|(u_N)_t\|_{L^2(0,T;L^2)} \|v\|_{L^2(0,T;L^2)}. \qquad \textbf{1.62}\end{aligned}$$

Portanto, $((u_N)_{tt})_{N=1}^\infty$ é limitada em $L^2(0,T;H^{-1})$.

De posse destas estimativas, basta tomar limites fracos nos espaços $L^2(0,T;H^2(\Omega))$, $L^2(0,T;H^1)$ e $L^2(0,T;H^{-1})$ para provar (i), (ii) e (iii) respectivamente.

Uma observação interessante que podemos fazer agora é que, com estes resultados de regularidade, fica fácil de ver, considerando igualdades do ponto de vista de L^2, que u é de fato uma solução forte (considerando a equivalência em L^2) para o problema de Allen-Cahn (observe que u satisfaz a condição de contorno pois todas u_N satisfazem).

Além disso, não é difícil mostrar, usando as mesmas ideias que usamos na parte final da prova do teorema **1**, que para todo $v \in H^1$ e para quase todo $t \in [0,T]$:

$$\langle u_{tt}, v\rangle + (\nabla u_t, \nabla v) + \frac{1}{\epsilon^2}(f'(u)u_t, v) = 0. \qquad \textbf{1.63}$$

Este resultado basicamente diz que podemos derivar a forma fraca **1.1** na variável tempo.

Para concluir o capítulo, vamos mostrar que, adicionando uma hipótese de regularidade adicional para u_0, é possível melhorar ainda mais a regularidade da solução, garantindo que $u_t \in L^2(0,T;H^2(\Omega))$ e $u_{tt} \in L^2(0,T;L^2)$.

Teorema 4. Considere as mesmas hipóteses do teorema **3** e suponha, adicionalmente que $u_0 \in H^3(\Omega)$. Então, valem:

(i) $u_{tt} \in L^2(0,T;L^2)$,

(ii) $u_t \in L^2(0,T;H^2(\Omega))$.

Demonstração:

Por fim, para provar (i), primeiramente, teste **1.4** com $v = (u_N)_{ttt}$. Após algumas integrações por partes chegamos a

$$\|(u_N)_{tt}(t)\|_0^2 + \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|\nabla(u_N)_t(t)\|_0^2 = -\frac{1}{\epsilon^2}(f'(u_N(t))(u_N)_t(t), (u_N)_{tt}(t)). \qquad \mathbf{1.64}$$

Aplicando a desigualdade de Schwartz no último termo, temos que

$$\|(u_N)_{tt}(t)\|_0^2 + \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|\nabla(u_N)_t(t)\|_0^2 \leq \frac{1}{\epsilon^4}\|f'(u_N(t))(u_N)_t(t)\|_0^2 + \frac{1}{2}\|(u_N)_{tt}(t)\|_0^2. \qquad \mathbf{1.65}$$

Integrando de 0 a T, e fazendo algumas simplificações, obtemos

$$\int_0^T \|(u_N)_{tt}(t)\|_0^2 \, dt \leq \|\nabla(u_N)_t(0)\|_0^2 + \frac{2}{\epsilon^4}\int_0^T \|f'(u_N(t))(u_N)_t(t)\|_0^2 dt \qquad \mathbf{1.66}$$

Como $u_N \in L^\infty(0,T;H^1)$ e $H^1 \subset\subset L^p$, segue que $3u_N^2 - 1 = f'(u_N) \in L^\infty(0,T;L^2)$. Portanto,

$$\int_0^T \|f'(u_N(t))(u_N)_t(t)\|_0^2 dt \leq \|f'(u_N(t))\|^2_{L^\infty(0,T;L^2)}\|(u_N)_t(t)\|^2_{L^2(0,T;L^2)}$$

Desta forma,

$$\int_0^T \|(u_N)_{tt}(t)\|_0^2 \, dt \leq \|\nabla(u_N)_t(0)\|_0^2 + \frac{2}{\epsilon^4}\|f'(u_N(t))\|^2_{L^\infty(0,T;L^2)}\|(u_N)_t(t)\|^2_{L^2(0,T;L^2)} \qquad \mathbf{1.67}$$

Vamos olhar agora o primeiro termo do lado direito da desigualdade acima. Observe que $(u_N)_t(0) = \sum_{j=1}^N c_j'(0)\phi_j$. Usando **1.7**, temos que

$$c_j'(0) = \lambda_j c_j(0) - \frac{1}{\epsilon^2}(f(\sum_{i=1}^N c_i(0)\phi_i), \phi_j) = \lambda_j c_j(0) - \frac{1}{\epsilon^2}(f(\Pi_N u_0), \phi_j)$$

Multiplicando essa identidade por ϕ_j e somando de $j = 1$ até $j = N$, segue que,

$$(u_N)_t(0) = \Delta u_0 - \frac{1}{\epsilon^2}\Pi_N f(\Pi_N u_0)$$

Portanto,

$$\nabla(u_N)_t(0) = \nabla\Delta u_0 - \frac{1}{\epsilon^2}\nabla\Pi_N f(\Pi_N u_0)$$

Como temos a hipótese $u_0 \in H^3$, segue que,

$$\|\nabla(u_N)_t(0)\|_0^2 = \|\nabla\Delta u_0 - \frac{1}{\epsilon^2}\nabla\Pi_N f(\Pi_N u_0)\|_0^2 \leq \|u_0\|_{H^3}^2 + \frac{1}{\epsilon^2}\|f(\Pi_N u_0)\|_{H^1}^2$$

Donde, com a ajuda de **1.67**, concluímos que $((u_N)_{tt})_{N=1}^{\infty}$ é limitada em $L^2(0,T;L^2)$.

Para provar (ii), tome a derivada no tempo de **1.4** e teste com $\Delta(u_N)_t$, para concluir que

$$((u_N)_{tt}(t), \Delta(u_N)_t(t)) + (\nabla(u_N)_t(t), \nabla\Delta(u_N)_t(t)) + \frac{1}{\epsilon^2}(f'(u_N)(u_N)_t(t), \Delta(u_N)_t(t)) = 0. \quad \mathbf{1.68}$$

Fazendo algumas integrações por partes, é possível obter

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|\nabla(u_N)_t(t)\|_0^2 + \|\Delta(u_N)_t(t)\|_0^2 = \frac{1}{\epsilon^2}(f'(u_N(t))(u_N)_t(t), \Delta(u_N)_t(t)). \quad \mathbf{1.69}$$

Aplicando a desigualdade de Schwarz, temos que,

$$\|\Delta(u_N)_t(t)\|_0^2 + \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|\nabla(u_N)_t(t)\|_0^2 \leq \frac{1}{\epsilon^4}\|f'(u_N(t))(u_N)_t(t)\|_0^2 + \frac{1}{2}\|\Delta(u_N)_t(t)\|_0^2. \quad \mathbf{1.70}$$

Integrando de 0 a T, fazendo algumas simplificações, obtemos,

$$\int_0^T \|\Delta(u_N)_t(t)\|_0^2\, dt \leq \|\nabla(u_N)_t(0)\|_0^2 + \frac{2}{\epsilon^4}\int_0^T \|f'(u_N(t))(u_N)_t(t)\|_0^2 dt. \quad \mathbf{1.71}$$

Observe que, no lado direito, temos exatamente os mesmos termos da desigualdade **1.66**. Relembrando que $\|\cdot\|_{H^2}$ é equivalente à $\|\cdot\|_0 + \|\Delta\cdot\|_0$, e repetindo os mesmos passos da prova do item anterior para cotar o lado direito da desigualdade acima, concluímos que $((u_N)_t)_{N=1}^{\infty}$ é limitada em $L^2(0,T;H^2(\Omega))$.

De posse destas estimativas, basta tomar limites fracos nos espaços $L^2(0,T;L^2)$ e $L^2(0,T;H^2(\Omega))$ para provar (i) e (ii) respectivamente.

De posse destes resultados de regularidade, é fácil ver que u também é solução forte de **1.63**. Portanto, sob as hipóteses do teorema **4**, temos que existe $u \in L^2(0,T;H^2)$, com $u_t \in L^2(0,T;H^2)$ e $u_{tt} \in L^2(0,T;L^2)$ tal que, para quase todo $t \in [0,T]$, a seguintes igualdades são válidas em L^2:

$$u_t - \Delta u + f(u) = 0, \tag{1.72}$$

$$u_{tt} - \Delta u_t + f'(u)u_t = 0, \tag{1.73}$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}|_{\partial\Omega} = 0,$$

$$u(x,0) = u_0.$$

Nos capítulos que seguem, vamos assumir estas mesmas hipóteses e trabalhar com as equações neste formato (forma forte).

Capítulo 2

Estimativas a Priori

Introdução

Neste capítulo, vamos construir uma base de resultados preliminares sobre a equação de Allen-Cahn que serão essenciais para as análises de erro que iremos fazer nos capítulos 4 e 5. Basicamente, estes resultados são estimativas em função de ϵ para diversas normas da solução. Primeiramente, iremos discutir as hipóteses que serão adotadas no desenvolvimento destas estimativas e também nos capítulos subsequentes. Em seguida, iremos enunciar e provar algumas estimativas para a solução exata da equação **1.72**. Após isto, vamos mostrar uma adaptação que faremos na função f, que, apesar de não alterar a solução de **1.72**, simplifica muito a análise de erro. Por fim, apresentaremos o esquema semi-implícito de discretização no tempo, discutiremos suas vantagens e mostraremos algumas estimativas para sua solução.

2.1 Considerações Iniciais e Estimativas a Priori

Seria demasiadamente interessante e inesperado se fosse possível desenvolver uma análise de erro para a equação de Allen-Cahn utilizando apenas as hipóteses do teorema **1**. Todavia, este não é o caso. Precisamos de um pouco mais de regularidade para obter estimativas relevantes para o erro. No que segue, iremos considerar as hipóteses do teorema **4**, para que possamos desenvolver estimativas para a norma L^2 de u_{tt}, que nos serão bastante úteis. Entretanto, cabe ressaltar que em **[14]**, os autores mostram que é possível obter estimativas de erro (um pouco mais fracas) utilizando apenas uma estimativa para a norma H^{-1} de u_{tt}, sem precisar portanto, de fazer a hipótese $u_0 \in H^3$.

Nas contas que seguem, até o fim deste trabalho, utilizaremos repetidas vezes o símbolo $\lesssim$. Dizemos que $a \lesssim b$ se, e só se, existe uma constante C que não depende de ϵ (nem das discretizações no tempo e espaço, que introduziremos mais adiante) tal que $a \leq Cb$.

Além das hipóteses do teorema **4** iremos considerar também as seguintes hipóteses que nos permitirão estimar diversas normas da solução de **1.72** em termos de potências de ϵ:

$$\Gamma_\epsilon(u_0) = \frac{1}{2}\|\nabla u_0\|_0^2 + \epsilon^{-2}\int_\Omega F(u_0)dx \;\lesssim\; \epsilon^{-2\sigma_1}; \tag{H1}$$

$$\|\Delta u_0 - \epsilon^{-2}f(u_0)\|_0 \;\lesssim\; \epsilon^{-\sigma_2}; \tag{H2}$$

$$\|\nabla(\Delta u_0 - \epsilon^{-2}f(u_0))\|_0 \;\lesssim\; \epsilon^{-\sigma_3}. \tag{H3}$$

onde σ_1, σ_2 e σ_3 são constantes reais não-negativas.

Agora que temos as hipóteses necessárias, vamos enunciar nosso primeiro lema, que trata de estimativas a priori para a solução exata do problema de Allen-Cahn.

Lema 3. Considere que todas as hipóteses do teorema **4** e H1,H2 e H3 sejam satisfeitas. Seja u a solução de **1.72**, então, as seguintes estimativas de energia são válidas:

$$\operatorname{ess\,sup}_{s\in[0,T]} \left\{\frac{1}{2}\|\nabla u(s)\|_0^2 + \epsilon^{-2}\int_\Omega F(u(s))dx\right\} + \int_0^T \|u_t(\tau)\|_0^2 d\tau \lesssim \epsilon^{-2\sigma_1} \tag{2.1}$$

$$\int_0^T \|\Delta u(\tau)\|_0^2 d\tau \lesssim \epsilon^{-2\sigma_1-2} \tag{2.2}$$

$$\operatorname{ess\,sup}_{s\in[0,T]} \left\{\|u_t(s)\|_0^2 + \|u(s)\|_{H_2}^2\right\} + \int_0^T \|\nabla u_t(\tau)\|_0^2 d\tau \lesssim \epsilon^{2\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)} \tag{2.3}$$

$$\int_0^T \|\Delta u_t(\tau)\|_0^2 d\tau \lesssim \epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)} \tag{2.4}$$

$$\operatorname{ess\,sup}_{s\in[0,T]} \|\nabla u_t(s)\|_0^2 + \int_0^T \|u_{tt}(\tau)\|_0^2 d\tau \lesssim \epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)} \tag{2.5}$$

Demonstração:

Para provar as desigualdades **2.1-2.5**, vamos multiplicar a equação original com funções específicas, e usar algumas desigualdades conhecidas (principalmente H1, H2 e H3) para obter as estimativas. Todas as funções que utilizaremos para multiplicar a equação original são elementos de $L^2(0,T;L^2)$. Para verificar isto, o leitor pode consultar o teorema **4**.

Para provar o primeiro item do lema, multiplique **1.72** com u_t e integre por partes no espaço para obter

$$\|u_t\|_0^2 + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\|\nabla u\|_0^2 + \epsilon^{-2}(f(u), u_t) = 0.$$

Note também que, pela regra da cadeia, $(f(u), u_t) = \frac{\partial}{\partial t}\int_\Omega F(u)dx$, portanto, temos que

$$\|u_t\|_0^2 + \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\|\nabla u\|_0^2 + \epsilon^{-2}\int_\Omega F(u)dx\right) = \|u_t\|_0^2 + \frac{\partial}{\partial t}\Gamma_\epsilon(u) = 0,$$

integrando no tempo obtemos:

$$\Gamma_\epsilon(u) + \int_0^t \|u_t\|_0^2 d\tau = \Gamma_\epsilon(u_0).$$

Portanto, usando H1, temos

$$\begin{aligned} \operatorname*{ess\ sup}_{s\in[0,T]} \Gamma_\epsilon(u(t)) \le \Gamma_\epsilon(u_0) \lesssim \epsilon^{-2\sigma_1} \quad \text{e}, \\ \int_0^T \|u_t\|_0^2 d\tau \le \Gamma_\epsilon(u_0) \lesssim \epsilon^{-2\sigma_1}. \end{aligned}$$

Desta forma

$$\operatorname*{ess\ sup}_{s\in[0,T]} \Gamma_\epsilon(u(t)) + \int_0^T \|u_t(\tau)\|_0^2 d\tau \lesssim \epsilon^{-2\sigma_1}, \tag{2.6}$$

como queríamos.

Para obter **2.2**, multiplique **1.72** por Δu e integre no espaço para obter

$$\|\Delta u\|_0^2 = (u_t, \Delta u) + \epsilon^{-2}(f(u), \Delta u),$$

integrando por partes o último termo e usando a desigualdade das médias no segundo, ficamos com

$$\|\Delta u\|_0^2 \le \frac{1}{2}(\|u_t\|_0^2 + \|\Delta u\|_0^2) - \epsilon^{-2}(f'(u)\nabla u, \nabla u) \le \frac{1}{2}(\|u_t\|_0^2 + \|\Delta u\|_0^2) + \epsilon^{-2}\|f'(u)\|_{L^\infty}\|\nabla u\|_0^2.$$

Lembrando que $|f'(u)| \leq 2$ (pelo Princípio do Máximo, **2**) e rearranjando os termos, chegamos em

$$\|\Delta u\|_0^2 \leq \|u_t\|_0^2 + 4\epsilon^{-2}\|\nabla u\|_0^2. \qquad \textbf{2.7}$$

Integrando os dois lados da última desigualdade em relação a t e usando **2.1**, obtemos

$$\int_0^T \|\Delta u\|_0^2 dt \lesssim \epsilon^{-2\sigma_1} + 4\epsilon^{-2}\int_0^T \|\nabla u\|_0^2 dt$$

Não é difícil ver que, por **2.1** a que última integral do lado direito não ultrapassa $T * \text{ess } \sup_{0\leq t\leq T} \|\nabla u\|_0^2 \leq 2T\epsilon^{-2\sigma_1}$, portanto

$$\int_0^T \|\Delta u\|_0^2 dt \lesssim \epsilon^{-2\sigma_1 - 2}.$$

Para obter o terceiro item, **2.3**, vamos multiplicar **1.73** por u_t e integrar no espaço para chegar a

$$(u_{tt}, u_t) - (\Delta u_t, u_t) + \epsilon^{-2}(f'(u)u_t, u_t) = 0.$$

Integrando por partes e usando a regra da cadeia, obtemos

$$\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\|u_t\|_0^2 + \|\nabla u_t\|_0^2 + \epsilon^{-2}(f'(u)u_t, u_t) = 0$$

Integrando com relação a variável temporal de 0 até t, e rearranjando os termos, ficamos com

$$\frac{1}{2}(\|u_t(t)\|_0^2 - |u_t(0)\|_0^2) + \int_0^t \|\nabla u_t(\tau)\|_0^2 d\tau = -\epsilon^{-2}\int_0^t (f'(u)u_t, u_t))d\tau,$$

note agora que, pelo teorema **4**, temos que $u_t \in H^1(0,T,L^2)$ e $u \in H^1(0,T,H^2)$, o que, por **13**, nos garante que $u_t \in C(0,T,L^2)$ e $u \in C(0,T,H^2)$. Utilizando isto e a equação **1.72**, temos que $\|u_t(0)\|_0^2 = \|\Delta u_0 - \epsilon^{-2}f(u(0))\|_0^2$. Desta forma,

$$\frac{1}{2}\|u_t(t)\|_0^2 + \int_0^t \|\nabla u_t(\tau)\|_0^2 d\tau \leq \epsilon^{-2}\|f'(u)\|_{L^\infty}\int_0^t \|u_t(\tau)\|_0^2 d\tau + \frac{1}{2}\|\Delta u(0) - \epsilon^{-2}f(u(0))\|_0^2.$$

Somando $\dfrac{\|\Delta u(t)\|_0^2}{4}$ nos dois lados da desigualdade acima e usando **2.7**, podemos concluir que

$$\|u_t(t)\|_0^2 + \|\Delta u(t)\|_0^2 + 4\int_0^t \|\nabla u_t(\tau)\|_0^2 d\tau \leq 4\epsilon^{-2}\|\nabla u(t)\|_0^2$$
$$+ 8\epsilon^{-2}\int_0^t \|u_t(\tau)\|_0^2 d\tau + 2\|\Delta u(0) - \epsilon^{-2} f(u(0))\|_0^2, \quad \mathbf{2.8}$$

uma vez que sabemos que $|f'(u)| \leq 2$.

Podemos então usar **2.1** e H2 para estimar o lado direito da desigualdade acima por potências de ϵ

$$4\epsilon^{-2}\|\nabla u(t)\|_0^2 + 8\epsilon^{-2}\int_0^t \|u_t(\tau)\|_0^2 d\tau + 2\|\Delta u(0) - \epsilon^{-2} f(u(0))\|_0^2 \lesssim$$
$$\epsilon^{-2}\epsilon^{-2\sigma_1} + \epsilon^{-2}\epsilon^{-2\sigma_1} + \epsilon^{-2\sigma_2} \lesssim \epsilon^{2min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)} \quad \mathbf{2.9}$$

Portanto, podemos concluir que, para quase todo $t \in [0, T]$

$$\|u_t(t)\|_0^2 + \|\Delta u(t)\|_0^2 + \int_0^t \|\nabla u_t(\tau)\|_0^2 d\tau \lesssim \epsilon^{2min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)}.$$

Como $\|u\|_0$ é limitada, e as normas $\|\cdot\|_{H^2}$ e $\|\cdot\|_0 + \|\Delta\cdot\|_0$ são equivalentes, segue que

$$\|u_t(t)\|_0^2 + \|u(t)\|_{H^2}^2 + \int_0^t \|\nabla u_t(\tau)\|_0^2 d\tau \lesssim \epsilon^{2min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)} \quad \text{q.t.p em} \quad [0, T].$$

Finalmente, tomando o supremo, obtemos **2.3**.

Para provar **2.4**, vamos multiplicar **1.73** por Δu_t e integrar no espaço. Após algumas manipulações, chegamos em

$$\frac{\partial}{\partial t}\|\nabla u_t\|_0^2 + \|\Delta u_t\|_0^2 = \epsilon^{-2}(f'(u)u_t, \Delta u_t) \leq \frac{1}{2}(\|\epsilon^{-2} f'(u)u_t\|_0^2 + \|\Delta u_t\|_0^2).$$

Integrando com relação à variável temporal, de 0 até T, obtemos

$$2\|\nabla u_t(T)\|_0^2 + \int_0^T \|\Delta u_t(\tau)\|_0^2 d\tau \leq 2\epsilon^{-4}\int_0^T \|u_t(\tau)\|_0^2 d\tau + 2\lim_{x\to 0^+}\|\nabla u_t(s)\|_0^2.$$

Utilizando H1 e H3, o resultado segue.

Por fim, para **2.5**, multiplique **1.73** por u_{tt}. Após integração por partes ficamos com

$$\|u_{tt}\|_0^2 = -\langle \nabla u_t, \nabla u_{tt} \rangle - \epsilon^{-2}(f'(u)u_t, u_{tt}).$$

Como $\nabla u_t \in L^2(0,T;H^1)$ e $\nabla u_{tt} \in L^2(0,T;H^{-1})$, podemos utilizar o teorema **14** e concluir que $\langle \nabla u_t, \nabla u_{tt} \rangle = \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial}{\partial t}\|\nabla u_t\|_0^2$. Portanto,

$$\|u_{tt}\|_0^2 = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\|\nabla u_t\|_0^2 - \epsilon^{-2}(f'(u)u_t, u_{tt}).$$

Usando agora a desigualdade das médias e Cauchy-Schwartz, chegamos em

$$\|u_{tt}(\tau)\|_0^2 \leq -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\|\nabla u_t\|_0^2 + \frac{1}{2}(\epsilon^{-4}\|f'(u)\|_\infty^2\|u_t\|_0^2 + \|u_{tt}\|_0^2),$$

Utilizando novamente o teorema **14**, temos que a aplicação $t \to \|\nabla u_t\|_0^2$ é absolutamente contínua. Portanto, $\dfrac{\partial}{\partial t}\|\nabla u_t\|_0^2 = \|\nabla u_t(t)\|_0^2 - \|\nabla u_t(0)\|_0^2$. De posse desta igualdade, vamos agora integrar a desigualdade anterior de 0 até t. Com isso, obtemos

$$\int_0^t \|u_{tt}\|_0^2 d\tau + \|\nabla u_t(t)\|_0^2 \leq \|\nabla u_t(0)\|_0^2 + 2\epsilon^{-4}\int_0^t \|u_t(\tau)\|_0^2 d\tau$$

Para cotar o primeiro termo do lado direito da desigualdade acima, relembre que, pelo teorema **14**, temos que $u_t \in C(0,T,L^2)$ e $u \in C(0,T,H^2)$. Utilizando a equação **1.72**, segue que $u_t(0) = \Delta u_0 - \epsilon^{-2}f(u(0))$. Tomando gradiente dos dois lados, segue que $\nabla u_t(0) = \nabla(\Delta u_0 - \epsilon^{-2}f(u(0)))$. Agora sim, podemos usar H3 para cotar o primeiro termo do lado direito. Para o segundo, usamos **2.1** e concluímos que

$$\begin{aligned}\int_0^t \|u_{tt}(\tau)\|_0^2 d\tau + \|\nabla u_t(t)\|_0^2 &\leq \|\nabla(\Delta u_0 - \epsilon^{-2}f(u(0)))\|_0^2 + 2\epsilon^{-4}\int_0^t \|u_t(\tau)\|_0^2 d\tau \\ &\lesssim \epsilon^{-2\sigma_3} + \epsilon^{-2\sigma_1-4} \lesssim \epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)} \qquad \mathbf{2.10}\end{aligned}$$

Finalmente, tomando o supremo com relação a t, temos

$$\operatorname*{ess\,sup}_{s\in[0,T]} \|\nabla u_t(s)\|_0^2 + \int_0^T \|u_{tt}(\tau)\|_0^2 d\tau \lesssim \epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)},$$

o que conclui a prova de **2.5**.

2.2 A discretização no tempo

Com essas estimativas, estamos prontos para introduzir uma discretização temporal no nosso problema, e analisar o quão bem a solução deste problema discretizado no tempo aproxima a solução do problema de Allen-Cahn. Dentre vários possíveis esquemas de discretização no tempo, vamos escolher o de primeira ordem, semi-implícito, estabilizado. Faremos esta escolha pois, como será provado a seguir, esse esquema é energeticamente estável (a energia total decresce a cada iteração no tempo), linear (devido ao tratamento explícito do termo não-linear), e apesar disso, requer passos de tempo da mesma ordem de grandeza(em termos de ϵ) do esquema implícito (veja por exemplo em **[14]** que uma restrição do tipo $\Delta t \lesssim \epsilon^2$, em que Δt é o passo de tempo, é necessária mesmo em um esquema implícito). Todavia, antes de apresentá-lo, vamos introduzir uma adaptação no termo não-linear da equação (AC), que irá simplificar bastante nossos cálculos, assim como faz Yang, em **21**.

Graças ao Princípio do Máximo (teorema **2**), o comportamento da função f fora do intervalo $[-1, 1]$ não tem nenhuma importância na solução, pois a função $u(t)$, que é o argumento da função f, irá sempre assumir valores entre -1 e 1. Desta forma, considerando:

$$\tilde{f}(z) = \begin{cases} f(z), & |z| \leq 2 \\ 11z - 16, & z \geq 2 \\ 11z + 16, & z \leq -2 \end{cases} \tag{2.11}$$

é bastante claro que, trocando f por $\tilde{f}$ em (AC) a solução continua a mesma. Porém, ao contrário de f, a função $\tilde{f}$ é Lipschitz contínua, assim como sua derivada $\tilde{f}'$ e esta propriedade nos será bastante útil. No que segue, para manter a notação mais clara possível, vamos considerar o problema formulado com $\tilde{f}$ mas iremos manter o símbolo f para o termo não-linear e F para sua primitiva ($F' = f$). Denotaremos por L a maior das constantes de Lipschitz entre f e f'.

Agora que introduzimos a adaptação no termo não-linear, vamos apresentar o esquema semi-implícito estabilizado, de discretização no tempo, que é definido, recursivamente, da seguinte forma: Dado $u_0 \in H^1$, defina, de forma recursiva, a sequência de funções $\{u_m\}_{m=1}^M$, em H^1, de modo que

$$\begin{cases} \dfrac{u_m - u_{m-1}}{k} - \Delta u_m + \frac{1}{\epsilon^2}(f(u_{m-1}) + s(u_m - u_{m-1})) = 0 \\ \dfrac{\partial u_m}{\partial n}|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \tag{2.12}$$

Em que s é um fator de estabilização, $0 = t_0 < t_1 < t_2 < ... < t_M = T$ é uma partição uniforme do intervalo $[0, T]$, e $k = t_{i+1} - t_i$ (para todo $0 \leq i \leq M$) é o passo de tempo. $\{u_m\}_{m=1}^M$ é uma sequência de funções que, no capítulo seguinte, mostraremos ser uma boa aproximação para a sequência $\{u(t_m)\}_{m=1}^{M}$, onde u é a solução de (AC).

O nosso primeiro teorema nos garante a estabilidade do método e também da uma estimativa para o decrescimento da energia. No que segue, $d_t u_m$ denota o quociente $\dfrac{u_m - u_{m-1}}{k}$.

Teorema 5. Se $s \geq \dfrac{L}{2}$, o esquema **2.12** é energeticamente estável e a solução satisfaz a seguinte estimativa de energia:

$$k\sum_{m=1}^{M}\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\sum_{m=1}^{M} k\|d_t\nabla u_m\|_0^2 + \max_{1\leq n\leq M}\Gamma_\epsilon(u_n) \leq 2\Gamma_\epsilon(u_0).$$

Demonstração: Multiplicando **2.12** por $d_t u_m$, fazendo integrações por partes e agrupando os termos, chegamos a

$$\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{1}{2}d_t\|\nabla u_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t\nabla u_m\| + sk\epsilon^{-2}\|d_t u_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}(f(u_{m-1}), d_t u_m) = 0. \quad \textbf{2.13}$$

Para estimar o último termo, vamos usar a expansão de Taylor,

$$F(u_m) = F(u_{m-1}) + f(u_{m-1})(u_m - u_{m-1}) + \frac{1}{2}f'(\xi_m)(u_m - u_{m-1})^2,$$

donde concluímos que

$$f(u_{m-1})(u_m - u_{m-1}) \geq F(u_m) - F(u_{m-1}) - \frac{L}{2}(u_m - u_{m-1})^2.$$

Integrando nas coordenadas espaciais, obtemos

$$(f(u_{m-1}), u_m - u_{m-1}) \geq (F(u_m) - F(u_{m-1}), 1) - \frac{L}{2}\|u_m - u_{m-1}\|_0^2,$$

e dividindo por k

$$(f(u_{m-1}), d_t u_m) \geq \frac{1}{k}(F(u_m) - F(u_{m-1}), 1) - \frac{kL}{2}\|d_t u_m\|_0^2.$$

Aplicando a desigualdade acima em **2.13**, chegamos a

$$\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{1}{2} d_t \|\nabla u_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t \nabla u_m\| + sk\epsilon^{-2}\|d_t u_m\|_0^2$$
$$+ \epsilon^{-2}(\frac{1}{k}(F(u_m) - F(u_{m-1}), 1) - \frac{kL}{2}\|d_t u_m\|_0^2) \le 0. \quad \mathbf{2.14}$$

Reagrupando os termos, ficamos com,

$$(1+(s-\frac{L}{2})k\epsilon^{-2})\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{1}{2} d_t \|\nabla u_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t \nabla u_m\| + \epsilon^{-2}\frac{1}{k}(F(u_m) - F(u_{m-1}), 1) \le 0.$$

Perceba agora que, se somarmos esta desigualdade para $m = 1, 2, 3..., M$ iremos obter uma soma telescópica em alguns termos. Fazendo isso e multiplicando por k, obtemos

$$(1 + (s - \frac{L}{2})k\epsilon^{-2})k \sum_{m=1}^{M} \|d_t u_m\|_0^2 + \frac{1}{2}\|\nabla u_M\|_0^2 - \frac{1}{2}\|\nabla u_0\|_0^2$$
$$+ \frac{k}{2}\sum_{m=1}^{M} k\|d_t \nabla u_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}(F(u_M) - F(u_0), 1) \le 0.$$

Reagrupando os termos, ficamos com,

$$(1 + (s - \frac{L}{2})k\epsilon^{-2})k \sum_{m=1}^{M} \|d_t u_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\sum_{m=1}^{M} k\|d_t \nabla u_m\|_0^2 + \Gamma_\epsilon(u_M) \le \Gamma_\epsilon(u_0). \quad \mathbf{2.15}$$

Não é difícil ver que se tivéssemos feito a soma telescópica de 1 até n apenas, teríamos que, para qualquer $1 \le n \le M$,

$$(1 + (s - \frac{L}{2})k\epsilon^{-2})k \sum_{m=1}^{n} \|d_t u_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\sum_{m=1}^{n} k\|d_t \nabla u_m\|_0^2 + \Gamma_\epsilon(u_n) \le \Gamma_\epsilon(u_0). \quad \mathbf{2.16}$$

Somando **2.15** e **2.16**, tomando o máximo sobre n, e lembrando que $s \ge \frac{L}{2}$, o resultado segue.

Para a análise do erro, ainda precisaremos das seguintes estimativas que estão relacionadas com a norma H^2, e são versões discretas de **2.2** e **2.3**:

Lema 4. Se o passo de tempo k satisfaz $k \lesssim \epsilon^{-2}$, as seguintes estimativas são válidas:

$$k\sum_{m=1}^{M}\|\Delta u_m\|_0^2 \lesssim \epsilon^{-2\sigma_1-2}; \qquad \mathbf{2.17}$$

$$\max_{1\le m\le M}\left\{\|u_m\|_{H^2}^2+\|d_t u_m\|_0^2\right\}+k\sum_{m=2}^{M}\|d_t\nabla u_m\|_0^2 \lesssim \epsilon^{2\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)}. \qquad \mathbf{2.18}$$

Demonstração: Para provar **2.17**, começamos multiplicando **2.12** por $-\Delta u_m$ e integrando no espaço, de modo a obter

$$\|\Delta u_m\|_0^2 = (d_t u_m, \Delta u_m) - \epsilon^{-2}(f(u_{m-1}), -\Delta u_m) + sk\epsilon^{-2}(d_t u_m, \Delta u_m).$$

Reagrupando termos e fazendo integração por partes

$$\|\Delta u_m\|_0^2 = ((1+sk\epsilon^{-2})d_t u_m, \Delta u_m) - \epsilon^{-2}(f'(u_{m-1})\nabla u_{m-1}, \nabla u_m). \qquad \mathbf{2.19}$$

Usando a desigualdade de Cauchy-Schwartz e que $\|f'\|_\infty \le L$ (lembre-se que aqui, f denota a função modificada), temos as seguintes estimativas:

$$((1+sk\epsilon^{-2})d_t u_m, \Delta u_m) \le \frac{1}{2}\|\Delta u_m\|_0^2 + (1+s^2k^2\epsilon^{-4})\|d_t u_m\|_0^2;$$

$$-\epsilon^{-2}(f'(u_{m-1})\nabla u_{m-1}, \nabla u_m) \le \frac{L\epsilon^{-2}}{2}(\|\nabla u_m\|_0^2 + \|\nabla u_{m-1}\|_0^2).$$

Aplicando-as em **2.19**, segue que,

$$\|\Delta u_m\|_0^2 \le \frac{1}{2}\|\Delta u_m\|_0^2 + (1+s^2k^2\epsilon^{-4})\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{L\epsilon^{-2}}{2}(\|\nabla u_m\|_0^2 + \|\nabla u_{m-1}\|_0^2). \qquad \mathbf{2.20}$$

Rearranjando os termos, ficamos com

$$\|\Delta u_m\|_0^2 \le 2(1+s^2k^2\epsilon^{-4})\|d_t u_m\|_0^2 + L\epsilon^{-2}(\|\nabla u_m\|_0^2 + \|\nabla u_{m-1}\|_0^2).$$

Multiplicando por k e somando para $m = 1, 2, ..., M$ obtemos

$$k\sum_{m=1}^{M}\|\Delta u_m\|_0^2 \le 2(1+s^2k^2\epsilon^{-4})\sum_{m=1}^{M}k\|d_t u_m\|_0^2 + 2kL\epsilon^{-2}\sum_{m=1}^{M}\|\nabla u_m\|_0^2 + kL\epsilon^{-2}\|\nabla u_0\|_0^2. \qquad \mathbf{2.21}$$

Para cotar o lado direito, perceba que o Teorema **5**, juntamente com H1 nos garante que:

$$\sum_{m=1}^{M} k\|d_t u_m\|_0^2 \leq \Gamma_\epsilon(u_0);$$

$$\|\nabla u_0\|_0^2 \leq 2\Gamma_\epsilon(u_0);$$

e,

$$k\sum_{m=1}^{M} \|\nabla u_m\|_0^2 \leq 2k\sum_{m=1}^{M} \Gamma_\epsilon(u_m) \leq 2k\sum_{m=1}^{M} \Gamma_\epsilon(u_0) = 2kM\Gamma_\epsilon(u_0) = 2T\Gamma_\epsilon(u_0).$$

Aplicando estas três desigualdades em **2.21**, obtemos

$$k\sum_{m=1}^{M} \|\Delta u_m\|_0^2 \leq 2\Gamma_\epsilon(u_0)(1 + s^2k^2\epsilon^{-4} + 2LT\epsilon^{-2} + kL\epsilon^{-2}) \lesssim \epsilon^{-2\sigma_1-2},$$

o que termina a prova de **2.17**.

Para provar o segundo item, vamos aplicar d_t em **2.12** e então multiplicar por $d_t u_m$ e integrar por partes, para, com a ajuda da identidade **15**, obter

$$(1+sk\epsilon^{-2})(\frac{1}{2}d_t\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t^2 u_m\|_0^2) + \|\nabla d_t u_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}(d_t f(u_{m-1}), d_t u_m) = 0. \quad \mathbf{2.22}$$

Como f é Lipschitz contínua, aplicando novamente a desigualdade das médias e Cauchy-Schwartz

$$-(d_t f(u_{m-1}), d_t u_m) \leq \frac{L}{2}(\|d_t u_m\|_0^2 + \|d_t u_{m-1}\|_0^2).$$

Usando então esta desigualdade em **2.22**, temos que

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}d_t\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t^2 u_m\|_0^2 + \|\nabla d_t u_m\|_0^2 \leq \\
&\quad (1 + sk\epsilon^{-2})(\frac{1}{2}d_t\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t^2 u_m\|_0^2) + \|\nabla d_t u_m\|_0^2 = -\epsilon^{-2}(d_t f(u_{m-1}), d_t u_m) \\
&\qquad \leq \frac{L\epsilon^{-2}}{2}(\|d_t u_m\|_0^2 + \|d_t u_{m-1}\|_0^2). \quad \mathbf{2.23}
\end{aligned}$$

Multiplicando a desigualdade acima por k e somando para $m = 2, 3, ..., M$, obtemos

$$\frac{1}{2}\|d_t u_M\|_0^2 - \frac{1}{2}\|d_t u_1\|_0^2 + \frac{k}{2}\sum_{m=2}^{M} k\|d_t^2 u_m\|_0^2 + k\sum_{m=2}^{M}\|\nabla d_t u_m\|_0^2$$
$$\leq \frac{kL\epsilon^{-2}}{2}(\|d_t u_1\|_0^2 + \|d_t u_M\|_0^2 + 2\sum_{m=2}^{M-1}\|d_t u_m\|_0^2). \quad \textbf{2.24}$$

Mas, pelo Teorema **5**, segue que

$$\|d_t u_1\|_0^2 + \|d_t u_M\|_0^2 + 2\sum_{m=2}^{M-1}\|d_t u_m\|_0^2 \leq 2\sum_{m=1}^{M}\|d_t u_m\|_0^2 \leq \frac{2}{k}\Gamma_\epsilon(u_0).$$

Aplicando isto em **2.24**, concluímos que

$$\|d_t u_M\|_0^2 + k\sum_{m=2}^{M} k\|d_t^2 u_m\|_0^2 + k\sum_{m=2}^{M}\|\nabla d_t u_m\|_0^2 \lesssim \epsilon^{-2}\Gamma_\epsilon(u_0) + \|d_t u_1\|_0^2.$$

Não vamos repetir as contas, mas é fácil ver também que, para qualquer $1 \leq j \leq M$,

$$\|d_t u_j\|_0^2 + k\sum_{m=2}^{M} k\|d_t^2 u_m\|_0^2 + k\sum_{m=2}^{M}\|\nabla d_t u_m\|_0^2 \lesssim \epsilon^{-2}\Gamma_\epsilon(u_0) + \|d_t u_1\|_0^2. \quad \textbf{2.25}$$

Para estimar o laplaciano de u_m, vamos precisar de resgatar a equação **2.20**, que nos dava

$$\frac{1}{2}\|\Delta u_m\|_0^2 \leq (1 + s^2k^2\epsilon^{-4})\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{L\epsilon^{-2}}{2}(\|\nabla u_m\|_0^2 + \|\nabla u_{m-1}\|_0^2).$$

Usando o Teorema **5** e **2.25**, com $j = m$

$$(1 + s^2k^2\epsilon^{-4})\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{L\epsilon^{-2}}{2}(\|\nabla u_m\|_0^2 + \|\nabla u_{m-1}\|_0^2) \lesssim \epsilon^{-2}\Gamma_\epsilon(u_0) + \|d_t u_1\|_0^2,$$

portanto, para todo $1 \leq m \leq M$,

$$\|\Delta u_m\|_0^2 + \|d_t u_m\|_0^2 + k\sum_{m=2}^{M} k\|d_t^2 u_m\|_0^2 + k\sum_{m=2}^{M}\|\nabla d_t u_m\|_0^2 \lesssim \epsilon^{-2}\Gamma_\epsilon(u_0) + \|d_t u_1\|_0^2. \quad \textbf{2.26}$$

Vamos agora obter uma cota para $\|d_t u_1\|_0^2$ em termos de ϵ. Para isso, vamos fazer $m = 1$ em **2.12**, e testar com $d_t u_1$,

$$\|d_t u_1\|_0^2 - (\Delta u_1, d_t u_1) + \epsilon^{-2}(f(u_0), d_t u_1) = -sk\epsilon^{-2}\|d_t u_1\|_0^2 \leq 0.$$

Agora, vamos usar o teorema da divergência e um truque algébrico que nos permitirá estimar os termos que envolvem u_1 a partir de termos que envolvem u_0

$$\|d_t u_1\|_0^2 + (\nabla u_1, \nabla d_t u_1) - (\nabla u_0, \nabla d_t u_1) + (\nabla u_0, \nabla d_t u_1) + \epsilon^{-2}(f(u_0), d_t u_1) \leq 0.$$

Rearranjando alguns termos e usando novamente o teorema da divergência, chegamos em

$$\|d_t u_1\|_0^2 + k\|\nabla d_t u_1\|_0^2 \leq (\Delta u_0 - \epsilon^{-2} f(u_0), d_t u_1) \leq \frac{1}{2}(\|\Delta u_0 - \epsilon^{-2} f(u_0)\|_0^2 + \|d_t u_1\|^2).$$

Note que na última passagem, usamos novamente as desigualdades das médias e Cauchy-Schwartz. A partir disso, vemos facilmente que

$$\|d_t u_1\|_0^2 \leq \|\Delta u_0 - \epsilon^{-2} f(u_0)\|_0^2 \lesssim \epsilon^{-2\sigma_2}.$$

Portanto, por **2.26**, para todo $1 \leq m \leq M$, vale

$$\begin{aligned}
&\|\Delta u_m\|_0^2 + \|d_t u_m\|_0^2 + k \sum_{m=2}^{M} \|\nabla d_t u_m\|_0^2 \\
&\qquad \leq \|\Delta u_m\|_0^2 + \|d_t u_m\|_0^2 + k \sum_{m=2}^{M} k\|d_t^2 u_m\|_0^2 + k \sum_{m=2}^{M} \|\nabla d_t u_m\|_0^2 \\
&\qquad\qquad \lesssim \epsilon^{-2}\Gamma_\epsilon(u_0) + \|d_t u_1\|_0^2 \lesssim \epsilon^{-2\sigma_1 - 2} + \epsilon^{-2\sigma_2} \lesssim \epsilon^{2\min(-\sigma_1 - 1, -\sigma_2)}.
\end{aligned}$$

Note agora que, como $u_m = k\sum_{i=1}^{m} d_t u_i + u_0$, é possível usar o teorema **5** e mostrar que $\|u_m\|_0 \lesssim \epsilon^{-\sigma_1}$. Com isto, e relembrando que as normas $\|\cdot\|_{H^2}$ e $\|\cdot\|_0 + \|\Delta \cdot\|_0$ são equivalentes segue que, para todo $1 \leq m \leq M$

$$\|u_m\|_{H^2}^2 + \|d_t u_m\|_0^2 + k \sum_{m=2}^{M} \|\nabla d_t u_m\|_0^2 \lesssim \epsilon^{2\min(-\sigma_1 - 1, -\sigma_2)}.$$

Para terminar a prova, basta tomar o máximo sobre m na desigualdade acima.

Concluímos aqui o desenvolvimento das estimativas a priori que serão necessárias para a análise de erro do esquema **2.12**. Algumas das estimativas feitas aqui podem parecer pouco naturais para o leitor, mas no próximo capítulo, veremos que todas elas são importantes para desenvolvermos uma estimativa de erro para este esquema numérico que seja polinomial em ϵ.

Capítulo 3

Estimativas de Erro para o esquema semi-discreto

3.1 Introdução

Neste capítulo, nosso ojetivo principal é provar um teorema que fornece estimativas de erro para a solução do esquema semi-discreto **2.12**. Iniciaremos apresentando a desigualdade espectral de de Mottoni, Schatzman e Chen, que é um dos componentes essenciais desta prova. Em seguida, vamos a demonstração propriamente dita, utilizando como referência o trabalho de Yang **[21]**. Nesta demonstração utilizaremos a seguinte forma discreta do Lema de Gronwall:

Lema 5. (Lema de Gronwall discreto) Se $\{y_n\}_{n=0}^{\infty}$, $\{f_n\}_{n=0}^{\infty}$, e $\{g_n\}_{n=0}^{\infty}$ são sequências de reais não-negativos, tais que

$$y_n \leq f_n + \sum_{k=0}^{n-1} g_k y_k, \quad \text{para algum } n \geq 0.$$

então, tem-se que

$$y_n \leq f_n + \left(\sum_{k=0}^{n-1} f_k g_k \right) \exp \left(\sum_{j=0}^{n-1} g_j \right).$$

Para uma prova deste resultado, o leitor pode consultar, por exemplo, **[16]**.

3.2 Estimativa Espectral

Conforme explicado na introdução deste trabalho, um dos principais ingredientes da prova de estimativas de erro polinomiais em ϵ para o problema de Allen-Cahn é o uso de uma estimativa para o autovalor principal do operador de Allen-Cahn linearizado. Esta estimativa, que foi desenvolvida independentemente por de Mottoni e Schatzman **[11]** e Chen **[8]** é a seguinte:

Lema 6. (Estimativa Espectral) Defina o operador de Allen-Cahn linearizado (L_{AC}) da seguinte forma: $L_{AC} : H^2(\Omega) \to L^2(\Omega)$ tal que, para cada $\psi \in H^2(\Omega)$

$$L_{AC}(\psi) = -\Delta\psi + f'(u)\psi,$$

em que $u \in H^2(\Omega)$ é a solução do problema de Allen-Cahn fraco **1.1**, em algum instante de tempo fixo. Então, existe uma constante $C_0 > 0$, independente de ϵ, tal que o autovalor principal de $L_{AC}(\lambda_{AC})$ satisfaz

$$\lambda_{AC} \equiv \inf_{\psi \in H^1, \psi \neq 0} \frac{\|\nabla\psi\|^2 + \epsilon^{-2}(f'(u)\psi, \psi)}{\|\psi\|^2} \geq -C_0,$$

para todo $\epsilon \geq 0$

3.3 Estimativa de Erro

Com o uso de **6**, podemos demonstrar a seguinte estimativa de erro para o esquema **2.12**:

Teorema 6. Seja $u \in \Omega \times (0, T)$ a solução do problema de Allen-Cahn (AC). Assuma que sejam válidas as hipóteses do teorema **4** além de H1, H2 e H3 e que $\{u_m\}_{m=1}^{M}$ seja a solução do esquema de primeira ordem **2.12**. Então, existe uma constante C que não depende de k e ϵ tal que, se

$$k \leq C \min(\epsilon^2, \epsilon^{\alpha_1}, \epsilon^{\alpha_2}),$$

em que:

$$\alpha_1 = \frac{2\max(\sigma_1 + 1,\ \sigma_2) + 4}{3} \text{ e } \alpha_2 = \max(\sigma_1 + 2,\ \sigma_3) + \max(\sigma_1 + 1,\ \sigma_2) + 4.$$

Então valem as seguintes estimativas de erro:

$$\|u(t_m) - u_m\|_0 \lesssim k\epsilon^{\min(-\sigma_1 - 2,\ -\sigma_3)}, \tag{3.1}$$

$$(k \sum_{m=0}^{M} \|\nabla(u(t_m) - u_m)\|_0^2)^{\frac{1}{2}} \lesssim k\epsilon^{\min(-\sigma_1 - 3,\ -\sigma_3 - 1)}. \tag{3.2}$$

Demonstração: Para provar este resultado, começamos subtraindo **2.12** de (AC), de modo a obter a seguinte equação para o erro $e_m = u(t_m) - u_m$,

$$d_t e_m - \Delta e_m + \epsilon^{-2}(f(u(t_m)) - f(u_{m-1}) - sk\epsilon^{-2} d_t u_m = R_m, \qquad \mathbf{3.3}$$

em que,

$$R_m = -\frac{1}{k}\int_{t_{m-1}}^{t_m} (s - t_{m-1}) u_{tt}(s) ds. \qquad \mathbf{3.4}$$

Vamos agora somar $f(u_m)$ nos dois lados de **3.3** e tomar o produto interno de com e_m, para obter,

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} d_t \|e_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t e_m\|_0^2 + \|\nabla e_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}(f(u(t_m)) - f(u_m), e_m)\\ + \epsilon^{-2}(f(u_m)) - f(u_{m-1}), e_m) - sk\epsilon^{-2}(d_t u_m, e_m) = (R_m, e_m), \quad \mathbf{3.5}\end{aligned}$$

em que usamos a identidade $(d_t e_m, e_m) = \frac{1}{2} d_t \|e_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t e_m\|_0^2$ (Ver teorema **15**, Apêndice).

O próximo passo é obter estimativas para os últimos três termos do lado esquerdo e para o termo do lado direito de **3.5**.

Para o termo $(f(u(t_m)) - f(u_m), e_m)$, utilize a fórmula $f(a) - f(b) = \int_0^{a-b} f'(a - \xi) d\xi$ para concluir que

$$\begin{aligned}(f(u(t_m)) - f(u_m), e_m) = \left(\int_0^{e_m} f'(u(t_m) - \xi) d\xi,\ e_m\right)\\ = \left(\int_0^{e_m} (f'(u(t_m) - \xi) - f'(u(t_m))) d\xi,\ e_m\right) + \left(\int_0^{e_m} f'(u(t_m)) d\xi,\ e_m\right). \quad \mathbf{3.6}\end{aligned}$$

Como f' é Lipschitz contínua, $|\int_0^{e_m} (f'(u(t_m) - \xi) - f'(u(t_m))) d\xi| \leq \int_0^{e_m} L\xi d\xi = \frac{L}{2} e_m^2$, então

$$\begin{aligned}\left(\int_0^{e_m} (f'(u(t_m) - \xi) - f'(u(t_m))) d\xi,\ e_m\right) + \left(\int_0^{e_m} f'(u(t_m)) d\xi,\ e_m\right)\\ \geq -(\frac{L}{2} e_m^2, |e_m|) + (f'(u(t_m)) e_m, e_m) \geq -\frac{L}{2}\|e_m\|_{L^3}^3 + (f'(u(t_m)) e_m, e_m). \quad \mathbf{3.7}\end{aligned}$$

Portanto,

$$(f(u(t_m)) - f(u_m), e_m) \geq -\frac{L}{2}\|e_m\|_{L^3}^3 + (f'(u(t_m)) e_m, e_m). \qquad \mathbf{3.8}$$

Para os outros dois termos do lado esquerdo, as cotas são mais simples.

Lembrando que f é Lipschitz contínua e usando a desigualdade de Schwarz, obtemos

$$-\frac{1}{\epsilon^2}(f(u_m)) - f(u_{m-1}), e_m) \leq \frac{1}{\epsilon^2}(|f(u_m)) - f(u_{m-1})|, |e_m|)$$
$$\leq (\frac{1}{\epsilon^2}L|u_m - u_{m-1}|, |e_m|) \leq \frac{1}{2}k^2\epsilon^{-4}\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{1}{2}L^2\|e_m\|_0^2. \quad \mathbf{3.9}$$

Para o termo $sk\epsilon^{-2}(d_t u_m, e_m)$, basta usar a desigualdade de Schwarz,

$$sk\epsilon^{-2}(d_t u_m, e_m) \leq \frac{1}{2}k^2\epsilon^{-4}\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{1}{2}s^2\|e_m\|_0^2. \quad \mathbf{3.10}$$

Por fim, para o termo do lado direito de **3.5**, usamos a mesma desigualdade, de modo a obter

$$(R_m, e_m) \leq \frac{1}{2}\|R_m\|_0^2 + \frac{1}{2}\|e_m\|_0^2. \quad \mathbf{3.11}$$

Utilizando as cotas **3.8**, **3.9**, **3.10** e **3.11** em **3.5**, temos que

$$\frac{1}{2}d_t\|e_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t e_m\|_0^2 + \|\nabla e_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}(f'(u(t_m))e_m, e_m) \leq$$
$$\frac{L}{2\epsilon^2}\|e_m\|_{L^3}^3 + k^2\epsilon^{-4}\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{1}{2}\|R_m\|_0^2 + \frac{1 + L^2 + s^2}{2}\|e_m\|_0^2. \quad \mathbf{3.12}$$

Agora vamos estimar $\|\nabla e_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}(f'(u(t_m))e_m, e_m)$ através da estimativa espectral (Lema **6**),

$$\frac{\|\nabla e_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}(f'(u(t_m))e_m, e_m)}{\|e_m\|_0^2} \geq \lambda_{AC} \equiv \inf_{\psi \in H^1, \psi \neq 0} \frac{\|\nabla \psi\|_0^2 + \epsilon^{-2}(f'(u)\psi, \psi)}{\|\psi\|_0^2} \geq -C_0. \quad \mathbf{3.13}$$

Aplicando esta estimativa em **3.12**, obtemos,

$$\frac{1}{2}d_t\|e_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t e_m\|_0^2 \leq \frac{L}{2\epsilon^2}\|e_m\|_{L^3}^3 + k^2\epsilon^{-4}\|d_t u_m\|_0^2 + \frac{1}{2}\|R_m\|_0^2 + \frac{L^2 + s^2 + 2C_0 + 1}{2}\|e_m\|_0^2. \quad \mathbf{3.14}$$

Agora, multiplicamos esta desigualdade por $2k$ e somamos de $m = 1$ até $m = n \leq M$. Percebendo que o primeiro termo é telescópico, temos que,

$$\|e_n\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{n} k\|d_t e_m\|_0^2 \leq (L^2+s^2+2C_0+1)k\sum_{m=1}^{n}\|e_m\|_0^2$$
$$+ 2k^3\epsilon^{-4}\sum_{m=1}^{n}\|d_t u_m\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{n}\|R_m\|_0^2 + \frac{kL}{\epsilon^2}\sum_{m=1}^{n}\|e_m\|_{L^3}^3. \quad \mathbf{3.15}$$

Agora, vamos ter que cotar os últimos três termos do lado direito de **3.15**.

Para o termo $k\sum_{m=1}^{n}\|d_t u_m\|_0^2$, basta usar o teorema **5**. Desta forma, é possível concluir que

$$2k^3\epsilon^{-4}\sum_{m=1}^{n}\|d_t u_m\|_0^2 \lesssim k^2\epsilon^{-2\sigma_1-4}. \quad \mathbf{3.16}$$

Para o termo $k\sum_{m=1}^{n}\|R_m\|_0^2$, precisaremos de um pouco mais de trabalho. Usando **3.4** e a desigualdade de Schwarz, temos que

$$k\|R_m\|_0^2 \leq \frac{1}{k}\int_{t_{m-1}}^{t_m}(s-t_{m-1})^2 ds \int_{t_{m-1}}^{t_m}\|u_{tt}(s)\|_0^2 ds = \frac{k^2}{3}\int_{t_{m-1}}^{t_m}\|u_{tt}(s)\|_0^2 ds. \quad \mathbf{3.17}$$

Somando de $m=1$ até $m=n$,

$$k\sum_{m=1}^{n}\|R_m\|_0^2 \leq \frac{k^2}{3}\sum_{m=1}^{n}\int_{t_{m-1}}^{t_m}\|u_{tt}(s)\|_0^2 ds. \quad \mathbf{3.18}$$

Vamos agora usar **2.5** para concluir que,

$$k\sum_{m=1}^{n}\|R_m\|_0^2 \lesssim k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}. \quad \mathbf{3.19}$$

Utilizando **3.16** e **3.19** em **3.15**, ficamos com

$$\|e_n\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{n} k\|d_t e_m\|_0^2 \lesssim k\sum_{m=1}^{n}\|e_m\|_0^2 + k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)} + \frac{kL}{\epsilon^2}\sum_{m=1}^{n}\|e_m\|_{L^3}^3. \quad \mathbf{3.20}$$

Por fim, precisamos cotar o termo $\sum_{m=1}^{n}\|e_m\|_{L^3}^3$. Essa é uma das passagens mais delicadas de todo este trabalho. A ideia é usar a desigualdade de Gagliardo-Niremberg para cotar a norma L^3 em função da norma L^2. Porém, uma aplicação direta da mesma não nos permite chegar a uma cota polinomial para o erro. Como veremos a seguir, para obter uma cota polinomial, precisamos que os termos que dependem de ϵ sejam todos absorvidos pelo termo $k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}$, que não multiplica $\|e_m\|_0$. Desta forma, poderemos usar o lema de Gronwall e não obter nenhum fator ϵ na parte exponencial.

Para mostrar, precisamente, que o termo que envolve a norma L^3 pode ser absorvido pelo termo $k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}$, iremos utilizar um argumento indutivo, e, para isto, será necessário que o índice final do somatório $\sum_{m=1}^{n}\|e_m\|_{L^3}^3$ seja $n-1$ ao invés de n. Isto é simples de ser feito. Basta observar que, para $1 \leq m \leq n$

$$\|e_m\|_{L^3}^3 \leq 4(\|e_{m-1}\|_{L^3}^3 + k^3\|d_t e_m\|_{L^3}^3). \tag{3.21}$$

Agora, podemos utilizar a desigualdade de Gagliardo-Niremberg para domínios limitados **16**, cujo enunciado está detalhado no apêndice, para obter

$$\|e_{m-1}\|_{L^3} \lesssim \|D^2 e_{m-1}\|_0^{\frac{1}{6}}\|e_{m-1}\|_0^{\frac{5}{6}} + \|e_{m-1}\|_0. \tag{3.22}$$

Elevando ao cubo, segue que

$$\|e_{m-1}\|_{L^3}^3 \lesssim \|e_{m-1}\|_0^{\frac{5}{2}}(\|D^2 e_{m-1}\|_0^{\frac{1}{2}} + \|e_{m-1}\|_0^{\frac{1}{2}}) \lesssim \|e_{m-1}\|_0^{\frac{5}{2}}\|e_{m-1}\|_{H^2}^{\frac{1}{2}}. \tag{3.23}$$

Por **2.3** e **2.18**, $\|e_{m-1}\|_{H^2} \lesssim \epsilon^{\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)}$, portanto

$$\|e_{m-1}\|_{L^3}^3 \lesssim \epsilon^{\frac{1}{2}\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)}\|e_{m-1}\|_0^{\frac{5}{2}}. \tag{3.24}$$

Para o termo $k^3\|d_t e_m\|_{L^3}^3$ também usamos a mesma desigualdade, para obter,

$$k^3\|d_t e_m\|_{L^3}^3 \lesssim k^3(\|d_t D^2 e_m\|_0^{\frac{1}{2}}\|d_t e_m\|_0^{\frac{5}{2}} + \|d_t e_m\|_0^3). \tag{3.25}$$

Em seguida, fatoramos $\|d_t e_m\|_0^{\frac{5}{2}}$,

$$k^3\|d_t e_m\|_{L^3}^3 \lesssim k^3\|d_t e_m\|_0^{\frac{5}{2}}(\|d_t D^2 e_m\|_0^{\frac{1}{2}} + \|d_t e_m\|_0^{\frac{1}{2}}). \tag{3.26}$$

Note agora que $\|d_t D^2 e_m\|_0^{\frac{1}{2}} + \|d_t e_m\|_0^{\frac{1}{2}} \leq \|d_t e_m\|_{H^2}^{\frac{1}{2}}$ e reescreva $\|d_t e_m\|_{H^2}^{\frac{1}{2}} = \|\dfrac{e_m - e_{m-1}}{k}\|_{H^2}^{\frac{1}{2}}$. Usando a desigualdade triangular, obtemos,

$$\|d_t e_m\|_{H^2}^{\frac{1}{2}} \leq k^{-\frac{1}{2}}(\|e_m\|_{H^2}^{\frac{1}{2}} + \|e_{m-1}\|_{H^2}^{\frac{1}{2}}).$$

Usando agora a mesma desigualdade da passagem de **3.23** para **3.24** para estimar as normas H^2, concluímos que,

$$\|d_t e_m\|_{H^2}^{\frac{1}{2}} \lesssim k^{-\frac{1}{2}} \epsilon^{\frac{1}{2}\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)}.$$

Usando este resultado em **3.26**, chegamos a,

$$k^3 \|d_t e_m\|_{L^3}^3 \lesssim k^{\frac{5}{2}} \epsilon^{\frac{1}{2}\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)} \|d_t e_m\|_0^{\frac{5}{2}}. \qquad \mathbf{3.27}$$

Finalmente, por **2.18**, $\|d_t e_m\|_0^{\frac{1}{2}} \lesssim \epsilon^{\frac{1}{2}\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)}$, e portanto:

$$k^3 \|d_t e_m\|_{L^3}^3 \lesssim k^{\frac{5}{2}} \epsilon^{\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)} \|d_t e_m\|_0^2. \qquad \mathbf{3.28}$$

Somando as desigualdades **3.24** e **3.28** de $m = 1$ até $m = n$, e usando **3.21**, chegamos a

$$\sum_{m=1}^{n} \|e_m\|_{L^3}^3 \lesssim \epsilon^{\frac{1}{2}\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)} \sum_{m=1}^{n} \|e_{m-1}\|_0^{\frac{5}{2}} + k^{\frac{5}{2}} \epsilon^{\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)} \sum_{m=1}^{n} \|d_t e_m\|_0^2. \qquad \mathbf{3.29}$$

Usamos agora **3.29**, para, a partir de **3.20** concluir que

$$\begin{aligned}\|e_n\|_0^2 + k \sum_{m=1}^{n} k \|d_t e_m\|_0^2 &\lesssim k \sum_{m=1}^{n} \|e_m\|_0^2 + k^2 \epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)} \\ &+ \epsilon^{\frac{1}{2}\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)-2} k \sum_{m=1}^{n-1} \|e_m\|_0^{\frac{5}{2}} + k^{\frac{5}{2}} \epsilon^{\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)-2} k \sum_{m=1}^{n} \|d_t e_m\|_0^2. \qquad \mathbf{3.30}\end{aligned}$$

Observe agora que, se,

$$k^{\frac{7}{2}} \epsilon^{\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)-2} \lesssim k^2, \qquad \mathbf{3.31}$$

então o último termo de **3.30** pode ser absorvido pelo segundo termo do lado direito. Mas isto é exatamente equivalente à hipótese $k \lesssim \epsilon^{\alpha_1}$. Portanto, temos que, para todo $1 \leq n \leq M$

$$\begin{aligned}\|e_n\|_0^2 + k \sum_{m=1}^{n} k \|d_t e_m\|_0^2 &\lesssim k \sum_{m=1}^{n} \|e_m\|_0^2 + k^2 \epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)} \\ &+ \epsilon^{\frac{1}{2}\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)-2} k \sum_{m=1}^{n-1} \|e_m\|_0^{\frac{5}{2}}. \qquad \mathbf{3.32}\end{aligned}$$

Ou seja, existem constantes A_1, A_2 e A_3, que não dependem de k e ϵ tais que, para todo $1 \leq n \leq M$

$$\|e_n\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{n} k\|d_t e_m\|_0^2 \leq A_1 k \sum_{m=1}^{n} \|e_m\|_0^2 + A_2 k^2 \epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}$$
$$+ A_3 \epsilon^{\frac{1}{2}\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)-2} k \sum_{m=1}^{n-1} \|e_m\|_0^{\frac{5}{2}}. \quad \mathbf{3.33}$$

Vamos agora utilizar o argumento indutivo que mencionamos anteriormente para finalizar a prova de **3.1**. Suponha que, para todo j com $1 \leq j \leq \ell < M$, valha

$$\|e_j\|_0^2 + k\sum_{m=0}^{j} k\|d_t e_m\|_0^2 \leq C A_2 k^2 \epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}. \quad \mathbf{3.34}$$

(Observe que o caso base, $\ell = 1$ segue de **3.33** caso suponhamos $k \leq \frac{1}{2A_1}$, onde $C \geq 2$ é uma constante que depende apenas de A_1, A_2 e A_3 que será definida adiante)

Portanto

$$\epsilon^{\frac{1}{2}\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)-2} k \sum_{m=1}^{\ell} \|e_m\|_0^{\frac{5}{2}} \leq \epsilon^{\frac{1}{2}\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)-2} k \sum_{m=1}^{\ell} (C A_2 k^2 \epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)})^{\frac{5}{4}}. \quad \mathbf{3.35}$$

O lado direito desta desigualdade pode ser escrito como

$$(CA_2)^{\frac{5}{4}} (k\ell) k^{\frac{5}{2}} \epsilon^{\frac{1}{2}\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)+\frac{5}{2}\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)-2}. \quad \mathbf{3.36}$$

Observe agora que a hipótese $k \lesssim \epsilon^{\alpha_2}$ é exatamente equivalente à

$$k^{\frac{5}{2}} \epsilon^{\frac{1}{2}\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)+\frac{5}{2}\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)-2} \leq C_1 k^2 \epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}. \quad \mathbf{3.37}$$

Utilizando **3.35** e **3.37** em **3.33** para $n = \ell + 1$, e fazendo $C_1 = \frac{1}{A_2}$ obtemos

$$\|e_{\ell+1}\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{\ell+1} k\|d_t e_m\|_0^2 \leq A_1 k \sum_{m=1}^{\ell+1} \|e_m\|_0^2$$
$$+ (A_2 + C^{\frac{5}{4}} (A_2)^{\frac{1}{4}} A_3 (k\ell)) k^2 \epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}. \quad \mathbf{3.38}$$

Agora, podemos aplicar o lema de Gronwall e não obter nenhum fator ϵ no expoente. Fazendo isso, chegamos à

$$\|e_{\ell+1}\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{\ell+1} k\|d_t e_m\|_0^2 \leq$$
$$(A_2 + C^{\frac{5}{4}}(A_2)^{\frac{1}{4}}A_3(k\ell))\left(1+\frac{A_1k\ell}{1-A_1k}\exp\left(\frac{A_1k\ell}{1-A_1k}\right)\right)k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}. \quad \mathbf{3.39}$$

Com isto, se a constante C for tal que,

$$CA_2 > (A_2 + C^{\frac{5}{4}}(A_2)^{\frac{1}{4}}A_3(k\ell))\left(1+\frac{A_1k\ell}{1-A_1k}\exp\left(\frac{A_1k\ell}{1-A_1k}\right)\right). \quad \mathbf{3.40}$$

Teremos que,

$$\|e_{\ell+1}\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{\ell+1} k\|d_t e_m\|_0^2 \leq CA_2k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}. \quad \mathbf{3.41}$$

Escolha agora

$$C = (1 + 2A_1T\exp(2A_1T))A_2^2, \quad \mathbf{3.42}$$

e, caso necessário, redefina A_2 de modo que

$$A_2^2 > 1 + (1 + 2A_1T\exp(2A_1T)^{\frac{5}{4}})A_2^{\frac{7}{4}}T. \quad \mathbf{3.43}$$

Fazendo algumas contas simples, é fácil ver que escolhendo C desta forma e redefinindo A_2 de modo a satisfazer **3.43**, podemos garantir a validade de **3.41** e concluir a prova do passo de indução.

Portanto, para todo $1 \leq \ell \leq M$, vale

$$\|e_\ell\|_0^2 + k\sum_{m=0}^{\ell} k\|d_t e_m\|_0^2 \leq CA_2k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}. \quad \mathbf{3.44}$$

O que nos garante que

$$\max_{1\leq\ell\leq M}\|e_\ell\|_0^2 + k\sum_{m=0}^{M} k\|d_t e_m\|_0^2 \leq 2CA_2k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}, \quad \mathbf{3.45}$$

e conclui a prova de **3.1**.

De posse de **3.45**, não é difícil provar **3.2**. Basta voltar em **3.5** e fazer as estimativas de uma maneira diferente:

$$\begin{aligned} -\epsilon^{-2}(f(u(t_m)) - f(u_m), e_m) &\lesssim \epsilon^{-2}\|e_m\|_0^2 \\ -\epsilon^{-2}(f(u_m)) - f(u_{m-1}), e_m) &\lesssim k^2\epsilon^{-2}\|d_t u_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}\|e_m\|_0^2 \\ sk\epsilon^{-2}(d_t u_m, e_m) &\lesssim k^2\epsilon^{-2}\|d_t u_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}\|e_m\|_0^2 \end{aligned} \quad \mathbf{3.46}$$

Note que nas duas primeiras desigualdades de **3.46**, utilizamos que f é Lipschitz contínua.

Agora, basta utilizar **3.46** e **3.11** em **3.5** para obter,

$$\frac{1}{2}d_t\|e_m\|_0^2 + \|\nabla e_m\|_0^2 \lesssim k^2\epsilon^{-2}\|d_t u_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}\|e_m\|_0^2 + \|R_m\|_0^2. \quad \mathbf{3.47}$$

Então, multiplicamos por k e somamos de $m = 1$ até $m = M$

$$\|e_M\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{M}\|\nabla e_m\|_0^2 \lesssim k^3\epsilon^{-2}\sum_{m=1}^{M}\|d_t u_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}k\sum_{m=1}^{M}\|e_m\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{M}\|R_m\|_0^2, \quad \mathbf{3.48}$$

e utilizamos **5** e **3.19**, para chegar a

$$\|e_M\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{M}\|\nabla e_m\|_0^2 \lesssim k^2\epsilon^{-2\sigma_1-2} + \epsilon^{-2}k\sum_{m=1}^{M}\|e_m\|_0^2 + k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}. \quad \mathbf{3.49}$$

Por fim, usamos a cota L^2 que já provamos (**3.1**),

$$\|e_M\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{M}\|\nabla e_m\|_0^2 \lesssim k^2\epsilon^{-2\sigma_1-2} + k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-3,-\sigma_3-1)} + k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}. \quad \mathbf{3.50}$$

Simplificando, obtemos,

$$k\sum_{m=1}^{M}\|\nabla e_m\|_0^2 \lesssim k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-3,-\sigma_3-1)}. \quad \mathbf{3.51}$$

Finalmente, basta elevar ambos lados à $\frac{1}{2}$, para terminar a prova de **3.2**.

Capítulo 4

Estimativa de erro para uma solução por Elementos Finitos

4.1 Introdução

Neste capítulo, vamos estudar uma discretização do espaço para nosso problema, através do método dos Elementos Finitos. O objetivo será obter estimativas de erro similares as obtidas no capítulo 4 para a solução do problema discretizado no espaço. Primeiramente, vamos definir de forma precisa o problema discretizado e provar algumas estimativas de energia similares aos resultados do teorema **5**. Em seguida, vamos apresentar algumas propriedades de aproximação dos operadores de projeção em L^2 e H^1. Após isto, ainda teremos que adaptar a estimativa espectral **6** para aplicá-la no esquema discreto. Só então é que poderemos desenvolver a análise de erro propriamente dita.

4.2 A discretização por Elementos Finitos

Considere uma triangulação $\mathcal{T}_h$ de Ω tal que $\overline{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} \overline{K}$. Definimos o tamanho h da triangulação como $h := \max_{K \in \mathcal{T}_h} h_K$. Seja agora $\mathcal{S}_h$ o subespaço de elementos finitos de Argyris de H^2 associado com $\mathcal{T}_h$. É de extrema importância que usemos elementos com regularidade H^2 nesta análise, pois iremos precisar disto para utilizar a desigualdade de Gagliardo-Niremberg. Para mais detalhes sobre este espaço de elementos finitos, o leitor pode consultar por exemplo os livros **[5]** e **[6]**.

A solução aproximada para o problema de Allen-Cahn neste subespaço é a sequência de funções $\{U_m\}_{m=0}^{M} \in \mathcal{S}_h$ que satisfaz, para cada $m = 1, 2, ..., M$,

$$(d_t U_m, v_h) + (\nabla U_m, \nabla v_h) + \frac{1}{\epsilon^2}\left((f(U_{m-1}), v_h) + sk(d_t U_m, v_h)\right) = 0 \quad \forall v_h \in \mathcal{S}_h \qquad \mathbf{4.1}$$

e $U_0 = P_h u_0$, em que $Q_h : H^1 \to \mathcal{S}_h$ é o operador de projeção H^1 em $\mathcal{S}_h$. Lembre ainda que k e s são o passo de tempo e a constante de estabilização definidos no capítulo 2.

4.3 Estimativas de Energia

Nesta seção, vamos mostrar que a solução $\{U_m\}_{m=0}^M$ de **4.1** satisfaz duas estimativas de energia.

Proposição 2. Se $s \geq \frac{L}{2}$, a solução $\{U_m\}_{m=0}^M$ de **4.1** satisfaz as seguintes estimativas

$$(i) \quad k\sum_{m=1}^{M} \|d_t U_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\sum_{m=1}^{M} k\|d_t \nabla U_m\|_0^2 + \max_{1\leq m\leq M} \Gamma_\epsilon(U_m) \leq 2\Gamma_\epsilon(U_0)$$

$$(ii) \quad \|d_t U_M\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{M} k\|d_t^2 U_m\|_0^2 + \sum_{m=1}^{M} k\|d_t \nabla U_m\|_0^2 \lesssim \epsilon^{2\min(-\sigma_1-1,-\sigma_2)}$$

Demonstração: A prova de (i) é exatamente idêntica à prova do teorema **5**, basta testar **4.1** com $d_t U_m$ e seguir os mesmos passos feitos lá.

Já para (ii), basta seguir os mesmos passos da prova da desigualdade **2.18** do lema **4**.

4.4 Estimativas Úteis dos Operadores de Projeção

Nesta seção, vamos enunciar algumas propriedades de aproximação dos operadores de projeção L^2 e H^1. Estas propriedades serão muito úteis nas próximas seções, onde iremos estimar o erro de aproximação da solução de **4.1** em relação à solução de (AC).

Teorema 7. Seja $Q_h : L^2 \to \mathcal{S}_h$ o operador de projeção L^2 definido por

$$(u - Q_h u, v) = 0 \quad \forall v \in \mathcal{S}_h,$$

e $P_h : H^1 \to \mathcal{S}_h$ o operador de projeção H^1 definido por

$$(u - P_h u, v) + (\nabla(u - P_h u), \nabla v) = 0 \quad \forall v \in \mathcal{S}_h.$$

Então, as seguintes propriedades de aproximação são válidas

$$\|u - Q_h u\|_0 + h\|\nabla(u - Q_h u)\|_0 \leq Ch\|u\|_{H^1} \quad \forall u \in H^1(\Omega) \qquad \mathbf{4.2}$$

$$\|u - Q_h u\|_0 \leq Ch^2\|u\|_{H^2} \quad \forall u \in H^2(\Omega) \qquad \mathbf{4.3}$$

$$\|u - P_h u\|_0 + h\|\nabla(u - P_h u)\|_0 \leq Ch^2\|u\|_{H^2} \quad \forall u \in H^2(\Omega) \qquad \mathbf{4.4}$$

$$\|u - P_h u\|_{L^\infty} \leq Ch\|u\|_{H^2} \quad \forall u \in H^2(\Omega) \qquad \mathbf{4.5}$$

$$\|(u - P_h u)_t\|_{L^2(0,T;L^2)} + \leq Ch^2\|u_t\|_{L^2(0,T;H^2)} \quad \forall u \in H^1(0,T;H^2(\Omega)). \qquad \mathbf{4.6}$$

A demonstração destas desigualdades pode ser feita utilizando as propriedades do operador de interpolação $\mathscr{I}^h$ e as estimativas inversas descritas em **[6]** e **[9]**.

4.5 A Estimativa Espectral Adaptada

Como vimos no capítulo 4, a estimativa espectral de De Mottoni, Schatzman e Chen é um dos ingredientes essenciais no desenvolvimento de uma estimativa de erro polinomial em ϵ^{-1} para o problema de Allen-Cahn. Portanto, é natural que façamos algum uso da mesma novamente neste capítulo. Todavia, como veremos adiante, será necessário fazer uma pequena adaptação na mesma. Ao invés de utilizarmos o operador $L_{AC} = -\Delta + f'(u)I$, utilizamos $L_{AC}^h = -\Delta + f'(P_h u)I$. Então, é necessário mostrar que, mesmo com esta adaptação, ainda temos uma desigualdade similar à do lema **6**. Esta é a função do lema a seguir.

Lema 7. Defina o operador de Allen-Cahn discreto (L_{AC}^h) da seguinte forma: $L_{AC}^h : H^2(\Omega) \to L^2(\Omega)$ é tal que, para cada $\psi \in H^2(\Omega)$,

$$L_{AC}(\psi) = -\Delta\psi + f'(P_h u)\psi,$$

em que $u \in H^2(\Omega)$ é a solução do problema de Allen-Cahn fraco **1.1**, em algum instante de tempo fixo. Então, existe uma constante $C_0 > 0$, independente de ϵ, tal que, se ϵ for suficientemente pequeno, o autovalor principal de $L_{AC}^h(\lambda_{AC})$ satisfaz

$$\lambda_{AC}^h \equiv \inf_{\psi \in H^1, \psi \neq 0} \frac{\|\nabla\psi\|^2 + \epsilon^{-2}(f'(P_h u)\psi, \psi)}{\|\psi\|^2} \geq -2C_0,$$

desde que h satisfaça a desigualdade

$$h \leq \frac{C_0}{12C_2}\epsilon^{\max(\sigma_1+3, \sigma_2+2)}. \qquad \mathbf{4.7}$$

Em que C_2 é a menor constante positiva independente de ϵ para a qual vale

$$\|u - P_h u\|_{L^\infty} \leq C_2 h \epsilon^{\min(-\sigma_1-1, -\sigma_2)}.$$

(A existência de C_2 segue do teorema **7**, item **4.5** e da estimativa **2.3**.)

Demonstração: Vamos reproduzir aqui uma adaptação da prova de **[14]** para este resultado.

Inicialmente observe que condição em h nos garante que

$$\|u - P_h u\|_{L^\infty} \leq C_2 h \epsilon^{\min(-\sigma_1 - 1, -\sigma_2)} \leq \frac{C_0}{12}\epsilon^2.$$

Portanto, se $\epsilon^2 \leq \frac{12}{C_0}$, então $\|u - P_h u\|_{L^\infty} \leq 1$, e, pela desigualdade triangular e pelo Princípio do Máximo, vale

$$\|P_h u\|_{L^\infty(0,T;L^\infty)} \leq \|u\|_{L^\infty(0,T;L^\infty)} + \|P_h u - u\|_{L^\infty(0,T;L^\infty)} \leq 2.$$

Daí segue que

$$\|f'(P_h u) - f'(u)\|_{L^\infty(0,T;L^\infty)} \leq \max_{|\xi|\leq 2} |f''(\xi)| \|P_h u - u\|_{L^\infty(0,T;L^\infty)} \leq C_0 \epsilon^2,$$

pois $\max_{|\xi|\leq 2} |f''(\xi)| = 12$.

Donde concluímos que $f'(P_h u) \geq f'(u) - C_0\epsilon^2$.

Portanto,

$$\lambda_{AC}^h \equiv \inf_{\psi \in H^1, \psi \neq 0} \frac{\|\nabla\psi\|^2 + \epsilon^{-2}(f'(P_h u)\psi, \psi)}{\|\psi\|^2} \geq$$
$$\inf_{\psi \in H^1, \psi \neq 0} \frac{\|\nabla\psi\|^2 + \epsilon^{-2}(f'(u)\psi, \psi) - (C_0\psi, \psi)}{\|\psi\|^2} = \lambda_{AC} - C_0$$

e o resultado segue aplicando o lema **6**.

4.6 A Estimativa de Erro

Os resultados das últimas três seções, juntamente com algumas estimativas de energia que provamos no capítulo 2 são os ingredientes necessários para o desenvolvimento de uma análise de erro para a solução por elementos finitos do problema de Allen-Cahn. Agora que temos posse de todos estes ingredientes, vamos enunciar e provar as estimativas de erro que são o principal objetivo deste capítulo.

Teorema 8. Suponha as hipóteses H1,H2 e H3 e seja $\{U_m\}_{m=0}^M$ uma solução de **4.1** numa malha de tempo uniforme de tamanho k e numa malha espacial quase-uniforme $\mathcal{T}_h$ de tamanho h. Suponha ainda, que existam constantes C, C_0 e C_2 (as duas últimas já foram definidas no lema **7**) tais que,

$$k \leq C\min(\epsilon^2, \epsilon^{\alpha_1}),$$
$$h \leq \frac{C_0}{12C_2}\epsilon^{\max(\sigma_1+3,\sigma_2+2)}$$
$$k^2 + h^4 \leq C\epsilon^{2\alpha_2}$$

Então, se $U_0 = P_h u(t_0)$, as seguintes estimativas de erro são válidas

$$\|u(t_m) - U_m\|_0 \lesssim (k + h^2)\epsilon^{\min(-\sigma_1-2,\ -\sigma_2,\ -\sigma_3)}, \qquad \textbf{4.8}$$

$$(k\sum_{m=0}^{M} \|\nabla(u(t_m) - U_m)\|_0^2)^{\frac{1}{2}} \lesssim (k + h)\epsilon^{\min(-\sigma_1-3,-\sigma_2,-\sigma_3-1)}. \qquad \textbf{4.9}$$

Demonstração: Para provar este resultado, a ideia é decompor o erro global $E_m = u(t_m) - U_m$ em duas partes, $E_m = \Theta_m + \Phi_m$, em que

$$\Theta_m = u(t_m) - P_h u(t_m) \text{ é o erro de representação em } \mathcal{S}_h \text{ e,}$$
$$\Phi_m = P_h u(t_m) - U_m \in \mathcal{S}_h \subset H^2 \text{ é o erro do método de Elementos Finitos,}$$

e tentar repetir os mesmos passos da prova do teorema **6**. Naquela prova, começamos testando a equação que tínhamos com o erro global. Neste caso, isso não é possível, pois só podemos testar a equação com elementos de $\mathcal{S}_h$. Desta forma, é natural usarmos Φ_m. Portanto, o primeiro passo é testar **4.1** com $v_h = \Phi_m$ e subtrair da equação forte (AC) também testada com Φ_m. Iremos obter uma equação para o erro

$$(d_t E_m, \Phi_m) + (\nabla E_m, \nabla\Phi_m) + \epsilon^{-2}(f(u(t_m)) - f(U_m), \Phi_m)$$
$$= (R_m, \Phi_m) + sk\epsilon^{-2}(d_t U_m, \Phi_m) - \epsilon^{-2}(f(U_m) - f(U_{m-1}), \Phi_m), \qquad \textbf{4.10}$$

em que R_m é o mesmo definido no capítulo 4,

$$R_m = -\frac{1}{k}\int_{t_{m-1}}^{t_m} (s - t_{m-1})u_{tt}(s)ds. \qquad \textbf{4.11}$$

Multiplicando a equação **4.10** por k, utilizando a decomposição $E_m = \Theta_m + \Phi_m$ e somando o termo $(f(P_h u(t_m)), \Phi_m)$ à ambos lados, ficamos com,

$$\frac{1}{2}d_t\|\Phi_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t\Phi_m\|_0^2 + \|\nabla\Phi_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}(f(P_h u(t_m)) - f(U_m), \Phi_m)$$
$$= (R_m, \Phi_m) + sk\epsilon^{-2}(d_t U_m, \Phi_m) - \epsilon^{-2}(f(U_m) - f(U_{m-1}), \Phi_m) - (d_t\Theta_m, \Phi_m)$$
$$- (\nabla\Theta_m, \nabla\Phi_m) - \epsilon^{-2}(f(u(t_m)) - f(P_h u(t_m)), \Phi_m). \qquad \textbf{4.12}$$

Para os três primeiros termos do lado direito, repetimos as estimativas da prova do teorema **6**

$$(R_m, \Phi_m) \leq \frac{1}{2}\|R_m\|_0^2 + \frac{1}{2}\|\Phi_m\|_0^2. \qquad \mathbf{4.13}$$

$$sk\epsilon^{-2}(d_tU_m, \Phi_m) \leq \frac{1}{2}k^2\epsilon^{-4}\|d_tU_m\|_0^2 + \frac{1}{2}s^2\|\Phi_m\|_0^2, \qquad \mathbf{4.14}$$

$$-\frac{1}{\epsilon^2}(f(U_m)) - f(U_{m-1}), \Phi_m) \leq \frac{1}{2}k^2\epsilon^{-4}\|d_tU_m\|_0^2 + \frac{1}{2}L^2\|\Phi_m\|_0^2, \qquad \mathbf{4.15}$$

Para os termos $-(d_t\Theta_m, \Phi_m)$ e $-(\nabla\Theta_m, \nabla\Phi_m)$ temos que

$$-(d_t\Theta_m, \Phi_m) \leq \frac{1}{2}\|d_t\Theta_m\|_0^2 + \frac{1}{2}\|\Phi_m\|_0^2, \qquad \mathbf{4.16}$$

e, como $(\Theta_m, v)_{H^1} = 0$ para todo $v \in \mathcal{S}_h$, segue que $(\Theta_m, \Phi_m)_{H^1} = 0$, portanto,

$$-(\nabla\Theta_m, \nabla\Phi_m) = (\Theta_m, \Phi_m) \leq \frac{1}{2}\|\Theta_m\|_0^2 + \frac{1}{2}\|\Phi_m\|_0^2. \qquad \mathbf{4.17}$$

Já para o termo $-\epsilon^{-2}(f(u(t_m)) - f(P_hu(t_m)), \Phi_m)$, lembramos que a função $f(z)$ é Lipschitiziana, com constante de Lipschitz L. Então vale a desigualdade,

$$-\epsilon^{-2}(f(u(t_m)) - f(P_hu(t_m)), \Phi_m) \leq \frac{L^2\epsilon^{-4}}{2}\|\Theta_m\|_0^2 + \frac{1}{2}\|\Phi_m\|_0^2. \qquad \mathbf{4.18}$$

Usando todas estas estimativas em **4.12** obtemos

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}d_t\|\Phi_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t\Phi_m\|_0^2 + \|\nabla\Phi_m\|_0^2 + \epsilon^{-2}(f(P_hu(t_m)) - f(U_m), \Phi_m)& \\ \leq \frac{1}{2}\|R_m\|_0^2 + \frac{4 + s^2 + L^2}{2}\|\Phi_m\|_0^2 + k^2\epsilon^{-4}\|d_tU_m\|_0^2& \\ + \frac{1}{2}\|d_t\Theta_m\|_0^2 + \frac{2 + L^2\epsilon^{-4}}{2}\|\Theta_m\|_0^2.& \qquad \mathbf{4.19}\end{aligned}$$

Perceba agora que o termo $\epsilon^{-2}(f(P_hu(t_m)) - f(U_m), \Phi_m)$ pode ser tratado de forma idêntica ao termo $\epsilon^{-2}(f(u(t_m)) - f(u_m), e_m)$ na prova do teorema **6** (ver equações **3.6**, **3.7** e **3.8**). Fazendo isso, ficamos com

$$\epsilon^{-2}(f(P_hu(t_m)) - f(U_m), \Phi_m) \geq -\frac{L}{2\epsilon^2}\|\Phi_m\|_{L^3}^3 + (f'(P_hu(t_m))\Phi_m, \Phi_m). \qquad \mathbf{4.20}$$

Aplicando isto em **4.19**

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}d_t\|\Phi_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t\Phi_m\|_0^2 + \big\{\|\nabla\Phi_m\|_0^2 + (f'(P_h u(t_m))\Phi_m, \Phi_m)\big\} \\
\le \frac{1}{2}\|R_m\|_0^2 + \frac{4+s^2+L^2}{2}\|\Phi_m\|_0^2 + k^2\epsilon^{-4}\|d_t U_m\|_0^2 \\
+ \frac{1}{2}\|d_t\Theta_m\|_0^2 + \frac{2+L^2\epsilon^{-4}}{2}\|\Theta_m\|_0^2 + \frac{L}{2\epsilon^2}\|\Phi_m\|_{L^3}^3. \quad \mathbf{4.21}
\end{aligned}
$$

Podemos agora utilizar a estimativa espectral adaptada (lema **7**) para estimar o termo entre chaves na desigualdade acima e obter

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}d_t\|\Phi_m\|_0^2 + \frac{k}{2}\|d_t\Phi_m\|_0^2 \le \frac{1}{2}\|R_m\|_0^2 + \frac{4+4C_0+s^2+L^2}{2}\|\Phi_m\|_0^2 + k^2\epsilon^{-4}\|d_t U_m\|_0^2 \\
+ \frac{1}{2}\|d_t\Theta_m\|_0^2 + \frac{2+L^2\epsilon^{-4}}{2}\|\Theta_m\|_0^2 + \frac{L}{2\epsilon^2}\|\Phi_m\|_{L^3}^3. \quad \mathbf{4.22}
\end{aligned}
$$

Multiplicando por k e somando de $m = 1$ até $m = \ell \le M$

$$
\begin{aligned}
\|\Phi_\ell\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{\ell} k\|d_t\Phi_m\|_0^2 \le (4+4C_0+s^2+L^2)k\sum_{m=1}^{\ell}\|\Phi_m\|_0^2 \\
+ \frac{kL}{\epsilon^2}\sum_{m=1}^{\ell}\|\Phi_m\|_{L^3}^3 + 2k^3\epsilon^{-4}\sum_{m=1}^{\ell}\|d_t U_m\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{\ell}\|R_m\|_0^2 \\
+ k\sum_{m=1}^{\ell}\|d_t\Theta_m\|_0^2 + (2+L^2\epsilon^{-4})k\sum_{m=1}^{\ell}\|\Theta_m\|_0^2 + \|\Phi_0\|_0^2. \quad \mathbf{4.23}
\end{aligned}
$$

Os últimos cinco termos do lado direito de **4.23** podem ser cotados por potências de ϵ. Mais precisamente, podemos usar o item (i) da proposição **2**, **3.19**, as estimativas **4.4** e **4.6**, para concluir que

$$
\begin{aligned}
2k^3\epsilon^{-4}\sum_{m=1}^{\ell}\|d_tU_m\|_0^2 &\lesssim k^2\epsilon^{-2\sigma_1-4},\\
k\sum_{m=1}^{\ell}\|R_m\|_0^2 &\lesssim k^2\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)},\\
k\sum_{m=1}^{\ell}\|d_t\Theta_m\|_0^2 &\lesssim h^4\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)},\\
(2+L^2\epsilon^{-4})k\sum_{m=1}^{\ell}\|\Theta_m\|_0^2 &\lesssim h^4\epsilon^{-2\sigma_1-4},\\
\|\Phi_0\|_0^2 = \|P_hu(t_0)-U_0\|_0^2 &= 0.
\end{aligned}
\tag{4.24}
$$

Aplicando estas desigualdades em **4.23**,

$$
\begin{aligned}
\|\Phi_\ell\|_0^2 + k\sum_{m=1}^{\ell}k\|d_t\Phi_m\|_0^2 \le{}& (4+4C_0+s^2+L^2)k\sum_{m=1}^{\ell}\|\Phi_m\|_0^2\\
&+\frac{kL}{\epsilon^2}\sum_{m=1}^{\ell}\|\Phi_m\|_{L^3}^3+\widetilde{C}(k^2+h^4)\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}.
\end{aligned}
\tag{4.25}
$$

Perceba agora que esta desigualdade é análoga à **3.20**, e as condições impostas sobre k e h no enunciado do teorema **8** são análogas às usadas no teorema **6**. Portanto, podemos repetir a cota para o termo $\|\Phi_m\|_{L^3}^3$ que utilizamos na prova do teorema **6** e também o argumento indutivo para concluir que

$$
\max_{1\le\ell\le M}\|\Phi_\ell\|_0^2 + k\sum_{m=0}^{M}k\|d_t\Phi_m\|_0^2 \lesssim (k^2+h^4)\epsilon^{2\min(-\sigma_1-2,-\sigma_3)}
\tag{4.26}
$$

e,

$$
k\sum_{m=1}^{M}\|\nabla\Phi_m\|_0^2 \lesssim (k^2+h^4)\epsilon^{2\min(-\sigma_1-3,-\sigma_3-1)}.
\tag{4.27}
$$

Perceba que para repetir a prova do teorema **6** aqui, é necessário, para o uso da desigualdade de Gagliardo-Niremberg, que Φ_m tenha regularidade H^2. Por isso, utilizamos o espaço de elementos finitos de Argyris. É válido mencionar que em **[14]**, os autores utilizam elementos C^0 que garantem apenas regularidade H^1 para Φ_m. Por conta disto, eles fazem o uso da desigualdade de Gagliardo-Niremberg de forma local. Não é claro para este autor como contornar uma possível dependência em h que surgiria na constante da referida desigualdade utilizando esta abordagem.

Retornando a nossa estimativa de erro, note que, de **4.26**, segue que

$$\|P_h u(t_m) - U_m\|_0 \lesssim (k + h^2)\epsilon^{\min(-\sigma_1 - 2,\ -\sigma_3)}, \qquad \textbf{4.28}$$

e de **4.27**, que,

$$(k \sum_{m=1}^{M} \|\nabla(P_h u(t_m) - U_m)\|_0^2)^{\frac{1}{2}} \lesssim (k + h^2)\epsilon^{\min(-\sigma_1 - 3, -\sigma_3 - 1)}. \qquad \textbf{4.29}$$

Por fim, basta cotar as outras partes dos erros, o que é feito facilmente com o uso de **4.4** (teorema **7**) e **2.3**(lema **3**)

$$\|u(t_m) - P_h u(t_m)\|_0 \lesssim h^2 \epsilon^{\min(-\sigma_1 - 1,\ -\sigma_2)} \qquad \textbf{4.30}$$

$$\|\nabla(u(t_m) - P_h u(t_m))\|_0 \lesssim h\epsilon^{\min(-\sigma_1 - 1,\ -\sigma_2)} \qquad \textbf{4.31}$$

Usando a desigualdade triangular, concluímos que,

$$\|u(t_m) - U_m\|_0 \lesssim \|u(t_m) - P_h u(t_m)\|_0 + \|P_h u(t_m) - U_m\|_0 \lesssim (k + h^2)\epsilon^{\min(-\sigma_1 - 2,\ -\sigma_2,\ -\sigma_3)}, \qquad \textbf{4.32}$$

e, de forma similar,

$$(k \sum_{m=1}^{M} \|\nabla(u(t_m) - U_m)\|_0^2)^{\frac{1}{2}} \lesssim (k + h)\epsilon^{\min(-\sigma_1 - 3, -\sigma_2, -\sigma_3 - 1)}. \qquad \textbf{4.33}$$

Isto completa a prova do teorema **8** e conclui o presente trabalho.

Apêndice A

Lista de Resultados Úteis

Neste apêndice, vamos enunciar alguns dos principais teoremas e resultados importantes que utilizamos durante o trabalho. Também iremos fornecer referências para suas demonstrações.

Teorema 9. Teorema de Picard-Lindelof

Seja E um espaço de Banach e $f : [t_0 - a, t_0 + a] \times B(x_0, b) \subset R \times E \to E$ uma aplicação limitada, continua e lipschitziana em relação à segunda variável (note que se E tem dimenão finita, a condição de limitada é redundante). Então, existe uma única solução do problema de Cauchy:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = f(t, x) \\ x(t_0) = x_0, \end{cases}$$

definida em $[t_0 - \alpha, t_0 + \alpha]$.

Onde $\alpha = \min\{a, \frac{b}{M}\}$ e, $M = \sup\{|f(t, x)|, (t, x) \in [t_0 - a, t_0 + a] \times B(x_0, b)\}$.

Para uma prova deste teorema, o leitor pode consultar, por exemplo, o capítulo 2 de **[10]**.

Teorema 10. Teorema de Banach-Alaoglu

Para todo espaço normado E, a bola $B_{E'}$ é compacta na topologia fraca-estrela $\sigma(E', E)$ de E' (aqui, E' denota o dual de E).

Para uma prova deste teorema, o leitor pode consultar qualquer livro de Análise Funcional, como por exemplo, **[4]**.

Teorema 11. Lema de Gronwall

Sejam Ψ, $G : [0, T] \to \mathbb{R}$ funções contínuas, com G não-decrescente e γ um número real positivo. Se:

$$\Psi(t) \leq G(t) + \gamma \int_0^t \Psi(s) ds \quad \text{q.t.p. em } [0, T]$$

então:

$$\Psi(t) \leq G(t) \exp(\gamma t) \quad \text{q.t.p. em } [0, T]$$

Para uma prova deste resultado, o leitor pode consultar, por exemplo, o capítulo 9 de **[19]**.

Teorema 12. Lema de Stampacchia

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto limitado e $G : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ uma função lipschitziana, com $G(0) = 0$ e $u : \Omega \to \mathbb{R}$ uma função de $H^1(\Omega)$. Então $G(u) \in H^1(\Omega)$ e vale:

$$\nabla G(u) = G'(u) \nabla u$$

Para uma prova deste resultado, o leitor pode consultar, por exemplo, o capítulo 2 de **[22]**.

Teorema 13. Cálculo em espaços de Sobolev envolvendo tempo - versão 1

Considere um espaço Banach X e uma funçao $u \in W^{1,p}(0, T; X)$, $1 \leq p \leq \infty$. Então,

(i) $u \in C(0, T; X)$ (após possivelmente alguma redefinição em um conjunto de medida zero).

(ii) $u(t) = u(s) + \int_s^t u'(\tau) d\tau$ para todo $0 \leq s \leq t \leq T$.

(iii) Além disso, temos a estimativa

$$\max_{0 \leq t \leq T} \|u(t)\|_0 \leq C \|u\|_{W^{1,p}(0,T;X)}$$

em que a constante C depende apenas de T.

Para uma prova deste resultado, o leitor pode consultar, por exemplo, **[12]**.

Teorema 14. Cálculo em espaços de Sobolev envolvendo tempo - versão 2

Seja U um conjunto aberto e suponha que $u \in L^2(0, T; H^1(U))$, com $u' \in L^2(0, T; H^{-1}(U))$, então,

(i) $u \in C(0,T; L^2(U))$ (após possivelmente alguma redefinição em um conjunto de medida zero).

(ii) A aplicação $t \to \|u\|_0^2$ é absolutamente contínua, com

$$\frac{d}{dt}\|u(t)\|_0^2 = 2\langle u'(t), u(t)\rangle$$

para quase todo t em $[0,T]$.

(iii) Além disso, temos a estimativa

$$\max_{0\leq t\leq T} \|u(t)\|_0 \leq C(\|u\|_{L^2(0,T;H^1)} + \|u'\|_{L^2(0,T;H^{-1})})$$

em que a constante C depende apenas de T.

Para uma prova deste resultado, o leitor pode consultar novamente o livro **[12]**.

Teorema 15. Uma identidade bastante útil

Seja $\{x_n\}_{n=1}^N$ uma sequência de funções em um espaço de Banach U e d_t o operador de diferenciação discreta, com passo de tempo k ($d_t x_n = \frac{x_n - x_{n-1}}{k}$). A seguinte identidade é válida

$$(d_t x_n, x_n) = \frac{1}{2}(d_t\|x_n\|_0^2 + k\|d_t x_n\|_0^2)$$

Como se trata de um resultado bem simples, vamos dar aqui uma prova do mesmo.

Demonstração: Observe que

$$(d_t x_n, x_n) = (d_t x_n, k d_t x_n + x_{n-1}) = k\|d_t x_n\|_0^2 + (d_t x_n, x_{n-1})$$

Podemos agora reescrever o segundo termo do lado direito como $\frac{1}{k}(x_n - x_{n-1}, x_{n-1})$, ficando com

$$(d_t x_n, x_n) = k\|d_t x_n\|_0^2 + \frac{1}{k}(x_n - x_{n-1}, x_{n-1}) = k\|d_t x_n\|_0^2 + \frac{1}{k}(x_n, x_{n-1}) - \frac{1}{k}\|x_{n-1}\|_0^2$$

Observe agora que $(x_n, x_{n-1}) = \|x_n\|_0^2 - (x_n, x_n - x_{n-1})$. Aplicando isto na identidade acima, chegamos a

$$(d_t x_n, x_n) = k\|d_t x_n\|_0^2 + \frac{1}{k}(\|x_n\|_0^2 - (x_n, x_n - x_{n-1})) - \frac{1}{k}\|x_{n-1}\|_0^2 =$$
$$k\|d_t x_n\|_0^2 + \frac{1}{k}(\|x_n\|_0^2 - \|x_{n-1}\|_0^2) - \frac{1}{k}(x_n, x_n - x_{n-1})$$

Por fim, observe que $\frac{1}{k}(\|x_n\|_0^2 - \|x_{n-1}\|_0^2) = d_t\|x_n\|_0^2$ e que $\frac{1}{k}(x_n, x_n - x_{n-1}) = (d_t x_n, x_n)$, portanto

$$(d_t x_n, x_n) = k\|d_t x_n\|_0^2 + d_t\|x_n\|_0^2 - (d_t x_n, x_n)$$

Movendo o último termo do lado direito para o lado esquerdo e dividindo por 2, o resultado segue.

Teorema 16. Desigualdade de Gagliardo Niremberg em domínios limitados

Considere um domínio aberto com fronteira Lipschitz $\Omega \in \mathbb{R}^n$ e sejam $1 \leq q, r \leq \infty$ e $m \in \mathbb{N}$. Sejam também $\alpha \in \mathbb{R}$ e $j \in \mathbb{N}$ tais que

$$\frac{1}{p} = \frac{j}{n} + \left(\frac{1}{r} - \frac{m}{n}\right)\alpha + \frac{1-\alpha}{q},$$

e,

$$\frac{j}{m} \leq \alpha < 1.$$

Então, para funções $u \in L^q(\Omega) \cap W^{m,r}(\Omega)$, a seguinte desigualdade é válida

$$\|\mathrm{D}^j u\|_{L^p} \leq C_1\|\mathrm{D}^m u\|_{L^r}^{\alpha}\|u\|_{L^q}^{1-\alpha} + C_2\|u\|_{L^s},$$

em que $s > 0$ é arbitrário e C_1 e C_2 são constantes que não dependem de u (mas podem depender de Ω).

Para uma prova deste resultado, o leitor pode consultar, por exemplo, **[18]**.

Bibliografia

1 Samuel M Allen and John W Cahn. Mechanisms of phase transformations within the miscibility gap of fe-rich fe-al alloys. *Acta Metallurgica*, 24(5):425–437, 1976.

2 Samuel M Allen and John W Cahn. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Metallurgica*, 27(6):1085–1095, 1979.

3 JF Blowey and CM Elliott. Curvature dependent phase boundary motion and parabolic double obstacle problems. In *Degenerate Diffusions*, pages 19–60. Springer, 1993.

4 G Botelho, D Pellegrino, and E Teixeira. *Fundamentos de Análise Funcional*. Sociedade Brasileira de Matemática, 2012.

5 Dietrich Braess. *Finite elements: Theory, fast solvers, and applications in solid mechanics*. Cambridge University Press, 2007.

6 Susanne Brenner and Ridgway Scott. *The mathematical theory of finite element methods*, volume 15. Springer Science & Business Media, 2007.

7 JW Cahn and SM Allen. A microscopic theory for domain wall motion and its experimental verification in fe-al alloy domain growth kinetics. *Le Journal de Physique Colloques*, 38(C7):C7–51, 1977.

8 Xinfu Chen. Spectrum for the Allen-Cahn, Cahn-Hilliard, and phase-field equations for generic interfaces. *Comm. Partial Differential Equations*, 19(7-8):1371–1395, 1994.

9 Philippe G Ciarlet. The finite element method for elliptic problems. *Classics in applied mathematics*, 40:1–511, 2002.

10 AA de Castro Júnior. Curso de equaçoes diferenciais ordinárias. 2009.

11 Piero de Mottoni and Michelle Schatzman. Geometrical evolution of developed interfaces. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 347(5):1533–1589, 1995.

12 Lawrence C. Evans. *Partial differential equations*, volume 19 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, RI, second edition, 2010.

13 Lawrence C Evans, H Mete Soner, and Panagiotis E Souganidis. Phase transitions and generalized motion by mean curvature. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 45(9):1097–1123, 1992.

14 Xiaobing Feng and Andreas Prohl. Numerical analysis of the Allen-Cahn equation and approximation for mean curvature flows. *Numerische Mathematik*, 94(1):33–65, 2003.

15 Edwin Hewitt and Karl Stromberg. *Real and abstract analysis*. Springer-Verlag, New York-Heidelberg, 1975. A modern treatment of the theory of functions of a real variable, Third printing, Graduate Texts in Mathematics, No. 25.

16 John M Holte. Discrete gronwall lemma and applications. In *MAA-NCS meeting at the University of North Dakota*, volume 24, pages 1–7, 2009.

17 Daniel Kessler, Ricardo H Nochetto, and Alfred Schmidt. A posteriori error control for the Allen–Cahn problem: circumventing Gronwall's inequality. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 38(1):129–142, 2004.

18 Louis Nirenberg. On elliptic partial differential equations. In *Il principio di minimo e sue applicazioni alle equazioni funzionali*, pages 1–48. Springer, 2011.

19 Sandro Salsa. *Partial differential equations in action*, volume 99 of *Unitext*. Springer, [Cham], third edition, 2016. From modelling to theory, La Matematica per il 3+2.

20 Jacques Simon. Compact sets in the space lp(o, t; b). *Annali di Matematica pura ed applicata*, 146(1):65–96, 1986.

21 Xiaofeng Yang. Error analysis of stabilized semi-implicit method of Allen-Cahn equation. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 11(4):1057–1070, 2009.

22 William P Ziemer. *Weakly differentiable functions: Sobolev spaces and functions of bounded variation*, volume 120. Springer Science & Business Media, 2012.