

**ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ  
ΓΕΝΙΚΟ ΤΜΗΜΑ**



**ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ  
ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΕΣ ΕΠΙΣΤΗΜΕΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ**

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟΥ ΔΙΠΛΩΜΑΤΟΣ ΕΙΔΙΚΕΥΣΗΣ  
ΚΑΤΕΥΘΥΝΣΗ : «ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΑ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ»**

**ΜΕΛΕΤΗ ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ ΑΛΛΑΓΗΣ ΦΑΣΗΣ**

**ΑΦΡΟΔΙΤΗ ΤΑΛΙΔΟΥ**

Επιβλέπων: Αναπληρωτής Καθηγητής **ΑΝΑΡΓΥΡΟΣ ΔΕΛΗΣ**

**ΧΑΝΙΑ , 2014**

# Περιεχόμενα

Ευχαριστίες . . . . .	3
Περίληψη . . . . .	4
<b>1 Εισαγωγή</b>	<b>5</b>
1.1 Η Εξίσωση Allen-Cahn . . . . .	7
1.2 Η Εξίσωση Cahn-Hilliard . . . . .	8
1.3 Η Διαδικασία Wiener . . . . .	9
<b>2 Βασικές Έννοιες και Ορισμοί</b>	<b>10</b>
2.1 Ημινόρμες και Νόρμες . . . . .	10
2.2 Αναλυτική Ημιομάδα . . . . .	13
2.3 Η Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων . . . . .	20
2.4 Η Στοχαστική Συνέλιξη . . . . .	23
2.5 Το Λήμμα Gronwall . . . . .	24
2.6 Χρήσιμες Ανισότητες . . . . .	26
2.7 Φράγματα για τον Μη-Γραμμικό Όρο . . . . .	27
<b>3 Το Συνδυασμένο Μοντέλο</b>	<b>29</b>
3.1 Μικροσκοπική Μοντελοποίηση . . . . .	29
3.2 Στοχαστικές Μικροσκοπικές Δυνάμεις . . . . .	30
3.2.1 Προσρόφηση/ Εκρόφηση - Spin Flip Μηχανισμός . . . . .	30
3.2.2 Επιφανειακή Διάχυση - Δυνάμεις Spin Exchange . . . . .	30
3.3 Μεσοσκοπικά Μοντέλα . . . . .	31
3.3.1 Μεσοσκοπικά Μοντέλα για Πολλαπλούς Μηχανισμούς . . . . .	32
3.3.2 Συσχέτιση με τα Μοντέλα Cahn-Hilliard και Allen-Cahn . . . . .	33
3.3.3 Ένα Απλοποιημένο Μοντέλο με Πολλαπλούς Μικροσκοπικούς Μηχανισμούς . . . . .	34
3.4 Μαθηματική Δομή της Βαθμωτής Εξίσωσης CH/ AC . . . . .	34
<b>4 Η Εξίσωση Cahn-Hilliard/Allen-Cahn</b>	<b>39</b>
4.1 Το Συνεχές Πρόβλημα . . . . .	39
4.2 Το Πρόβλημα Πεπερασμένων Στοιχείων . . . . .	42

5	Ομαλότητα της Λύσης	43
6	Συμπεράσματα	49
	Βιβλιογραφία . . . . .	50

# Ευχαριστίες

Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία πραγματοποιήθηκε στα πλαίσια του Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών 'Εφαρμοσμένες Επιστήμες και Τεχνολογία' με ειδίκευση στην κατεύθυνση 'Εφαρμοσμένα και Υπολογιστικά Μαθηματικά' του πρώην Γενικού Τμήματος του Πολυτεχνείου Κρήτης.

Στο σημείο αυτό αισθάνομαι την ανάγκη να εκφράσω τις ειλικρινείς ευχαριστίες μου σε όσους συνέβαλαν στην ολοκλήρωση αυτής της προσπάθειας:

Πρώτα απ' όλα, στον επιβλέπων της διατριβής μου Αν. καθηγητή κ. Αργύρη Δελή για την δυνατότητα που μου έδωσε να πραγματοποιήσω την εργασία μου, αλλά και για την άριστη συνεργασία που είχαμε σε όλη τη διάρκεια των μεταπτυχιακών μου σπουδών.

Η ολοκλήρωση της μεταπτυχιακής αυτής εργασίας θα ήταν αδύνατη χωρίς την πολύτιμη υποστήριξη της Αν. καθηγήτριας κ. Γεωργίας Καραλή. Της εκφράζω ένα βαθύ ευχαριστώ για την αδιάκοπη συμπαράσταση και ενθάρρυνση καθώς και την οικονομική υποστήριξη που μου πρόσφερε. Επίσης τον Επ. καθηγητή του Πολυτεχνείου Κρήτης, κ. Εμμανουήλ Μαθιουδάκη ως μέλος της επιτροπής αξιολόγησης.

Ιδιαίτερα, θέλω να ευχαριστήσω την κ. Δήμητρα Αντωνοπούλου για τη συνεχή καθοδήγηση και τις ουσιώδεις συμβουλές της.

Τέλος, ευχαριστώ τους γονείς μου και την αδερφή μου, που με μεγάλη υπομονή και κουράγιο πρόσφεραν την απαραίτητη ηθική συμπαράσταση για την ολοκλήρωση της μεταπτυχιακής μου εργασίας.

# Περίληψη

Η επιφανειακή διάχυση και η προσρόφηση/ εκρόφηση (adsorption/ desorption) αποτελούν τους μικροσκοπικούς μηχανισμούς που περιλαμβάνονται στις διαδικασίες της επιφάνειας και στην μακροσκοπική μορφολογία ενός συμπλέγματος. Οι διαδικασίες αυτές περιλαμβάνουν την μεταφορά ουσιών στην φάση του αερίου, δηλαδή τα αντιδρώντα σώματα προσροφούνται στην επιφάνεια του υποστρώματος όπου πολυάριθμες διαδικασίες μπορούν να λάβουν μέρος ταυτόχρονα. Στην εργασία αυτή θα συζητήσουμε εν συντομία για τους μικροσκοπικούς μηχανισμούς που συμβαίνουν στις διαδικασίες της επιφάνειας και τις συνδέσεις τους με μεσοσκοπικούς μηχανισμούς. Από την άλλη πλευρά, θα μελετήσουμε με αυστηρό τρόπο την συμπεριφορά της βαθμωτής εξίσωσης Cahn-Hilliard/ Allen-Cahn, η οποία αποτελεί γνωστό μοντέλο για τον διαχωρισμό των φάσεων και συνδέεται άμεσα με τις μεσοσκοπικές εξισώσεις. Στη συνέχεια, θα εξετάσουμε την μη-γραμμική στοχαστική εξίσωση Cahn-Hilliard/ Allen-Cahn που διαταράσσεται από θόρυβο σε ένα φραγμένο χωρίο στον  $\mathbb{R}^d$ , με  $d = 1, 2, 3$ , με ομαλό σύνορο. Κάνοντας χρήση της αναλυτικής ημιομάδας παρουσιάζουμε την εξίσωση σε μια ήπια στοχαστική ολοκληρωτική μορφή. Τέλος, αφού λάβουμε υπόψη μας την μοναδικότητα της ασθενούς λύσης της εξίσωσης - κάτω από ορισμένες προϋποθέσεις - δείχνουμε την ομαλότητα της λύσης της στοχαστικής εξίσωσης Cahn-Hilliard/ Allen-Cahn.

# Κεφάλαιο 1

## Εισαγωγή

Στη Φυσική ο μηχανισμός που περιγράφει την εκρόφηση του σωματιδίου από την επιφάνεια στη φάση του αερίου και αντιστρόφως την προσρόφηση του σωματιδίου από τη φάση του αερίου στην επιφάνεια ονομάζεται spin flip μηχανισμός και είναι μια αυθόρμητη αλλαγή της παραμέτρου στη θέση  $x$ . Επιπλέον, ο μηχανισμός που περιγράφει την διάχυση ενός σωματιδίου πάνω στην επιφάνεια ονομάζεται spin exchange. Μια spin exchange μεταξύ των γειτονικών θέσεων  $x$  και  $y$  είναι η αυθόρμητη ανταλλαγή των τιμών της παραμέτρου στο  $x$  και στο  $y$ . Στον μηχανισμό αυτό οι θέσεις δεν μπορούν να καταλαμβάνουν περισσότερα από ένα σωματίδια. Οι δυο αυτοί μικρομηχανισμοί λαμβάνουν μέρος στο πλαίσιο των διαδικασιών επιφάνειας, [21].

Εναλλακτικά, μια πιο ακριβής περιγραφή παρέχεται στις στατιστικές θεωρίες της μηχανικής. Για παράδειγμα, μπορούμε να θεωρήσουμε έναν συνδυασμό με Arrhenius δυνάμεις προσρόφησης/ εκρόφησης, επιφανειακή διάχυση Metropolis και μια απλή μονομοριακή αντίδραση: η αντίστοιχη μεσοσκοπική εξίσωση είναι η εξής:

$$u_t - D \nabla \cdot [\nabla u - \beta u(1-u) \nabla J_m * u] - [k_a p(1-u) - k_d u \exp(-\beta J_d * u)] + k_r u = 0. \quad (1.0.1)$$

Εδώ το  $D$  είναι η σταθερά διάχυσης,  $k_r$ ,  $k_d$  και  $k_a$  δηλώνουν αντίστοιχα τις σταθερές αντίδρασης, εκρόφησης και προσρόφησης και  $p$  είναι η μερική πίεση των αέριων ειδών. Υποθέτουμε ότι η μερική πίεση  $p$  είναι σταθερή, αν και στην πραγματικότητα δίνεται από τις εξισώσεις των ρευστών στην αέρια φάση.

Ένα απλοποιημένο μαθηματικό μοντέλο μέσου τύπου που συνδέεται με τα παραπάνω και περιγράφει την επιφανειακή διάχυση, τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων καθώς επίσης και την προσρόφηση σε και εκρόφηση από την επιφάνεια είναι μια μερική διαφορική εξίσωση που γράφεται ως συνδυασμός των εξισώσεων Cahn-Hilliard και Allen-Cahn με προσθετικό θόρυβο. Σε μεγάλες χωροχρονικές κλίμακες οι τυχαίες διακυμάνσεις καταστέλλονται και προκύπτει ένα ντετερμινιστικό πρότυπο, βλ. [17]. Η εξίσωση έχει την παρακάτω μορφή:

$$\begin{cases} \partial_t u &= \epsilon^2 D \left( -\Delta \left( \Delta u + \frac{f(u)}{\epsilon^2} \right) \right) + \Delta u + \frac{f(u)}{\epsilon^2} \\ u(x, 0) &= u_0(x), \end{cases} \quad (1.0.2)$$

όπου  $f(u) = -W'(u)$ ,  $W$  είναι το διπλό δυναμικό με wells  $\pm 1$ ,  $D > 0$  είναι η σταθερά διάχυσης και  $\epsilon$  μια μικρή παράμετρος. Μια τυπική επιλογή για το  $W$  είναι η  $W(u) = (u^2 - 1)^2/4$ , σε αυτή την περίπτωση έχουμε  $f(u) = u - u^3$ . Μια τέτοια ντετερμινιστική εξίσωση έχει μελετηθεί στο [17]. Θυμίζουμε ότι τα μοντέλα Cahn-Hilliard μπορούν να περιγράψουν την επιφανειακή διάχυση συμπεριλαμβάνοντας τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων, ενώ αυτά της Allen-Cahn περιγράφουν ένα απλοποιημένο μοντέλο προσρόφησης προς και εκρόφησης από την επιφάνεια. Αξίζει να σημειωθεί ότι στο μοντέλο που περιγράφεται από την (1.0.2) η κινητικότητα είναι εντελώς διαφορετική από αυτή της εξίσωσης Allen-Cahn. Αυτό συνεπάγεται ότι η διάχυση επιταχύνει την μέση καμπυλότητα. Είναι ευρέως γνωστό ότι οι εξισώσεις Cahn-Hilliard και Allen-Cahn μπορούν να χρησιμεύσουν ως μοντέλα διάχυτης διεπαφής για τον περιορισμό απότομων κινήσεων στην επιφάνεια. Η εξίσωση Allen-Cahn χρησιμεύει ως διάχυτο μοντέλο για την αντίθετη φάση των μικρών σωματιδίων με την έννοια ότι το απλό όριο της εξίσωσης αποδίδει ένα γεωμετρικό πρόβλημα στο οποίο μια απότομη διεπαφή διαχωρίζει τις δυο φάσεις παραλλαγής εξελισσόμενη σύμφωνα με την κίνηση της μέσης καμπυλότητας. Αντίθετα, η εξίσωση Cahn-Hilliard κατασκευάστηκε για να περιγράφει την διατήρηση της μάζας στον διαχωρισμό της φάσης.

Προσθέτοντας έναν στοχαστικό όρο - την διαδικασία Wiener - στην εξίσωση (1.0.2) προκύπτει η στοχαστική εξίσωση της ακόλουθης μορφής:

$$\begin{aligned} u_t &= -\rho\Delta(\Delta u - f'(u)) + (\Delta u - f'(u)) + \sigma(u)\dot{W} \quad \text{στο } \Omega \times [0, T), \\ u(x, 0) &= u_0(x) \quad \text{στο } \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} &= \frac{\partial \Delta u}{\partial \nu} = 0 \quad \text{στο } \partial\Omega \times [0, T). \end{aligned} \tag{1.0.3}$$

Εδώ το  $\Omega$  είναι ένα φραγμένο χωρίο στον  $\mathbb{R}^d$ ,  $d = 1, 2, 3$ , και  $f'(u) = -4u(1 - u^2)$ . Στόχος μας είναι να εξετάσουμε την μερική διαφορική εξίσωση (1.0.3) και την συμπεριφορά της λύσης της, δηλαδή την ομαλότητα. Για τον σκοπό αυτό χρησιμοποιούμε τα αποτελέσματα του άρθρου [4] που αφορούν την ύπαρξη της λύσης και τις τεχνικές που χρησιμοποιήθηκαν στο [22], όπου έγινε η μελέτη της στοχαστικής εξίσωσης Cahn-Hilliard-Cook.

Η δομή της εργασίας έχει ως εξής:

Στο Κεφάλαιο 1 γίνεται αναφορά των εξισώσεων Cahn-Hilliard και Allen-Cahn ξεχωριστά, και διατυπώνονται βασικές έννοιες της διαδικασίας Wiener.

Στο Κεφάλαιο 2 παραθέτουμε ορισμούς, θεωρήματα και σημαντικές ανισότητες που θα μας χρησιμεύσουν στη συνέχεια, όπως η αναλυτική ημιομάδα.

Στο Κεφάλαιο 3 υπάρχει η πλήρης περιγραφή του προβλήματος ως φυσική έννοια και η αυστηρή μελέτη της μαθηματικής δομής της βαθμωτής εξίσωσης Cahn-Hilliard/ Allen-Cahn.

Στο Κεφάλαιο 4 διατυπώνεται το συνεχές πρόβλημα και το πρόβλημα πεπερασμένων στοιχείων της στοχαστικής εξίσωσης Cahn-Hilliard/ Allen-Cahn.

Στο Κεφάλαιο 5 ακολουθεί η μελέτη για την ομαλότητα της λύσης και στο Κεφάλαιο 6 καταγράφονται τα συμπεράσματα της εργασίας.

Αρχικά θεωρούμε χωριστά τις εξισώσεις Allen-Cahn και Cahn-Hilliard. Οι δυο αυτές εξισώσεις έχουν κεντρικό ρόλο στην επιστήμη των μαθηματικών. Αναπαριστούν βασικά μοντέλα με πολλές γενικεύσεις και επεκτάσεις.

## 1.1 Η Εξίσωση Allen-Cahn

Η εξίσωση Allen-Cahn δίνεται από

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \epsilon^2 \Delta u - f(u), & x \in \Omega, \quad t > 0, \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} = 0, & x \in \partial\Omega, \end{cases} \quad (1.1.1)$$

όπου  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ ,  $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $\epsilon$  είναι μια μικρή παράμετρος και  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  είναι η παράγωγος ενός διπλού δυναμικού, με αρχική συνθήκη  $u(x, 0) = u_0(x)$ ,  $x \in \Omega$ . Πιο συγκεκριμένα, το  $\Omega$  είναι ένα φραγμένο χωρίο στον  $\mathbb{R}^{n-1}$  με ομαλό σύνορο, και η  $f$  ικανοποιεί τις παρακάτω συνθήκες: η συνάρτηση  $f$  μηδενίζεται ακριβώς σε τρία σημεία με τις ιδιότητες:

$$\begin{aligned} f(\pm 1) &= 0, \quad f(0) = 0, \\ f'(\pm 1) &> 0, \quad f'(0) < 0, \\ \int_{-1}^1 f(z) dz &= 0. \end{aligned} \quad (1.1.2)$$

Το πρόβλημα αρχικών τιμών (1.1.1) είναι ένα βαθμωτό σύστημα

$$\partial_t u = -\text{grad} E(u), \quad (1.1.3)$$

όπου η ενέργεια  $E$  ορίζεται ως

$$E(u) := \int_{\Omega} \frac{1}{2} (\epsilon^2 |\nabla u|^2 + F(u)) dx, \quad (1.1.4)$$

με  $F' = f$ , όπου η κλίση  $(\nabla \cdot)$  ορίζεται σε σχέση με το  $L^2$  εσωτερικό γινόμενο.

Για να έχουμε πεπερασμένη ενέργεια, επιβάλλεται να υπάρχουν οι παρακάτω συνοριακές συνθήκες:

$$u(x) \rightarrow \pm 1 \quad \text{καθώς} \quad x \rightarrow \partial\Omega.$$

Εδώ θεωρούμε το  $\Omega = \mathbb{R}^d$ , με  $d = 1, 2, 3$ , αν και τα αποτελέσματα μπορούν να επεκταθούν και σε άλλα χωρία.



## 1.2 Η Εξίσωση Cahn-Hilliard

Η εξίσωση Cahn-Hilliard δίνεται από

$$\begin{cases} u_t = -\Delta(\epsilon^2 \Delta u - f(u)), & x \in \Omega, \quad t > 0, \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} = 0, & x \in \partial\Omega, \end{cases} \quad (1.2.1)$$

όπου το χωρίο  $\Omega$  και η συνάρτηση  $f$  ορίζονται όπως προηγουμένως. Η εξίσωση αυτή παράγεται από τον νόμο διατήρησης της μάζας

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\operatorname{div} J, \quad (1.2.2)$$

όπου  $J$  είναι η ροή του υλικού και του νόμου του Fick,

$$J = -D \nabla \mu. \quad (1.2.3)$$

Συνδέοντας το  $J$  με το χημικό δυναμικό  $\mu$  που προέρχεται από την θερμοδυναμική μελέτη έχουμε την έκφραση του τελευταίου ( $\mu$ ) σε όρους ενέργειας,  $E$ ,

$$\mu = \partial u E(u). \quad (1.2.4)$$

Αν πάρουμε την βασική έκφραση (1.1.4) της ενέργειας  $E$  και  $D$  είναι μια σταθερά, τότε η παραπάνω έκφραση συνεπάγεται την  $\frac{\partial u}{\partial t} = D \Delta(-\Delta u + f(u))$ , η οποία είναι η εξίσωση Cahn-Hilliard.

Η εξίσωση Cahn-Hilliard είναι ένα βαθμωτό σύστημα με το συναρτησιακό της ενέργειας (1.1.4) στον χώρο  $H_0^{-1}(\Omega)$ , όπου  $H_0^{-1}(\Omega)$  ορίζεται ως το σύνολο των  $L^2(\Omega)$  συναρτήσεων με μέσο όρο μηδέν και με εσωτερικό γινόμενο

$$\langle u, v \rangle_{H_0^{-1}} := \int_{\Omega} ((-\Delta_N)^{-1} u) v dx,$$

όπου ο  $-\Delta_N$  λύνει την εξίσωση

$$\begin{cases} -\Delta_N w = u, & \text{στο } \Omega, \\ \frac{\partial w}{\partial \nu} = 0, & \text{στο } \partial\Omega. \end{cases}$$

Για την αντίστοιχη νόρμα έχουμε

$$\|u\|_{H_0^{-1}}^2 = \int_{\Omega} |\nabla w|^2 dx.$$

Από την ταυτότητα του Green προκύπτει ότι

$$\int_{\Omega} u dx = \text{σταθερό}$$

μαζί με τις λύσεις της (1.2.1), σε συμφωνία με την διατήρηση του μέσου όρου μάζας των συστατικών του σωματιδίου.

### 1.3 Η Διαδικασία Wiener

Έστω  $Q$  είναι ένας συμμετρικός μη αρνητικός τελεστής στον  $H$ . Θα εξετάσουμε την περίπτωση όπου  $TrQ < +\infty$ . Υπάρχει ένα πλήρες ορθοκανονικό σύστημα  $\{e_j\}$  και μια φραγμένη ακολουθία μη αρνητικών πραγματικών αριθμών  $\lambda_j$  τέτοια ώστε

$$Qe_j = \lambda_j e_j, \quad j = 1, 2, \dots$$

Για τυχαίο  $t$ ,  $W$  είναι η διαδικασία  $Q$ -Wiener και ισχύει η παρακάτω έκφραση

$$W(t) = \sum_{j=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_j} \beta_j(t) e_j \quad (1.3.1)$$

όπου

$$\beta_j(t) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} \langle W(t), e_j \rangle, \quad j = 1, 2, \dots,$$

είναι πραγματικές τιμές της κίνησης Brown ανεξάρτητες μεταξύ τους στον χώρο πιθανότητας  $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{P})$  και οι σειρές στην σχέση (1.3.1) συγκλίνουν στον  $L^2(\Omega, H)$  ως προς τη νόρμα  $\|v\|_{L^2(\Omega, H)} = (\mathbf{E}[\|v\|^2])^{\frac{1}{2}}$ . Εδώ ορίζουμε τον χώρο

$$L^2(\Omega, H) := \{v : \|v\|_{L^2(\Omega, H)} < \infty\}$$

και την νόρμα

$$\|v\|_{L^2(\Omega, H)} := \left( \int_{\Omega} \int_0^T v^2 dt dx \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Θυμίζουμε τους βασικούς ορισμούς για το ίχνος του γραμμικού τελεστή  $T$  στον  $H$  καθώς και την νόρμα Hilbert-Schmidt:

$$Tr(T) = \sum_{j=1}^{\infty} \langle Tf_j, f_j \rangle, \quad \|T\|_{HS} = \left( \sum_{j=1}^{\infty} \|Tf_j\|^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.3.2)$$

όπου  $\{f_j\}_{j=1}^{\infty}$  είναι μια τυχαία ορθοκανονική βάση του  $H$ .

## Κεφάλαιο 2

# Βασικές Έννοιες και Ορισμοί

### 2.1 Ημινόρμες και Νόρμες

Έστω  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ , με  $d = 1, 2, 3$ , είναι ένα φραγμένο χωρίο με σύνορο  $\partial\Omega$ . Έστω  $H = L^2(\Omega)$  είναι ένας χώρος Hilbert στον οποίο ορίζονται τα ακόλουθα εσωτερικά γινόμενα

$$\langle v, w \rangle = \int_{\Omega} v w dx, \quad \langle \nabla v, \nabla w \rangle = \int_{\Omega} \sum_{j=1}^d \frac{\partial v}{\partial x_j} \frac{\partial w}{\partial x_j} dx.$$

Για πραγματικές συναρτήσεις  $v$ , δηλώνουμε παρακάτω με  $\|\cdot\|$  τη νόρμα στον χώρο  $L^2 = L^2(\Omega)$ ,

$$\|v\| = \|v\|_{L^2} = \left( \int_{\Omega} v^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

και για έναν θετικό ακέραιο  $r$ , δηλώνουμε με  $\|\cdot\|_r$  την νόρμα στον χώρο Sobolev  $H^r = H^r(\Omega) = W_2^r(\Omega)$ ,

$$\|v\|_r = \|v\|_{H^r} = \left( \sum_{|a| \leq r} \|D^a v\|^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.1.1)$$

Εδώ το  $D^a = (\partial/\partial x_1)^{a_1} \dots (\partial/\partial x_d)^{a_d}$ , με  $a = (a_1, \dots, a_d)$ , δηλώνει μια αυθαίρετη παράγωγο ως προς  $x$  τάξης  $|a| = \sum_{j=1}^d a_j$ , ώστε το άθροισμα στην (2.1.1) να περιέχει όλες αυτές τις παραγώγους τάξης τουλάχιστον  $r$ .

Έστω ότι  $\dot{H}$  είναι ένας υπόχωρος του  $H$ ,

$$\dot{H} = \left\{ v \in H : \int_{\Omega} v dx = 0 \right\},$$

όπου το χωρίο  $\Omega$  έχει οριστεί προηγουμένως. Ορίζουμε τώρα την ορθογώνια προβολή  $P : H \rightarrow \dot{H}$  και

$$(I - P)v = |\Omega|^{-1} \int_{\Omega} v dx, \quad (2.1.2)$$

είναι ο μέσος όρος της συνάρτησης  $v$ . Στην συνέχεια ορίζουμε τον τελεστή Neumann Laplacian  $A = -\Delta$  στο

$$D(A) = \left\{ u \in H^2 : \frac{\partial u}{\partial \nu} = 0 \text{ στο } \partial\Omega \right\}.$$

**Πρόταση 2.1.1.** *Ο  $A$  είναι θετικά ορισμένος, αυτοσυζυγής και μη φραγμένος γραμμικός τελεστής στο  $\dot{H} \cap D(A)$  με συμπαγή αντίστροφο.*

*Απόδειξη.* Χρησιμοποιούμε τους ορισμούς για κάθε μια από τις παραπάνω υποθέσεις. Αρχικά, θέλουμε να δείξουμε ότι

$$\langle Av, v \rangle > 0, \quad v \neq 0.$$

Για τον σκοπό αυτό χρησιμοποιούμε την αναπαράσταση  $\langle Av, v \rangle = \langle \nabla v, \nabla v \rangle = \|\nabla v\|^2 \geq 0$ . Αν  $\|\nabla v\|^2 = 0$ , τότε έχουμε  $v = \text{σταθερό}$  και  $\int_{\Omega} v ds = 0$ . Επομένως,  $v = 0$  το οποίο είναι αντίθετο με την αρχική υπόθεση. Άρα, ο τελεστής  $A$  είναι θετικά ορισμένος. Επίσης, ο  $A$  είναι αυτοσυζυγής γιατί

$$\langle Av, w \rangle = \langle \nabla v, \nabla w \rangle = \langle \nabla w, \nabla v \rangle = \langle Aw, v \rangle = \langle v, Aw \rangle.$$

Τέλος, θα δείξουμε ότι ο  $A$  είναι μη φραγμένος γραμμικός τελεστής. Αν ο  $A$  ήταν φραγμένος, θα υπήρχε σταθερά  $c$  τέτοια ώστε

$$\|Ax\| \leq c\|x\|, \quad \forall x \in \dot{H} \cap D(A).$$

Θέτουμε μια μη μηδενική ιδιοσυνάρτηση  $x$  και  $\lambda$  την αντίστοιχη ιδιοτιμή. Έχουμε  $\|Ax\| = \|\lambda x\| = |\lambda| \|x\| \leq c\|x\|$  και  $|\lambda| \leq c$ , το οποίο σημαίνει ότι  $|\lambda|$  είναι φραγμένο. Το αποτέλεσμα αυτό αντιτίθεται στην αρχική υπόθεση. Άρα, ο τελεστής  $A$  είναι μη φραγμένος γραμμικός τελεστής.  $\square$

Το πρόβλημα ιδιοτιμών για τον  $A$  είναι

$$Au = \lambda u \text{ στο } \Omega, \quad \frac{\partial u}{\partial \nu} = 0 \text{ στο } \partial\Omega.$$

Για το παραπάνω πρόβλημα ιδιοτιμών υπάρχει μια ακολουθία  $\{\lambda_i\}_{i=0}^{\infty}$  αποτελούμενη από πραγματικές και μη-αρνητικές ιδιοτιμές  $\lambda_i$  που τείνει στο άπειρο με  $i \rightarrow \infty$ , δηλαδή έχουμε

$$0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_i \leq \dots, \quad \lambda_i \rightarrow \infty \text{ καθώς } i \rightarrow \infty.$$

Για το γεγονός ότι η πρώτη ιδιοτιμή είναι μηδέν ( $\lambda_0 = 0$ ) ευθύνεται η αρχική συνθήκη  $\frac{\partial u}{\partial \nu} = 0$ . Έχουμε  $\Delta u = 0$  και λαμβάνουμε  $\lambda_0 = 0$ . Η αντίστοιχη ακολουθία  $\{u_i\}_{i=0}^{\infty}$  των ιδιοσυναρτήσεων σχηματίζει μια ορθοκανονική βάση στον  $L^2 = L^2(\Omega)$ , έτσι ώστε κάθε  $v \in L^2$  υιοθετεί την αναπαράσταση  $v = \sum_{i=0}^{\infty} \langle v, u_i \rangle u_i$  και ισχύει η παρακάτω σχέση (ισότητα Parseval)

$$\langle v, w \rangle = \sum_{i=0}^{\infty} \langle v, u_i \rangle \langle w, u_i \rangle.$$

Η πρώτη ιδιοσυνάρτηση,  $u_0$ , που σχετίζεται με την ιδιοτιμή  $\lambda_0$  είναι σταθερή,  $u_0 = |\Omega|^{-\frac{1}{2}}$ .

Ορίζουμε τον παρακάτω τελεστή

$$A^s v := \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^s \langle v, u_i \rangle u_i, \quad v \in L^2, \quad (2.1.3)$$

όπου  $s \geq 0$ ,  $\lambda_i$  είναι οι ιδιοτιμές και  $u_i$  είναι οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις. Οι ημινόρμες ορίζονται ως

$$|v|_s = \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^s \langle v, u_i \rangle^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.1.4)$$

και οι νόρμες

$$\|v\|_s = (|v|_s^2 + |\langle v, u_0 \rangle|^2)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.1.5)$$

Οι αντίστοιχοι χώροι δίνονται από

$$\dot{H}^s = D(A^{\frac{s}{2}}) = \{v \in \dot{H} : |v|_s < \infty\} \text{ και } H^s = \{v \in H : \|v\|_s < \infty\}.$$

Στον  $L^2$  ισχύει ότι  $\|A^s v\| = \|A^s P v\|$ . Για να αποδείξουμε αυτή την ισότητα χρησιμοποιούμε την  $\langle v, u_i \rangle = \langle P v, u_i \rangle$ ,  $\forall i$ , η οποία ισχύει γιατί  $P$  είναι η προβολή στον  $L^2$ . Έτσι, λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} \|A^s v\| &= \langle A^s v, A^s v \rangle^{\frac{1}{2}} = \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^s \langle v, u_i \rangle u_i, \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^s \langle v, u_i \rangle u_i \right\rangle^{\frac{1}{2}} \\ &= \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^s \langle P v, u_i \rangle u_i, \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^s \langle P v, u_i \rangle u_i \right\rangle^{\frac{1}{2}} \\ &= \langle A^s P v, A^s P v \rangle^{\frac{1}{2}} = \|A^s P v\|. \end{aligned}$$

Επιπλέον, έχουμε

$$\|A^{\frac{s}{2}} P v\| = \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^s \langle v, u_i \rangle^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad s \geq 0, \quad (2.1.6)$$

γιατί από την ισότητα  $\|A^s v\| = \|A^s P v\|$  και τον ορισμό (2.1.3) συμπεραίνουμε ότι

$$\begin{aligned} \|A^{\frac{s}{2}} P v\| &= \|A^{\frac{s}{2}} v\| = \langle A^{\frac{s}{2}} v, A^{\frac{s}{2}} v \rangle^{\frac{1}{2}} = \langle A^s v, v \rangle^{\frac{1}{2}} = \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^s \langle v, u_i \rangle u_i, v \right\rangle^{\frac{1}{2}} \\ &= \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^s \langle v, u_i \rangle \langle u_i, v \rangle \right)^{\frac{1}{2}} = \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^s \langle v, u_i \rangle^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

## 2.2 Αναλυτική Ημιομάδα

Έστω  $e^{-tA^2}$  είναι η ημιομάδα στον  $H$  που γενικεύεται από τον τελεστή  $-A^2$ ,

$$e^{-tA^2}v = \sum_{i=0}^{\infty} e^{-t\lambda_i^2} \langle v, u_i \rangle u_i = \sum_{i=1}^{\infty} e^{-t\lambda_i^2} \langle v, u_i \rangle u_i + \langle v, u_0 \rangle u_0. \quad (2.2.1)$$

Επίσης, ισχύει ότι

$$e^{-tA^2}v = e^{-tA^2}Pv + (I - P)v. \quad (2.2.2)$$

Για να δείξουμε την παραπάνω εξίσωση χρησιμοποιούμε την (2.1.3) και την (2.2.1) και παίρνουμε το εξής:

$$A^s Pv = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^s \langle v, u_i \rangle u_i \Rightarrow e^{-tA^2}Pv = \sum_{i=1}^{\infty} e^{-t\lambda_i^2} \langle v, u_i \rangle u_i.$$

Παράλληλα, υπολογίζουμε τον όρο  $\langle v, u_0 \rangle u_0$ . Από τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου στον  $L^2$  και την τιμή της πρώτης ιδιοσυνάρτησης  $u_0 = |\Omega|^{-\frac{1}{2}}$  έχουμε

$$\langle v, u_0 \rangle u_0 = u_0 \int_{\Omega} v u_0 dx = u_0^2 \int_{\Omega} v dx = |\Omega|^{-1} \int_{\Omega} v dx = (I - P)v. \quad (2.2.3)$$

Εφαρμόζοντας την εξίσωση αυτή στην (2.2.1) λαμβάνουμε την (2.2.2).

**Λήμμα 2.2.1.** Έστω  $v \in H$ . [24] Τότε υπάρχει μια θετική σταθερά  $C$ , ανεξάρτητη από το  $t$ , τέτοια ώστε

$$\int_0^t \|Ae^{-sA^2}Pv\|^2 ds \leq C\|v\|^2. \quad (2.2.4)$$

**Λήμμα 2.2.2.** Έστω  $v \in H$ . Για κάποιον θετικό ακέραιο  $s$  υπάρχουν οι σταθερές  $c$  και  $C$  τέτοιες ώστε

$$\|A^s e^{-tA^2}v\| \leq Ct^{-\frac{s}{2}} e^{-ct} \|v\|, \quad \text{για } t > 0. \quad (2.2.5)$$

Απόδειξη. Χρησιμοποιώντας τον ορισμό (2.1.3) έχουμε

$$\begin{aligned} \|A^s v\| &= \langle A^s v, A^s v \rangle^{\frac{1}{2}} = \langle A^{2s} v, v \rangle^{\frac{1}{2}} = \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{2s} \langle v, u_i \rangle u_i, v \right\rangle^{\frac{1}{2}} \\ &= \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{2s} \langle v, u_i \rangle \langle u_i, v \rangle \right)^{\frac{1}{2}} = \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{2s} \langle v, u_i \rangle^2 \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

και ο ορισμός (2.1.4) της ημινόρμας δίνει

$$|v|_{2s} = \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{2s} |\langle v, u_i \rangle|^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad s \in \mathbb{R}, \quad (2.2.6)$$

όπου, θυμίζουμε ότι  $u_i$  είναι οι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή  $A = -\Delta$  και  $\lambda_i$  είναι οι ιδιοτιμές. Συμπεραίνουμε ότι  $\|A^s v\| = |v|_{2s}$ . Στη συνέχεια, χρησιμοποιούμε την (2.2.6) και αντικαθιστούμε  $v = e^{-tA^2} v$ . Για κάθε  $s > 0$  λαμβάνουμε το εξής

$$\|A^s e^{-tA^2} v\| = |e^{-tA^2} v|_{2s} = \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{2s} \left| \langle e^{-tA^2} v, u_i \rangle \right|^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.2.7)$$

Όμως, για  $j \geq 1$  έχουμε

$$\begin{aligned} \langle e^{-tA^2} v, u_i \rangle &= \sum_{j=1}^{\infty} e^{-t\lambda_j^2} \langle v, u_i \rangle \langle u_i, u_j \rangle + \langle v, u_0 \rangle \langle u_0, u_j \rangle \\ &= e^{-t\lambda_i^2} \langle v, u_i \rangle \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

παίρνοντας απόλυτες τιμές και πολλαπλασιάζοντας κατά μέρη την (2.2.8) με τον εαυτό της έχουμε

$$\left| \langle e^{-tA^2} v, u_i \rangle \right|^2 = e^{-2t\lambda_i^2} |\langle v, u_i \rangle|^2. \quad (2.2.9)$$

Αντικαθιστώντας την (2.2.9) στην (2.2.6) προκύπτει η εξίσωση

$$\|A^s e^{-tA^2} v\| = \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{2s} e^{-2t\lambda_i^2} |\langle v, u_i \rangle|^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.2.10)$$

Χρησιμοποιώντας την ανισότητα Cauchy-Schwarz έχουμε

$$\|A^s e^{-tA^2} v\| \leq \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{2s} e^{-2t\lambda_i^2} \|v\|^2 \|u_i\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \|v\| \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{2s} e^{-2t\lambda_i^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.2.11)$$

Η ασυμπτωτική συμπεριφορά των ιδιοτιμών είναι  $\lambda_i = O(i^{2/d})$ , καθώς  $i \rightarrow +\infty$ , κατά συνέπεια οι σειρές που θα αναλύσουμε είναι:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{2s} e^{-2t\lambda_i^2} \quad \text{για} \quad \lambda_i = O(i^{2/d}), \quad \text{καθώς} \quad i \rightarrow +\infty. \quad (2.2.12)$$

Ο ορισμός του  $t$  δίνει  $t := ti^{\frac{4}{d}}$ . Χρησιμοποιώντας τον τύπο  $e^t > 1 + t$  και τον παραπάνω ορισμό συνεπάγεται ότι

$$e^{-ti^{\frac{4}{d}}} < \frac{1}{1 + ti^{\frac{4}{d}}}. \quad (2.2.13)$$

Αναδιατάσσουμε τους όρους στην (2.2.13) και έχουμε

$$1 < \frac{1}{e^{ti^{\frac{4}{d}}} (1 + ti^{\frac{4}{d}})} < \frac{1}{ti^{\frac{4}{d}} e^{ti^{\frac{4}{d}}}}. \quad (2.2.14)$$

Πολλαπλασιάζοντας και τα δυο μέρη της (2.2.14) με  $i^{\frac{4}{d}}e^{-\frac{ti\frac{4}{d}}{s}}$  παίρνουμε

$$i^{\frac{4}{d}}e^{-\frac{ti\frac{4}{d}}{s}} < \frac{i^{\frac{4}{d}}e^{-\frac{ti\frac{4}{d}}{s}}}{ti^{\frac{4}{d}}e^{ti\frac{4}{d}}}. \quad (2.2.15)$$

Από την άλλη πλευρά,  $i^{\frac{4}{d}}e^{-\frac{ti\frac{4}{d}}{s}} < \frac{1}{i^\beta}$ , για  $t > 0$  και  $s > 0$ , για κάθε δείκτη και μετά για τον λόγο ότι ισχύει  $i^{2+\beta}e^{-\frac{ti\frac{4}{d}}{s}} \rightarrow 0$ , καθώς  $i \rightarrow +\infty$ . Επομένως, έχουμε την ακόλουθη έκφραση

$$i^{\frac{4}{d}+\beta}e^{-\frac{ti\frac{4}{d}}{s}} < 1. \quad (2.2.16)$$

Αντικαθιστώντας την (2.2.16) στην (2.2.15) φτάνουμε στο παρακάτω αποτέλεσμα, που είναι μια πολύ χρήσιμη ανισότητα

$$i^{\frac{4}{d}}e^{-\frac{ti\frac{4}{d}}{s}} < \frac{\frac{1}{i^\beta}}{ti^{\frac{4}{d}}e^{ti\frac{4}{d}}}. \quad (2.2.17)$$

Μετά από κάποιους απλούς υπολογισμούς, για  $s > 0$  βρίσκουμε ότι

$$\left(i^{\frac{4}{d}}e^{-\frac{ti\frac{4}{d}}{s}}\right)^s < \frac{\left(\frac{1}{i^\beta}\right)^s}{\left(ti^{\frac{4}{d}}e^{ti\frac{4}{d}}\right)^s} = \frac{i^{-s\beta}e^{-tsi\frac{4}{d}}}{t^s i^{\frac{4s}{d}}} = i^{-s\beta-\frac{4s}{d}}t^{-s}e^{-tsi\frac{4}{d}} \leq i^{-s(\beta+\frac{4}{d})}t^{-s}e^{-ct}. \quad (2.2.18)$$

Αν και μόνο αν  $s(\beta + \frac{4}{d}) > 1$ , το οποίο συνεπάγεται ότι  $\beta > \frac{1}{s} - \frac{4}{d}$  τότε  $\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^{s(\beta+\frac{4}{d})}} \rightarrow C$ . Αυτό δίνει

$$\sum_{i=1}^{\infty} i^{\frac{4s}{d}}e^{-ti\frac{4}{d}} < \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^{s(\beta+\frac{4}{d})}}t^{-s}e^{-ct} \leq t^{-s}e^{-ct} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^{s(\beta+\frac{4}{d})}} \leq Ct^{-s}e^{-ct}. \quad (2.2.19)$$

Για να ολοκληρώσουμε την απόδειξη αντικαθιστούμε την (2.2.19) στην (2.2.12) και καταλήγουμε στην (2.2.5)

$$\|A^{\frac{2s}{d}}e^{-tA^{\frac{4}{d}}}v\| \leq (Ct^{-s}e^{-ct})^{\frac{1}{2}}\|v\| = C^{\frac{1}{2}}t^{-\frac{s}{2}}e^{-\frac{ct}{2}}\|v\| \leq Ct^{-\frac{s}{2}}e^{-ct}\|v\|.$$

□

Στο επόμενο θεώρημα αποδεικνύουμε τις εκτιμήσεις του σφάλματος για την αναλυτική ημιομάδα, [24]. Ορίζουμε  $F_h(t) = e^{-tA_h^2}P_h - e^{-tA^2}$  και σημειώνουμε ότι  $F_h(t)v = F_h(t)Pv$ , για  $v \in H$ , έτσι ώστε να είναι αρκετό να πάρουμε  $v \in \dot{H}$ . Ο λόγος για τον οποίο υποθέτουμε ότι  $\beta \geq 1$  είναι ότι στην (2.2.21) χρειαζόμαστε τουλάχιστον  $v \in \dot{H}^{-1}$  για να οριστεί ο όρος  $e^{-tA_h^2}P_h v$ . Στην παράγραφο 2.3 υπάρχει ο ακριβής ορισμός του διακριτού Laplacian τελεστή  $A_h$ , (2.3.1), καθώς και της ορθογώνιας προβολής  $P_h$ , (2.3.8).



**Θεώρημα 2.2.3.** Για την συνάρτηση  $F_h(t)$  έχουμε τα παρακάτω φράγματα

$$\|F_h(t)v\| \leq Ch^\beta |v|_\beta, \quad v \in \dot{H}^\beta, \quad (2.2.20)$$

$$\left( \int_0^t \|F_h(\tau)v\|^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \leq C |\log h| h^\beta |v|_{\beta-2}, \quad v \in \dot{H}^{\beta-2}, \quad (2.2.21)$$

όπου το  $C$  είναι μια σταθερά,  $h \leq h_0$ ,  $1 \leq \beta \leq r$  και  $t \geq 0$ .

Απόδειξη. Έστω  $u(t) = e^{-tA^2}v$  και  $u_h(t) = e^{-tA_h^2}P_h v$  είναι οι λύσεις της

$$\begin{aligned} u_t + A^2 u &= 0, \quad t > 0, \\ u(0) &= v \end{aligned} \quad (2.2.22)$$

και

$$\begin{aligned} u_{h,t} + A_h^2 u_h &= 0, \quad t > 0, \\ u_h(0) &= P_h v, \end{aligned} \quad (2.2.23)$$

αντίστοιχα. Εδώ το  $u_t$  δηλώνει την παράγωγο ως προς τον χρόνο. Θέτουμε  $e(t) = u_h(t) - u(t)$  και θέλουμε να αποδείξουμε ότι

$$\begin{aligned} \|e(t)\| &\leq Ch^\beta |v|_\beta, \quad v \in \dot{H}^\beta, \\ \left( \int_0^t \|e(\tau)\|^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} &\leq C |\log h| h^\beta |v|_{\beta-2}, \quad v \in \dot{H}^{\beta-2}. \end{aligned}$$

Έστω  $G = A^{-1}P$  και  $G_h = A_h^{-1}P_h P$ . Εφαρμόζουμε το  $G$  στην (2.2.22) για να πάρουμε την εξίσωση  $Gu_t + Au = 0$ , και το  $G_h^2$  στην (2.2.23) για να πάρουμε την εξίσωση  $G_h^2 u_{h,t} + u_h = 0$ . Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να λάβουμε την παρακάτω σχέση

$$\begin{aligned} G_h^2 e_t + e &= -G_h^2 u_t - u + G_h(Gu_t + Au) \\ &= (G_h A - I)u - G_h(G_h A - I)Gu_t, \end{aligned}$$

δηλαδή,

$$G_h^2 e_t + e = \rho + G_h \eta, \quad (2.2.24)$$

όπου  $\rho = (R_h - I)u$ ,  $\eta = -(R_h - I)Gu_t$ . Παίρνουμε το εσωτερικό γινόμενο της (2.2.24) με  $e_t$ , οπότε έχουμε

$$\langle G_h^2 e_t, e_t \rangle + \langle e, e_t \rangle = \langle \rho, e_t \rangle + \langle G_h \eta, e_t \rangle$$

η οποία είναι ίση με

$$\|G_h e_t\|^2 + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|e\|^2 = \langle \rho, e_t \rangle + \langle \eta, G_h e_t \rangle.$$

Επειδή  $\langle \eta, G_h e_t \rangle \leq \|\eta\| \|G_h e_t\| \leq \frac{1}{2} \|\eta\|^2 + \frac{1}{2} \|G_h e_t\|^2$ , λαμβάνουμε

$$\|G_h e_t\|^2 + \frac{d}{dt} \|e\|^2 \leq 2 \langle \rho, e_t \rangle + \|\eta\|^2.$$

Πολλαπλασιάζοντας την ανισότητα αυτή με  $t$  προκύπτει

$$t\|G_h e_t\|^2 + t\frac{d}{dt}\|e\|^2 \leq 2t\langle \rho, e_t \rangle + t\|\eta\|^2.$$

Σημειώνουμε ότι

$$\begin{aligned} t\frac{d}{dt}\|e\|^2 &= \frac{d}{dt}(t\|e\|^2) - \|e\|^2, \\ t\langle \rho, e_t \rangle &= \frac{d}{dt}(t\langle \rho, e \rangle) - \langle \rho, e \rangle - t\langle \rho_t, e \rangle, \end{aligned}$$

έτσι ώστε

$$t\|G_h e_t\|^2 + \frac{d}{dt}(t\|e\|^2) \leq 2\frac{d}{dt}(t\langle \rho, e \rangle) + 2|\langle \rho, e \rangle| + 2|t\langle \rho_t, e \rangle| + t\|\eta\|^2 + \|e\|^2.$$

Αλλά

$$\begin{aligned} |\langle \rho, e \rangle| &\leq \|\rho\|\|e\| \leq \frac{1}{2}\|\rho\|^2 + \frac{1}{2}\|e\|^2, \\ |t\langle \rho_t, e \rangle| &\leq t\|\rho_t\|\|e\| \leq \frac{1}{2}t^2\|\rho_t\|^2 + \frac{1}{2}\|e\|^2. \end{aligned}$$

Άρα,

$$t\|G_h e_t\|^2 + \frac{d}{dt}(t\|e\|^2) \leq 2\frac{d}{dt}(t\langle \rho, e \rangle) + \|\rho\|^2 + t^2\|\rho_t\|^2 + t\|\eta\|^2 + 3\|e\|^2.$$

Ολοκληρώνουμε στο  $[0, t]$  και χρησιμοποιούμε την ανισότητα Young

$$\begin{aligned} \int_0^t \tau\|G_h e_t\|^2 d\tau + t\|e\|^2 &\leq 2t\|\rho\|^2 + \frac{1}{2}t\|e\|^2 + \int_0^t \|\rho\|^2 d\tau + \int_0^t \tau^2\|\rho_t\|^2 d\tau \\ &\quad + \int_0^t \tau\|\eta\|^2 d\tau + 3 \int_0^t \|e\|^2 d\tau. \end{aligned}$$

Άρα,

$$t\|e\|^2 \leq Ct\|\rho\|^2 + C \int_0^t (\|\rho\|^2 + \tau^2\|\rho_t\|^2 + \tau\|\eta\|^2 + \|e\|^2) d\tau. \quad (2.2.25)$$

Πρέπει να φράξουμε το ολοκλήρωμα  $\int_0^t \|e\|^2 d\tau$ . Πολλαπλασιάζουμε την (2.2.24) με  $e$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\|G_h e\|^2 + \|e\|^2 &\leq \|\rho\|\|e\| + \|\eta\|\|G_h e\| \\ &\leq \frac{1}{2}\|\rho\|^2 + \frac{1}{2}\|e\|^2 + \|\eta\| \max_{0 \leq \tau \leq t} \|G_h e\|, \end{aligned}$$

έτσι ώστε

$$\frac{d}{dt}\|G_h e\|^2 + \|e\|^2 \leq \|\rho\|^2 + 2\|\eta\| \max_{0 \leq \tau \leq t} \|G_h e\|. \quad (2.2.26)$$

Ολοκληρώνουμε την (2.2.26), σημειώνουμε ότι  $G_h e(0) = A_h^{-1} P_h (P_h - I) v = 0$ ,

$$\|G_h e\|^2 + \int_0^t \|e\|^2 d\tau \leq \int_0^t \|\rho\|^2 d\tau + \max_{0 \leq \tau \leq t} \|G_h e\|^2 + \left( \int_0^t \|\eta\| d\tau \right)^2.$$

Και επειδή το  $t$  είναι τυχαίο,

$$\int_0^t \|e\|^2 d\tau \leq \int_0^t \|\rho\|^2 d\tau + \left( \int_0^t \|\eta\| d\tau \right)^2. \quad (2.2.27)$$

Εισάγουμε την (2.2.27) στην (2.2.25) και καταλήγουμε στην

$$\begin{aligned} t\|e\|^2 &\leq Ct\|\rho\|^2 + C \int_0^t (\|\rho\|^2 + \tau^2 \|\rho_t\|^2 + \tau \|\eta\|^2) d\tau \\ &\quad + C \left( \int_0^t \|\eta\| d\tau \right)^2. \end{aligned} \quad (2.2.28)$$

Υπολογίζουμε τους όρους στο δεξιό μέρος. Με  $v \in \dot{H}^\beta$ , υπενθυμίζοντας ότι  $\rho = (R_h - I)u$  και χρησιμοποιώντας την ανισότητα  $\|R_h v - v\| \leq Ch^\beta |v|_\beta$ ,  $v \in \dot{H}^\beta$ ,  $1 \leq \beta \leq r$ , έχουμε

$$\|\rho(t)\| \leq Ch^\beta |u(t)|_\beta \leq Ch^\beta \|e^{-tA^2} A^{\frac{\beta}{2}} v\| \leq Ch^\beta \|A^{\frac{\beta}{2}} v\| \leq Ch^\beta |v|_\beta, \quad (2.2.29)$$

ώστε

$$t\|\rho\|^2 \leq Ch^{2\beta} t |v|_\beta^2, \quad \int_0^t \|\rho\|^2 d\tau \leq Ch^{2\beta} t |v|_\beta^2.$$

Παρόμοια, από την (2.2.5) έχουμε,

$$\|\rho_t(t)\| \leq Ch^\beta |u_t(t)|_\beta \leq Ch^\beta \|A^2 e^{-tA^2} A^{\frac{\beta}{2}} v\| \leq Ch^\beta t^{-1} |v|_\beta, \quad (2.2.30)$$

ώστε

$$\int_0^t \tau^2 \|\rho_t\|^2 d\tau \leq Ch^{2\beta} t |v|_\beta^2. \quad (2.2.31)$$

Επιπλέον, επειδή για το  $\eta$  ισχύει  $\eta = -(R_h - I)Gu_t = (R_h - I)GA^2 e^{-tA^2} v$ ,

$$\|\eta(t)\| \leq Ch^\beta |Gu_t(t)|_\beta \leq Ch^\beta \|Ae^{-tA^2} A^{\frac{\beta}{2}} v\| \leq Ch^\beta t^{-\frac{1}{2}} |v|_\beta,$$

έτσι ώστε

$$\left( \int_0^t \|\eta\| d\tau \right)^2 \leq Ch^{2\beta} t |v|_\beta^2, \quad \int_0^t \tau \|\eta\|^2 d\tau \leq Ch^{2\beta} t |v|_\beta^2.$$

Εισάγοντας όλα τα παραπάνω στην (2.2.28) καταλήγουμε στην

$$t\|e\|^2 \leq Ch^{2\beta} t |v|_\beta^2,$$

η οποία αποδεικνύει την (2.2.20).

Για να αποδείξουμε την (2.2.21) θεωρούμε ότι  $v \in \dot{H}^{\beta-2}$  και ανακαλούμε την (2.2.27). Χρησιμοποιώντας την  $\|R_h v - v\| \leq Ch^\beta |v|_\beta$ ,  $v \in \dot{H}^\beta$ ,  $1 \leq \beta \leq r$  και την (2.2.4) λαμβάνουμε το εξής

$$\begin{aligned} \int_0^t \|\rho\|^2 d\tau &\leq Ch^{2\beta} \int_0^t |u|_\beta^2 d\tau = Ch^{2\beta} \int_0^t \|Ae^{-\tau A^2} A^{\frac{\beta-2}{2}} v\|^2 d\tau \\ &\leq Ch^{2\beta} |v|_{\beta-2}^2. \end{aligned} \quad (2.2.32)$$

Τώρα υπολογίζουμε το ολοκλήρωμα  $\int_0^t \|\eta\| d\tau$ . Για τον σκοπό αυτό υποθέτουμε πρώτα ότι  $1 < \beta \leq r$  και  $1 \leq \gamma < \beta$ . Χρησιμοποιώντας την (2.2.5) και την  $\|R_h v - v\| \leq Ch^\beta |v|_\beta$ ,  $v \in \dot{H}^\beta$ ,  $1 \leq \beta \leq r$  παίρνουμε το παρακάτω

$$\begin{aligned} \int_0^t \|\eta\| d\tau &\leq Ch^\gamma \int_0^t |Gu_t|_\gamma d\tau = Ch^\gamma \int_0^t \|A^{2-\frac{\beta-\gamma}{2}} e^{-\tau A^2} A^{\frac{\beta-2}{2}} v\| d\tau \\ &\leq Ch^\gamma \int_0^t \tau^{-1+\frac{\beta-\gamma}{4}} e^{-c\tau} d\tau |v|_{\beta-2}, \end{aligned} \quad (2.2.33)$$

όπου, επειδή ισχύει  $0 < \beta - \gamma \leq r - 1$ , έχουμε για το ολοκλήρωμα

$$\begin{aligned} \int_0^t \tau^{-1+\frac{\beta-\gamma}{4}} e^{-c\tau} d\tau &= \frac{4}{\beta-\gamma} \int_0^t e^{-cs\frac{4}{\beta-\gamma}} ds \\ &\leq \frac{C}{\beta-\gamma} \int_0^\infty e^{-cs\frac{4}{r-1}} ds. \end{aligned}$$

Συνεπώς, με  $C$  ανεξάρτητο του  $\beta$ ,

$$\int_0^t \|\eta\| d\tau \leq \frac{Ch^\gamma}{\beta-\gamma} |v|_{\beta-2}. \quad (2.2.34)$$

Έστω τώρα ότι  $\frac{1}{\beta-\gamma} = |\log h| = -\log h$ , έτσι το  $\gamma \rightarrow \beta$  καθώς  $h \rightarrow 0$ , και

$$\gamma \log h = (\gamma - \beta + \beta) \log h = 1 + \beta \log h.$$

Ως εκ τούτου έχουμε

$$\frac{h^\gamma}{\beta-\gamma} = |\log h| e^{\gamma \log h} = |\log h| e^{1+\beta \log h} \leq C |\log h| h^\beta.$$

Θέτουμε την σχέση αυτή στην (2.2.34) για να πάρουμε, για  $1 < \beta \leq r$ ,

$$\int_0^t \|\eta\| d\tau \leq Ch^\beta |\log h| |v|_{\beta-2}, \quad (2.2.35)$$

και επομένως ισχύει και για  $1 \leq \beta \leq r$ , επειδή το  $C$  είναι ανεξάρτητο του  $\beta$ . Τελικά, εισάγουμε την (2.2.32) και την (2.2.35) στην (2.2.27) και έχουμε

$$\left( \int_0^t \|e\|^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \leq C |\log h| h^\beta |v|_{\beta-2},$$

η οποία είναι η (2.2.21). □

## 2.3 Η Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων

Υποθέτουμε ότι  $S_h$  είναι ο χώρος των συνεχών συναρτήσεων στο  $\Omega$ , που είναι κατά τμήματα πολυώνυμα βαθμού  $\leq 1$  και  $S_h \subset H_0^1$ . Ορίζουμε το  $\dot{S}_h$  ως  $\dot{S}_h = PS_h$

$$\dot{S}_h = \left\{ v_h \in S_h : \int_{\Omega} v_h dx = 0 \right\}.$$

Ο διακριτός Laplacian τελεστής  $A_h$  ορίζεται ως  $A_h : S_h \rightarrow \dot{S}_h$ ,

$$\langle A_h v_h, w_h \rangle = \langle \nabla v_h, \nabla w_h \rangle, \quad \forall v_h \in S_h, w_h \in \dot{S}_h, \quad (2.3.1)$$

επιπλέον ορίζουμε το εξής

$$A_h^s v := \sum_{i=1}^{N_h} \lambda_{h,i}^s \langle v, u_{h,i} \rangle u_{h,i}, \quad v \in L^2, \quad s \geq 0. \quad (2.3.2)$$

**Πρόταση 2.3.1.** *Ισχύουν οι παρακάτω ισότητες*

$$|v_h|_1 = \|A_h^{\frac{1}{2}} v_h\|, \quad v_h \in S_h, \quad (2.3.3)$$

$$\|A_h^{\frac{1}{2}} v_h\| = \|\nabla v_h\|, \quad v_h \in S_h, \quad (2.3.4)$$

$$\|\nabla v_h\| = \|A_h^{\frac{1}{2}} v_h\|, \quad v_h \in S_h. \quad (2.3.5)$$

Άμεση συνέπεια των ισοτήτων αυτών είναι οι ισότητες  $|v_h|_1 = \|\nabla v_h\|$ ,  $\|A_h^{\frac{1}{2}} v_h\| = \|A_h^{\frac{1}{2}} v_h\|$  και  $|v_h|_1 = \|A_h^{\frac{1}{2}} v_h\|$ .

*Απόδειξη.* Αρχικά, για να αποδείξουμε την ισότητα (2.3.3) υπολογίζουμε τον όρο  $\|A_h^{\frac{1}{2}} v_h\|$ ,

$$\|A_h^{\frac{1}{2}} v_h\| = \left\langle A_h^{\frac{1}{2}} v_h, A_h^{\frac{1}{2}} v_h \right\rangle^{\frac{1}{2}} = \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{\frac{1}{2}} \langle v_h, u_i \rangle u_i, \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^{\frac{1}{2}} \langle v_h, u_i \rangle u_i \right\rangle^{\frac{1}{2}} = \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \langle v_h, u_i \rangle^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

το οποίο είναι ίσο με  $|v_h|_1 = \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \langle v_h, u_i \rangle^2 \right)^{\frac{1}{2}}$ . Στη συνέχεια, για τον όρο  $\|\nabla v_h\|$  έχουμε

$$\|\nabla v_h\| = \langle \nabla v_h, \nabla v_h \rangle^{\frac{1}{2}} = \langle A v_h, v_h \rangle^{\frac{1}{2}} = \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \langle v_h, u_i \rangle u_i, v_h \right\rangle^{\frac{1}{2}} = \left( \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \langle v_h, u_i \rangle^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Μπορούμε να γράψουμε  $\langle \nabla v_h, \nabla v_h \rangle = \langle A v_h, v_h \rangle$  διότι  $\frac{\partial v_h}{\partial \nu} = 0$  στο  $\partial\Omega$  και από την πρώτη ταυτότητα του Green παίρνουμε

$$\begin{aligned} \langle \nabla v_h, \nabla v_h \rangle &= \int_{\Omega} \nabla v_h \cdot \nabla v_h dx = \int_{\partial\Omega} v_h \frac{\partial v_h}{\partial \nu} ds - \int_{\Omega} v_h \Delta v_h dx \\ &= - \int_{\Omega} v_h \Delta v_h dx = \int_{\Omega} v_h A v_h dx = \langle v_h, A v_h \rangle = \langle A v_h, v_h \rangle. \end{aligned}$$

Σημειώνουμε ότι η πρώτη ταυτότητα του Green είναι

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla w dx = \int_{\partial\Omega} u \frac{\partial w}{\partial \nu} ds - \int_{\Omega} u \Delta w dx, \quad (2.3.6)$$

όπου  $\nu$  είναι το εξωτερικό κάθετο διάνυσμα και ορίζουμε  $\langle \nabla u, \nabla w \rangle := \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla w dx$ . Συνεπώς, έχουμε αποδείξει την (2.3.4). Τέλος, για την (2.3.5) χρησιμοποιούμε την (2.3.1) και έχουμε

$$\|A_h^{\frac{1}{2}} v_h\| = \left\langle A_h^{\frac{1}{2}} v_h, A_h^{\frac{1}{2}} v_h \right\rangle^{\frac{1}{2}} = \langle A_h v_h, v_h \rangle^{\frac{1}{2}} = \langle \nabla v_h, \nabla v_h \rangle^{\frac{1}{2}} = \|\nabla v_h\|.$$

□

**Πρόταση 2.3.2.** *Ο τελεστής  $A_h$  είναι αυτοσυζυγής, θετικά ορισμένος στον  $\dot{S}_h$  και θετικά ημιορισμένος στον  $S_h$ .*

*Απόδειξη.* Όπως και στην απόδειξη της Πρότασης (2.1.1) θα χρησιμοποιήσουμε τους ορισμούς για κάθε μια από τις παραπάνω υποθέσεις. Ο τελεστής  $A_h$  είναι αυτοσυζυγής διότι

$$\langle A_h v_h, w_h \rangle = \langle \nabla v_h, \nabla w_h \rangle = \langle \nabla w_h, \nabla v_h \rangle = \langle A_h w_h, v_h \rangle = \langle v_h, A_h w_h \rangle.$$

Για να δείξουμε ότι ο  $A_h$  είναι θετικά ορισμένος στον  $\dot{S}_h$  πρέπει να αποδείξουμε ότι

$$\langle A_h v_h, v_h \rangle > 0, \quad v_h \neq 0.$$

Χρησιμοποιούμε την  $\langle A_h v_h, v_h \rangle = \langle \nabla v_h, \nabla v_h \rangle = \|\nabla v_h\|^2 \geq 0$ . Αν  $\|\nabla v_h\|^2 = 0$ , τότε  $v_h =$  σταθερό και  $\int_{\Omega} v_h ds = 0$ . Άρα,  $v_h = 0$  το οποίο έρχεται σε αντίθεση με την αρχική υπόθεση. Ως εκ τούτου, ο  $A_h$  είναι θετικά ορισμένος τελεστής στον  $\dot{S}_h$ . Τέλος, είναι θετικά ημιορισμένος στον  $S_h$ ,

$$\langle A_h v_h, v_h \rangle = \langle \nabla v_h, \nabla v_h \rangle = \|\nabla v_h\|^2 \geq 0.$$

□

Το πρόβλημα ιδιοτιμών για τον  $A_h$  είναι

$$A_h u_h = \lambda_h u_h, \quad \text{στο } \Omega, \quad \frac{\partial u_h}{\partial \nu} = 0 \quad \text{στο } \partial\Omega.$$

Αντίστοιχα με το συνεχές πρόβλημα, το παραπάνω πρόβλημα ιδιοτιμών έχει μια ορθοκανονική βάση  $\{u_{h,i}\}_{i=0}^{N_h}$  με αύξουσα ακολουθία των αντίστοιχων ιδιοτιμών  $\{\lambda_{h,i}\}_{i=0}^{N_h}$ . Πιο συγκεκριμένα έχουμε

$$0 = \lambda_{h,0} < \lambda_{h,1} \leq \lambda_{h,2} \leq \dots \leq \lambda_{h,i} \leq \lambda_{h,N_h}$$

και η πρώτη ιδιοσυνάρτηση είναι  $u_{h,0} = u_0 = |\Omega|^{-\frac{1}{2}}$ . Επιπλέον, ορίζουμε  $e^{-tA_h^2} : S_h \rightarrow S_h$  ως

$$e^{-tA_h^2} v_h = \sum_{i=0}^{N_h} e^{-t\lambda_{h,i}} \langle v_h, u_{h,i} \rangle u_{h,i} = \sum_{i=1}^{N_h} e^{-t\lambda_{h,i}} \langle v_h, u_{h,i} \rangle u_{h,i} + \langle v_h, u_0 \rangle u_0. \quad (2.3.7)$$

Η ορθογώνια προβολή  $P_h : H \rightarrow S_h$  ορίζεται από τον τύπο

$$\langle P_h v, u_h \rangle = \langle v, u_h \rangle, \quad \forall v \in H, u_h \in S_h. \quad (2.3.8)$$

Παίρνουμε  $u_h = 1$ ,  $u_h \in S_h$  και χρησιμοποιούμε την (2.3.8)

$$\langle P_h v, u_h \rangle = \langle v, u_h \rangle \Rightarrow \int_{\Omega} (P_h v) u_h dx = \int_{\Omega} v u_h dx \Rightarrow \int_{\Omega} P_h v dx = \int_{\Omega} v dx.$$

Αλλά  $\int_{\Omega} v dx = 0$  στον  $\dot{S}_h$  το οποίο συνεπάγεται ότι  $\int_{\Omega} P_h v dx = 0$ . Έτσι, έχουμε  $P_h : \dot{H} \rightarrow \dot{S}_h$ . Επιπλέον, ισχύει

$$e^{-tA_h^2} P_h v = e^{-tA_h^2} P_h P v + (I - P) v. \quad (2.3.9)$$

Αντικαθιστούμε την σχέση  $v_h = P_h v$  στην (2.3.7) και λαμβάνουμε

$$e^{-tA_h^2} P_h v = \sum_{i=1}^{N_h} e^{-t\lambda_{h,i}} \langle P_h v, u_{h,i} \rangle u_{h,i} + \langle P_h v, u_0 \rangle u_0.$$

Για να δείξουμε τον πρώτο όρο χρησιμοποιούμε την (2.3.2)

$$e^{-tA_h^2} P_h P v = \sum_{i=1}^{N_h} e^{-t\lambda_{h,i}} \langle P_h v, u_{h,i} \rangle u_{h,i}$$

και για τον δεύτερο όρο χρησιμοποιούμε τον ορισμό της ορθογώνιας προβολής (2.3.8) και την (2.2.3) για να ολοκληρώσουμε την απόδειξη της (2.3.9). Το διακριτό ανάλογο της (2.2.5) δίνεται από

$$\|A_h^s e^{-tA_h^2} v_h\| \leq C t^{-\frac{s}{2}} e^{-ct} \|v_h\|, \quad v_h \in S_h, \quad s > 0.$$

Ορίζουμε την ελλειπτική προβολή ή προβολή Ritz  $R_h$  στον  $\dot{S}_h$  ως την ορθογώνια προβολή σε σχέση με το εσωτερικό γινόμενο  $\langle \nabla v, \nabla w_h \rangle$ , έτσι ώστε

$$\langle \nabla R_h v, \nabla u_h \rangle = \langle \nabla v, \nabla u_h \rangle, \quad \forall v \in \dot{H}^1, \quad u_h \in \dot{S}_h. \quad (2.3.10)$$

Επεκτείνουμε την προβολή Ritz σε  $R_h : H^1 \rightarrow S_h$  ως εξής

$$R_h v = R_h P v + (I - P)v, \quad v \in H^1. \quad (2.3.11)$$

Για να αποδείξουμε την (2.3.11) ορίζουμε  $Av := R_h P v + (I - P)v$  και θέλουμε να δείξουμε ότι  $\langle \nabla R_h v, \nabla u_h \rangle = \langle \nabla(Av), \nabla u_h \rangle$ . Υποθέτουμε ότι  $Av \in S_h$  γιατί  $(I - P)v = |\Omega|^{-1} \int_{\Omega} v dx$  είναι σταθερά, άρα είναι μια από τις κατά τμήματα συνεχείς συναρτήσεις στον  $S_h$ , δηλαδή  $(I - P)v \in S_h$ . Άρα, έχουμε

$$\begin{aligned} \langle \nabla(Av), \nabla u_h \rangle &= \langle \nabla(R_h P v + (I - P)v), \nabla u_h \rangle \\ &= \langle \nabla(R_h P v) + \nabla(I - P)v, \nabla u_h \rangle \\ &= \langle \nabla(R_h P v), \nabla u_h \rangle + \langle \nabla(I - P)v, \nabla u_h \rangle \\ &= \langle \nabla R_h v, \nabla u_h \rangle + \langle \nabla(I - P)v, \nabla u_h \rangle. \end{aligned}$$

Όμως, ο όρος  $\langle \nabla(I - P)v, \nabla u_h \rangle$  είναι ίσος με μηδέν γιατί  $\nabla(I - P)v = 0$ , το οποίο ολοκληρώνει την απόδειξη.

**Λήμμα 2.3.3.** Για  $R_h v - v = (R_h - I)P v$  με  $R_h$  όπως έχει οριστεί στην (2.3.10) έχουμε το ακόλουθο, βλ. [27]

$$\|R_h v - v\| \leq C h^s \|v\|_s, \quad \text{για } v \in H^s, \quad 1 \leq s \leq 2. \quad (2.3.12)$$

Επιπλέον, υποθέτουμε ότι  $P_h$  είναι φραγμένος σε σχέση με την  $H^1$ -νόρμα και την  $L^4$ -νόρμα, όπως στο [22],

$$\begin{aligned} \|P_h v\|_1 &\leq C \|v\|_1, \quad v \in H^1, \\ \|P_h v\|_{L^4} &\leq C \|v\|_{L^4}, \quad v \in L^4(\Omega). \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

Τέλος, ισχύει η παρακάτω αντίστροφη ανισότητα, βλ. [22, 27],

$$\|A_h v_h\| \leq C h^{-2} \|v_h\|, \quad v_h \in S_h. \quad (2.3.14)$$

## 2.4 Η Στοχαστική Συνέλιξη

Η διαδικασία

$$W_A(t) = \int_0^t e^{-(t-s)A^2} dW(s) \quad (2.4.1)$$



ονομάζεται στοχαστική συνέλιξη. Χρησιμοποιώντας την ημιομάδα (2.2.2) παίρνουμε

$$W_A(t) = \int_0^t e^{-(t-s)A^2} dW(s) = \int_0^t e^{-(t-s)A^2} P dW(s) + \int_0^t (I - P) dW(s).$$

Επειδή  $I - P = \sigma$ αθερό παίρνουμε  $\int_0^t (I - P) dW(s) = (I - P) \int_0^t dW(s) = (I - P)(W(t) - W(0)) = (I - P)W(t)$ . Κατά συνέπεια,

$$W_A(t) = \int_0^t e^{-(t-s)A^2} dW(s) = \int_0^t e^{-(t-s)A^2} P dW(s) + (I - P)W(t). \quad (2.4.2)$$

Παρόμοια, από την (2.3.9)

$$W_{A_h}(t) = \int_0^t e^{-(t-s)A_h^2} P_h dW(s) = \int_0^t e^{-(t-s)A_h^2} P_h P dW(s) + (I - P)W(t). \quad (2.4.3)$$

Αφαιρώντας την (2.4.2) από την εξίσωση (2.4.3) βρίσκουμε

$$W_{A_h}(t) - W_A(t) = \int_0^t (e^{-(t-s)A_h^2} P_h - e^{-(t-s)A^2}) P dW(s). \quad (2.4.4)$$

Επιπλέον, χρησιμοποιούμε τα παρακάτω θεωρήματα, που είναι άμεση συνέπεια του Θεωρήματος (2.2.3), βλ. [22].

**Θεώρημα 2.4.1.** Αν  $\|A^{\frac{\beta-2}{2}} Q^{\frac{1}{2}}\|_{HS} < \infty$  για κάποιο  $\beta \geq 2$ , τότε

$$\|W_A(t)\|_{L^2(\Omega, \dot{H}^\beta)} \leq C \|A^{\frac{\beta-2}{2}} Q^{\frac{1}{2}}\|_{HS}, \quad t \geq 0.$$

**Θεώρημα 2.4.2.** Αν  $\|Q^{\frac{1}{2}}\|_{HS} < \infty$ , τότε

$$\|W_{A_h}(t) - W_A(t)\|_{L^2(\Omega, H)} \leq Ch^2 |\log h| \|Q^{\frac{1}{2}}\|_{HS}, \quad t \geq 0.$$

## 2.5 Το Λήμμα Gronwall

Στην παράγραφο αυτή παραθέτουμε το γενικευμένο Λήμμα Gronwall με την απόδειξή του, περισσότερες λεπτομέρειες υπάρχουν στην αναφορά [11]. Επιπλέον, το βασικό Λήμμα Gronwall είναι το ίδιο χρήσιμο με το γενικευμένο. Για τον λόγο αυτό περιλαμβάνεται μαζί με την αντίστοιχη απόδειξη, βλ. [22].

**Λήμμα 2.5.1.** (Λήμμα Gronwall). Έστω η συνάρτηση  $\phi \in L^1([0, T], \mathbf{R})$ , για  $0 < t \leq T$ . Αν

$$\phi(t) \leq A + Ct + B \int_0^t \phi(s) ds, \quad t \in [0, T]$$

για κάποιες σταθερές  $A, C \geq 0$  και  $B > 0$ , τότε

$$\phi(t) \leq \left( A + \frac{C}{B} \right) e^{Bt}, \quad t \in [0, T].$$

Απόδειξη. Θεωρούμε μια καινούργια συνάρτηση  $f(t) = \int_0^t \phi(s)ds$ . Για τον σκοπό αυτό έχουμε να λύσουμε την παρακάτω συνήθη διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης

$$f'(t)e^{-Bt} \leq Ae^{-Bt} + Ce^{-Bt}t + Be^{-Bt}f(t)$$

η οποία προκύπτει από την παράγωγο της συνάρτησης  $f(t)$ . Αφού ολοκληρώσουμε κατά μέλη παίρνουμε

$$\int_0^t f'(s)e^{-Bs}ds \leq A \int_0^t e^{-Bs}ds + C \int_0^t se^{-Bs}ds + B \int_0^t e^{-Bs}f(s)ds. \quad (2.5.1)$$

Αρχικά, υπολογίζουμε τα ολοκληρώματα

$$\int_0^t f'(s)e^{-Bs}ds = e^{-Bt}f(t) + B \int_0^t e^{-Bs}f(s)ds$$

και

$$\int_0^t se^{-Bs}ds = \frac{1 - e^{-Bt}(Bt + 1)}{B^2}.$$

Στη συνέχεια, αντικαθιστούμε τα παραπάνω αποτελέσματα στην (2.5.1) και παίρνουμε

$$e^{-Bt}f(t) + B \int_0^t e^{-Bs}f(s)ds \leq A \left( -\frac{e^{-Bt}}{B} + \frac{1}{B} \right) + C \frac{1 - e^{-Bt}(Bt + 1)}{B^2} + B \int_0^t e^{-Bs}f(s)ds.$$

Από την τελευταία σχέση συνεπάγεται ότι

$$f(t) \leq -\frac{A}{B} + \frac{A}{B}e^{Bt} + \frac{C}{B^2}e^{Bt} - \frac{CBt}{B^2} - \frac{C}{B^2}.$$

Έτσι, έχουμε

$$\begin{aligned} \phi(t) &\leq A + Ct - A + Ae^{Bt} + \frac{C}{B}e^{Bt} - Ct - \frac{C}{B} \\ &\leq \left( A + \frac{C}{B} \right) e^{Bt} - \frac{C}{B} \\ &\leq \left( A + \frac{C}{B} \right) e^{Bt}. \end{aligned}$$

□

**Λήμμα 2.5.2.** (Το Γενικευμένο Λήμμα του Gronwall).<sup>[22]</sup> Έστω  $\phi \in L^1([0, T], \mathbf{R})$  μια μη αρνητική συνάρτηση, για  $0 < t \leq T$ . Αν

$$\phi(t) \leq At^{-1+a} + B \int_0^t (t-s)^{-1+\beta} \phi(s)ds, \quad t \in (0, T],$$

για κάποιες σταθερές  $A, B \geq 0$  και  $a, \beta > 0$ , τότε υπάρχει σταθερά  $C = C(B, T, a, \beta)$  τέτοια ώστε

$$\phi(t) \leq CA t^{-1+a}, \quad t \in (0, T].$$

Απόδειξη. Επαναλαμβάνοντας την ανισότητα που μας δίνεται  $N - 1$  φορές, χρησιμοποιώντας την ταυτότητα

$$\int_0^t (t-s)^{-1+a} s^{-1+\beta} ds = C(a, \beta) t^{-1+a+\beta}, \quad \text{για } a, \beta > 0, \quad (2.5.2)$$

και εκτιμώντας την ποσότητα  $t^\beta$  με την  $T^\beta$  παίρνουμε

$$\phi(t) \leq C_1 A t^{-1+a} + C_2 \int_0^t (t-s)^{-1+N\beta} \phi(s) ds, \quad 0 < t \leq T,$$

όπου  $C_1 = C_1(B, T, a, \beta, N)$ ,  $C_2 = C_2(B, \beta, N)$ . Τώρα επιλέγουμε το μικρότερο  $N$  έτσι ώστε  $-1 + N\beta \geq 0$ , και κάνουμε μια εκτίμηση της  $t^{-1+N\beta}$  με την  $T^{-1+N\beta}$ . Αν  $-1 + a \geq 0$  τότε παίρνουμε το επιθυμητό συμπέρασμα από το βασικό Λήμμα Gronwall. Διαφορετικά ορίζουμε  $\psi(t) = t^{-1+a} \phi(t)$  για να λάβουμε

$$\psi(t) \leq C_1 A + C_3 \int_0^t s^{-1+a} \psi(s) ds, \quad 0 < t \leq T,$$

και το βασικό Λήμμα του Gronwall δίνει  $\psi(t) \leq C A$  για  $0 < t \leq T$ , το οποίο είναι και το επιθυμητό αποτέλεσμα.  $\square$

## 2.6 Χρήσιμες Ανισότητες

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται συχνά η ανισότητα Young. Ο ορισμός της ανισότητας αυτής είναι ο εξής:

**Ορισμός 2.6.1.** (Ανισότητα Young). Αν  $a$  και  $b$  είναι μη αρνητικοί πραγματικοί αριθμοί και  $p$  και  $q$  είναι θετικοί πραγματικοί αριθμοί τέτοιοι ώστε  $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ , τότε

$$ab \leq \frac{a^p}{p} + \frac{b^q}{q}. \quad (2.6.1)$$

Η ισότητα ισχύει αν και μόνον αν  $a^p = b^q$ .

Παρακάτω παραθέτουμε μερικές ανισότητες που περιλαμβάνουν τη νόρμα  $\|\cdot\|_{L^p}$  στους χώρους  $L^p$ .

1. **Ανισότητα Minkowski:** Αν  $f$  και  $g$  ανήκουν στον  $L^p$  με  $1 \leq p < \infty$ , τότε και η  $f + g$  ανήκει στον  $L^p$  και

$$\|f + g\|_{L^p} \leq \|f\|_{L^p} + \|g\|_{L^p}. \quad (2.6.2)$$

Αν  $1 < p < \infty$ , τότε μπορεί να ισχύει η ισότητα μόνο αν υπάρχουν μη αρνητικές σταθερές  $a$  και  $\beta$  τέτοιες ώστε  $\beta f = ag$ .

2. **Ανισότητα Hölder:** Υποθέτουμε ότι  $p$  και  $q$  είναι μη αρνητικοί πραγματικοί αριθμοί τέτοιοι ώστε

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

[με άλλα λόγια,  $q = p/(p-1)$ ]. Αν  $f \in L^p$  και  $g \in L^q$ , τότε  $fg \in L^1$  και

$$\int |fg| \leq \|f\|_{L^p} \|g\|_{L^q}. \quad (2.6.3)$$

Η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν για κάποιες σταθερές  $a$  και  $\beta$ , όχι και οι δυο μηδέν, έχουμε  $a|f|^p = \beta|g|^q$  σχεδόν παντού (a.e.).

3. **Ανισότητα Chebyshev:** Αν  $f \in L^p$ , με  $0 < p < \infty$ , τότε για κάθε  $a > 0$  ισχύει ότι

$$\mu(\{x : |f(x)| > a\}) \leq \left( \frac{\|f\|_{L^p}}{a} \right)^p. \quad (2.6.4)$$

## 2.7 Φράγματα για τον Μη-Γραμμικό Όρο

Χρειαζόμαστε ένα φράγμα για τους μη-γραμμικούς όρους  $\|\Delta f'(u)\|$  και  $\|A_h^{-\frac{1}{2}} P(f'(u) - f'(v))\|$ , βλ. [22]. Θυμίζουμε ότι η νόρμα Sobolev  $\|\cdot\|_{H^s}$  είναι ισοδύναμη με τη νόρμα  $\|\cdot\|_s$  στην (2.1.5), για κάθε ακέραιο  $s \geq 0$ . Επίσης, για τις αντίστοιχες αποδείξεις χρησιμοποιούμε την ανισότητα Hölder και την ανισότητα Sobolev. Από την πρώτη απόδειξη καταλαβαίνουμε ακριβώς την διαφορά μεταξύ της νόρμας Sobolev  $\|\cdot\|_{H^s}$  και της  $\|\cdot\|_s$ . Και από τη δεύτερη απόδειξη γίνεται ξεκάθαρος ο ρόλος της προβολής  $P$ .

**Λήμμα 2.7.1.** Για την συνάρτηση  $f'(u) = -4u(1-u^2)$  και για  $u, v \in H^3$  έχουμε τις παρακάτω ανισότητες:

$$\|\Delta f'(u)\| \leq C(1 + \|u\|_1^2) \|u\|_3, \quad (2.7.1)$$

$$\|A_h^{-\frac{1}{2}} P(f'(u) - f'(v))\| \leq C(1 + \|u\|_1^2 + \|v\|_1^2) \|u - v\|. \quad (2.7.2)$$

*Απόδειξη.* Η δεύτερη παράγωγος της συνάρτησης  $f$  είναι  $f''(u) = 12u^2 - 4$  και η τρίτη παράγωγος είναι  $f'''(u) = 24u$ . Χρησιμοποιώντας την ανισότητα Hölder και την ανισότητα Sobolev  $\|u\|_{L^6} \leq C\|u\|_{H^1}$  για  $d \leq 3$ , παίρνουμε

$$\begin{aligned} \|\Delta f'(u)\| &= \|f''(u)\Delta u + f'''(u)|\nabla u|^2\| \\ &\leq \|f''(u)\|_{L^3} \|\Delta u\|_{L^6} + \|f'''(u)\|_{L^6} \|\nabla u\|_{L^6}^2 \\ &\leq C(1 + \|u\|_{L^6}^2) \|\Delta u\|_{L^6} + C\|u\|_{L^6} \|\nabla u\|_{L^6}^2 \\ &\leq C(1 + \|u\|_{H^1}^2) \|u\|_{H^3} + C\|u\|_{H^1} \|u\|_{H^2}^2. \end{aligned}$$

Στη συνέχεια χρησιμοποιούμε την ανισότητα  $\|u\|_{H^s} \leq C\|u\|_s$ , για  $s \geq 0$ , και στο τελευταίο βήμα κάνουμε χρήση της  $\|u\|_2 \leq C\|u\|_1^{\frac{1}{2}}\|u\|_3^{\frac{1}{2}}$ . Έτσι, έχουμε

$$\begin{aligned}\|\Delta f'(u)\| &\leq C(1 + \|u\|_1^2)\|u\|_3 + C\|u\|_1\|u\|_2^2 \\ &\leq C(1 + \|u\|_1^2)\|u\|_3 + C\|u\|_1\|u\|_1\|u\|_3 \\ &\leq C(1 + \|u\|_1^2)\|u\|_3 + C\|u\|_1^2\|u\|_3 \\ &\leq C(1 + \|u\|_1^2)\|u\|_3,\end{aligned}$$

με την οποία ολοκληρώνεται η απόδειξη της (2.7.1).

Για την (2.7.2) εφαρμόζουμε την ισότητα (2.3.3) και τις ανισότητες Hölder και Sobolev, για  $d \leq 3$ , για να πάρουμε

$$\begin{aligned}\|A_h^{-\frac{1}{2}}P\phi\| &= \sup_{v_h \in S_h} \frac{\langle A_h^{-\frac{1}{2}}P\phi, v_h \rangle}{\|v_h\|} = \sup_{v_h \in S_h} \frac{\langle \phi, A_h^{-\frac{1}{2}}Pv_h \rangle}{\|v_h\|} \\ &= \sup_{w_h \in \dot{S}_h} \frac{\langle \phi, w_h \rangle}{|w_h|_1} \leq \sup_{w_h \in \dot{S}_h} \frac{\|\phi\|_{L^{6/5}}\|w_h\|_{L^6}}{|w_h|_1} \\ &\leq C\|\phi\|_{L^{6/5}}.\end{aligned}$$

Τώρα χρησιμοποιούμε την ανισότητα που προέκυψε με  $\phi = f'(u) - f'(v) = \int_0^1 f''(u_s)ds(u-v)$ , όπου  $u_s = su + (1-s)v$ , και ξανά τις ανισότητες Hölder και Sobolev και έχουμε

$$\begin{aligned}\|A_h^{-\frac{1}{2}}P(f'(u) - f'(v))\| &= \|A_h^{-\frac{1}{2}}P\phi\| \leq C\|\phi\|_{L^{6/5}} \\ &\leq C \int_0^1 \|f''(u_s)\|_{L^3} ds \|u - v\| \\ &\leq C \int_0^1 (1 + \|u_s\|_{L^6}^2) ds \|u - v\| \\ &\leq C \int_0^1 (1 + \|u_s\|_1^2) ds \|u - v\| \\ &\leq C(1 + \|u\|_1^2 + \|v\|_1^2)\|u - v\|.\end{aligned}$$

Τελικά, αποδείξαμε την (2.7.2). □

## Κεφάλαιο 3

# Το Συνδυασμένο Μοντέλο

Η επίδραση των πολλαπλών μικροσκοπικών μηχανισμών όπως η επιφανειακή διάχυση και η προσρόφηση/εκρόφηση (adsorption/desorption) περιλαμβάνονται συνήθως στις διαδικασίες της επιφάνειας, στην μακροσκοπική μορφολογία ενός συμπλέγματος και στην εξέλιξη. Η απλοποιημένη εξίσωση μέσου τύπου είναι ένας συνδυασμός των εξισώσεων Cahn-Hilliard και Allen-Cahn. Αξίζει να σημειωθεί ότι στο μοντέλο που περιγράφεται από την (3.4.1), η κινητικότητα είναι αισθητά διαφορετική από την εξίσωση Allen-Cahn και αυτό συνεπάγεται ότι η διάχυση επιταχύνει την μέση καμπυλότητα.

Οι διαδικασίες της επιφάνειας, όπως η κατάλυση, περιλαμβάνουν την μεταφορά ουσιών στην φάση του αερίου: αντιδρώντα σώματα προσροφούνται στην επιφάνεια του υποστρώματος όπου πολυάριθμες διαδικασίες μπορούν να λάβουν μέρος ταυτόχρονα, όπως είναι για παράδειγμα η επιφανειακή διάχυση και οι αντιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων. Οι διαδικασίες της επιφάνειας έχουν παραδοσιακά διαμορφωθεί χρησιμοποιώντας τύπους αντίδρασης διάχυσης [12, 16], όπου το απορροφητικό στρώμα έχει υποτεθεί να είναι ομοιόμορφο στον χώρο. Η προσέγγιση αυτή παραβλέπει είτε λεπτομερείς αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων ή τα αντιμετωπίζει φαινομενολογικά, ενώ από την άλλη πλευρά, στατιστικές θεωρίες της μηχανικής παρέχουν μια ακριβή μικροσκοπική περιγραφή, [14].

Στη συνέχεια θα συζητήσουμε μικροσκοπικούς μηχανισμούς που συμβαίνουν στις διαδικασίες της επιφάνειας και μετά συνδέσεις με μεσοσκοπικούς μηχανισμούς, για παράδειγμα τα μοντέλα Cahn-Hilliard/Allen-Cahn.

### 3.1 Μικροσκοπική Μοντελοποίηση

Τα μαθηματικά εργαλεία που χρησιμοποιούνται στα μοντέλα στατιστικής μηχανικής είναι Συστήματα Αλληλεπιδρώντων Σωματιδίων, τα οποία είναι διαδικασίες Markov που βρίσκονται σε ένα πλέγμα που αντιστοιχεί σε μια στερεή επιφάνεια: χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι τα συστήματα Ising [13], που περιγράφουν την εξέλιξη μιας τάξης παραμέτρου σε κάθε θέση του πλέγματος. Αυτά τα μικροσκοπικά μοντέλα αποτελούν ένα σημαντικό υπολογιστικό εργαλείο σε πολυάριθμες εφαρμογές και επιλύονται αριθμητικά χρησιμοποιώντας αλγορίθμους Monte Carlo,

[23]. Τα μοντέλα Ising είναι ορισμένα στο  $d$ -διάστατο πλέγμα  $\mathbb{Z}^d$  όπως παρακάτω. Σε κάθε θέση του πλέγματος  $x \in \mathbb{Z}^d$  μια παράμετρος  $\sigma(x)$  – αναφέρεται ως ‘spin’ ή αλλιώς ‘περιστροφή’ – επιτρέπεται να λάβει τις τιμές 0 και 1 περιγράφοντας έτσι τις κενές και τις κατεχόμενες θέσεις αντίστοιχα. Μια περιστροφική διάταξη  $\sigma$  είναι ένα στοιχείο του χώρου διάταξης  $\Sigma = \{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$  και γράφουμε  $\sigma = \{\sigma(x) : x \in \mathbb{Z}^d\}$ . Η ενέργεια  $H$  του συστήματος, ως προς το  $\sigma$ , δίνεται από την Χαμιλτονιανή

$$H(\sigma) = -\frac{1}{2} \sum_{x \neq y} J(x-y) \sigma(x) \sigma(y) + h \sum_x \sigma(x),$$

όπου το  $h$  αποδίδεται σε ένα εξωτερικό χωρίο και το  $J$  είναι μια αλληλεπίδραση της ενέργειας μεταξύ των σωματιδίων: το  $J$  είναι άρτιος,  $J(r) = J(-r)$ , φθίνει γρήγορα προς το άπειρο και είναι μη αρνητικό, δηλαδή οι αλληλεπιδράσεις είναι ελκτικές: επίσης μπορούμε να θεωρήσουμε δυναμικά με ελκτικές και απωστικές συνιστώσες μαζί. Οι καταστάσεις ισορροπίας του μοντέλου Ising περιγράφονται από τις καταστάσεις του Gibbs, ορίζονται σε μια θερμοκρασία  $T$  και σε ένα πεπερασμένο χωρίο [13]. Οι δυνάμεις των μικροσκοπικών μοντέλων αποτελούνται από μια ακολουθία spin flips και spin exchanges και αντιστοιχούν σε διαφορετικές φυσικές διαδικασίες.

## 3.2 Στοχαστικές Μικροσκοπικές Δυνάμεις

Στη συνέχεια περιγράφουμε εν συντομία αυτούς τους λεπτομερείς μικρομηχανισμούς στο πλαίσιο των διαδικασιών επιφάνειας. Για περισσότερες λεπτομέρειες αναφερόμαστε στο άρθρο ανασκόπησης για τις επιφανειακές διαδικασίες, [21].

### 3.2.1 Προσρόφηση/ Εκρόφηση - Spin Flip Μηχανισμός

Μια spin flip στη θέση  $x$  είναι μια αυθόρμητη αλλαγή στην παράμετρο, το 0 μετατρέπεται σε 1 και το αντίστροφο. Στη Φυσική ο μηχανισμός αυτός περιγράφει την εκρόφηση του σωματιδίου από την επιφάνεια στην φάση του αερίου και αντιστρόφως την προσρόφηση του σωματιδίου από την φάση του αερίου στην επιφάνεια. Τυπικά, ο μηχανισμός της εκρόφησης εξαρτάται από τις αντιδράσεις με γειτονικά σωματίδια στο δυναμικό  $J$ , καθώς και από το εξωτερικό χωρίο  $h$ . Μια προφανή προϋπόθεση για τις δυνάμεις είναι ότι πρέπει να αφήσουν τις καταστάσεις Gibbs αμετάβλητες και η συνθήκη αυτή ονομάζεται νόμος ισορροπίας. Χαρακτηριστικές επιλογές τέτοιων δυνάμεων είναι οι δυνάμεις Glauber και Metropolis.

### 3.2.2 Επιφανειακή Διάχυση - Δυνάμεις Spin Exchange

Μια spin exchange μεταξύ των γειτονικών θέσεων  $x$  και  $y$  είναι η αυθόρμητη ανταλλαγή των τιμών της παραμέτρου στο  $x$  και στο  $y$ . Στη Φυσική ο μηχανισμός αυτός περιγράφει την διάχυση ενός σωματιδίου πάνω στην επιφάνεια, όπου οι θέσεις δεν μπορούν να καταλαμβάνουν περισσότερα από ένα σωματίδια. Οι απλούστερες τέτοιες δυνάμεις είναι οι δυνάμεις Kawasaki και Metropolis.

### 3.3 Μεσοσκοπικά Μοντέλα

Σε μεγάλες χωροχρονικές κλίμακες και για μεγάλο εύρος δυναμικών με εύρος αλληλεπίδρασης  $\gamma^{-1}$  αποδεικνύεται ότι η μικρής κλίμακας διακυμάνσεις των συστημάτων Ising καταστέλλονται και προκύπτει ένα σχεδόν ντετερμινιστικό μοντέλο που περιγράφεται από κατάλληλες ολοκληρωδιαφορικές εξισώσεις. Το πέρασμα στο όριο  $\gamma \rightarrow 0$ , (το εύρος αλληλεπίδρασης είναι  $\gamma^{-1}$ ), που σχετίζεται με το coarse graining των ποσοτήτων όπως η θερμοδυναμική πίεση, η κάλυψη, κλπ. είναι γνωστό ως όριο Lebowitz-Penrose [13]. Στο πλαίσιο αυτό μπορούμε να μελετήσουμε το ασυμπτωτικό όριο της coarse graining μεταβλητής που αντιστοιχεί σε μια τοπική κάλυψη στον χώρο,

$$u_\gamma(x, t) = |B_x|^{-1} \sum_{y \in B_x} \sigma_t(y),$$

όπου  $B_x$  είναι μια μπάλα με κέντρο το  $x$  που περιλαμβάνει πολλά σημεία τέτοια ώστε, (α) οι τυχαίες διακυμάνσεις (τυπικά) θα καταστέλλονται εξαιτίας του Νόμου των Μεγάλων Αριθμών, και (β) οι χωρικές διακυμάνσεις στην κάλυψη εξακολουθούν να κυριαρχούν. Στην περίπτωση των δυνάμεων προσρόφησης/εκρόφησης στο ασυμπτωτικό όριο  $\gamma \rightarrow 0$ , λαμβάνουμε μια κλειστή εξίσωση για την κάλυψη,  $u_\gamma(x, t) \approx u(\gamma x, t)$ , και το  $u$  λύνει την μεσοσκοπική εξίσωση, [10, 18],

$$u_t = \Psi(-\beta(J * u + h)) [1 - u - \exp(-\beta h) u \exp(-\beta J * u)], \quad (3.3.1)$$

όπου η  $\Psi = \Psi(r)$  συνδέεται με τις μικροσκοπικές δυνάμεις: χαρακτηριστικές επιλογές περιλαμβάνουν τις συναρτήσεις  $\Psi(r) = (1 + e^r)^{-1}$  (δυνάμεις Glauber),  $\Psi(r) = e^{-r/2}$  ή  $\Psi(r) = e^{-r^+}$  (δυνάμεις Metropolis).

Η εξίσωση (3.3.1) διαθέτει μια αρχή σύγκρισης, τουλάχιστον όταν  $J \geq 0$ , και έχει μια ή τρεις σταθερές καταστάσεις. Όταν οι ενδομοριακές δυνάμεις μεταξύ των ουσιών που απορροφώνται είναι είτε ασθενείς ή πολύ δυνατές έχουμε μια αραιή και μια πυκνή φάση αντίστοιχα, κάθε μια από τις οποίες αντιστοιχεί σε μια ατομική κατάσταση. Διαφορετικά μπορεί να υπάρχουν και οι δυο φάσεις, η (3.3.1) έχει τρεις διαφορετικές καταστάσεις, όταν

$$\beta > \beta_c = \frac{4}{J_0},$$

όπου  $J_0 = \int J(r) dr$ . Οι σταθερές καταστάσεις αντιστοιχούν σε πυκνές και αραιές φάσεις του συστήματος, δηλαδή έχουμε διευσταθή ισορροπία. Τα στατικά και τα τρέχοντα κύματα για την εξίσωση (3.3.1) είναι ζωτικής σημασίας για την ανάλυση μεγάλων χωροχρονικών συμπλεγματικών εξελίξεων, επειδή συνδέουν υψηλής και χαμηλής πυκνότητας φάσεις, κατά μήκος του συνόρου του συμπλέγματος. Η αυστηρή ύπαρξη, μοναδικότητα και σταθερότητα αυτών των λύσεων προκύπτει από την ανάλυση του [7], που καλύπτει μια ευρεία κατηγορία από ολοκληρω-διαφορικές εξισώσεις που έχουν την αρχή της σύγκρισης. Σημειώνουμε ακόμα ότι για τα δυναμικά που δεν είναι απαραίτητα ακτινικά λαμβάνουμε στατικά και τρέχοντα κύματα που εξαρτώνται από την κατεύθυνση [19].



Στην περίπτωση της επιφανειακής διάχυσης μπορεί να αποδειχτεί [25] ότι  $u_\gamma(x, t\gamma^{-2}) \approx u(\gamma x, t)$ , και το  $u$  λύνει (για  $h = 0$ ) την

$$u_t - \nabla \cdot \left\{ \mu[u] \nabla \left( \frac{\delta E[u]}{\delta u} \right) \right\} = 0, \quad (3.3.2)$$

όπου το  $\mu[u]$  είναι η κινητικότητα και το  $E[u]$  είναι η ελεύθερη ενέργεια,

$$E[u] = -\frac{1}{2} \int \int J(r - r') u(r) u(r') dr dr' + \int \frac{1}{\beta} [u \ln u + (1 - u) \ln(1 - u)] dr.$$

Στην περίπτωση των δυνάμεων Metropolis/Kawasaki η (3.3.2) προέρχεται από το [25] όπου η κινητικότητα είναι  $\mu[u] = \Psi(0)\beta u(1 - u)$ . Τυπικές επιλογές για το  $\Psi$  που να συνδέονται με τις δυνάμεις μικροσκοπικής διάχυσης είναι  $\Psi(r) = 2(1 + e^r)^{-1}$  (δυνάμεις Kawasaki) και  $\Psi(r) = e^{-r^+}$  (δυνάμεις Metropolis).

Σημειώνουμε ότι και στους δυο τύπους εξισώσεων η κάλυψη  $u$  ικανοποιεί την  $0 \leq u \leq 1$  λόγω της παρουσίας του όρου  $u(1 - u)$  στις κινητικότητες, που εφαρμόζει την αρχή της απόκλισης (δηλαδή το πολύ ένα σωματίδιο ανά περιοχή του πλέγματος) στο μεσοσκοπικό επίπεδο. Η εξίσωση (3.3.2) περιλαμβάνει δυο ανταγωνιστικούς μηχανισμούς: έναν όρο διάχυσης που συνδέεται με την εντροπία στον όρο  $E[u]$ , ο οποίος ανταγωνίζεται με το ελκτικό δυναμικό  $J \geq 0$ . Αναμένουμε ότι όταν η αντίστροφη θερμοκρασία  $\beta$  είναι αρκετά μεγάλη ( $\beta \geq \beta_c$ ), τα σωματίδια τείνουν να οργανωθούν σε συμπλέγματα, ξεπερνώντας τα αποτελέσματα διάχυσης. Όλα τα παραπάνω μπορούν να γίνουν ξεκάθαρα χρησιμοποιώντας ένα επιχειρήμα γραμμικοποίησης γύρω από μια σταθερή κάλυψη  $u_0$ , δίνοντας ένα καθεστώς περιστροφικής διάσπασης (spinodal decomposition), [21].

### 3.3.1 Μεσοσκοπικά Μοντέλα για Πολλαπλούς Μηχανισμούς

Συνήθως οι επιφανειακές διαδικασίες συμβαίνουν ταυτόχρονα και αλληλεπιδρούν. Για παράδειγμα μπορούμε να θεωρήσουμε [15, 20] έναν συνδυασμό με Arrhenius δυνάμεις προσρόφησης/εκρόφησης, επιφανειακή διάχυση Metropolis και μια απλή μονομοριακή αντίδραση: η αντίστοιχη μεσοσκοπική εξίσωση είναι η εξής:

$$u_t - D \nabla \cdot \left[ \nabla u - \beta u(1 - u) \nabla J_m * u \right] - \left[ k_a p(1 - u) - k_d u \exp(-\beta J_d * u) \right] + k_r u = 0. \quad (3.3.3)$$

Εδώ το  $D$  είναι η σταθερά διάχυσης,  $k_r$ ,  $k_d$  και  $k_a$  δηλώνουν αντίστοιχα τις σταθερές αντίδρασης, εκρόφησης και προσρόφησης και  $p$  είναι η μερική πίεση των αέριων ειδών. Η μερική πίεση  $p$  σχετίζεται με το εξωτερικό χωρίο  $h$  στην εξίσωση (3.3.1) και εδώ υποθέτουμε ότι είναι σταθερή, αν και στην πραγματικότητα δίνεται από τις εξισώσεις των ρευστών στην αέρια φάση. Οι σταθερές καταστάσεις των εξισώσεων (3.3.3) και (3.3.1) είναι ταυτόσημες και όταν  $J_d = J_m$  και  $k_r = 0$ , μοιράζονται επίσης το ίδιο στατικό κύμα. Ωστόσο δεν υπάρχουν γενικά αυστηρά αποτελέσματα διαθέσιμα στη ύπαρξη του τρέχων κύματος για την (3.3.3): κάποιες αριθμητικές

προσομοιώσεις πραγματοποιούνται στο [15] υποδεικνύοντας την ύπαρξη μη-μονότονων τρεχόντων κυμάτων. Τέλος, είναι εύκολο να δούμε ότι, όταν  $k_r = 0$ , η ελεύθερη ενέργεια  $E[u]$  είναι ένα συναρτησιακό Lyapunov για την (3.3.3).

### 3.3.2 Συσχέτιση με τα Μοντέλα Cahn-Hilliard και Allen-Cahn

Παρακάτω θα συζητήσουμε εν συντομία τις συνδέσεις των μεσοσκοπικών εξισώσεων με πολύ γνωστά μοντέλα για τον διαχωρισμό των φάσεων όπως τα πρότυπα Allen-Cahn και Cahn-Hilliard. Αν προσαρμόσουμε τον χώρο ως  $x \mapsto x/\epsilon$  το δυναμικό  $J$  δημιουργεί την προσέγγιση της κατανομής Dirac  $J^\epsilon(x) = \epsilon^{-d} J(\frac{x}{\epsilon})$ . Ύστερα από μια απλή αλλαγή μεταβλητών και μια τυπική επέκταση στις σειρές Taylor,

$$J^\epsilon * u(x) = \int J(z)u(x + \epsilon z)dz = \int J(z) \left[ u(x) + \epsilon \nabla u(x) \cdot z + \frac{\epsilon^2}{2} z^T \nabla^2 u(x) z + O(\epsilon^3) \right] dz.$$

Αγνοώντας τους όρους τάξης  $O(\epsilon^3)$  και υποθέτοντας ότι το  $J$  είναι ακτινικά συμμετρικό, δηλαδή  $J(r) = J(|r|)$ , έχουμε ότι

$$J^\epsilon * u(x) \approx J_0 u(x) + \frac{\epsilon^2}{2} J_2 \Delta u(x),$$

όπου  $J_0 = \int J(r)dr$  και  $J_2 = \int |r|^2 J(r)dr$ . Τότε, για παράδειγμα η (3.3.1), προσεγγίζεται από μια μορφή της εξίσωσης Allen-Cahn με μη-γραμμική διάχυση,

$$u_t = Du \exp(-\beta J_0 u) \Delta u + c_0 [1 - u - \exp(-\beta h) u \exp(-\beta J_0 u)],$$

όπου  $D = c_0 \frac{\epsilon^2}{2} \beta J_0 \exp(-\beta h)$ . Σημειώνουμε ότι η συνάρτηση

$$\lambda^{-1} f(u) = 1 - u - \exp(-\beta h) u \exp(-\beta J_0 u)$$

είναι διευσταθής ή ισοδύναμα είναι η παράγωγος του διπλού δυναμικού (double well potential) όταν  $\beta > \beta_c = 4/J_0$ . Υπενθυμίζουμε ότι η εξίσωση Allen-Cahn έχει την αδιάστατη μορφή

$$u_t = \Delta u + W'(u),$$

όπου το  $W$  είναι το διπλό δυναμικό  $W(u) = (u^2 - 1)^2$ .

Στην περίπτωση της επιφανειακής διάχυσης μπορούμε να ξαναγράψουμε την ελεύθερη ενέργεια ως

$$E[u] = \frac{1}{4} \int \int J(r - r') [u(r) - u(r')]^2 dr dr' + \int W_\beta(u) dr,$$

$W_\beta(u) = \frac{1}{2} J_0 u(1 - u) + \frac{1}{\beta} [u \ln u + (1 - u) \ln(1 - u)]$ .  $W_\beta$  είναι ένα διπλό δυναμικό υπό την προϋπόθεση ότι  $\beta > \beta_c = 4/J_0$ . Συνεχίζοντας, αλλάζουμε την κλίμακα και επεκτείνουμε την συνέλιξη όπως προηγουμένως, οπότε έχουμε

$$E[u] \approx \tilde{E}[u] := \int \frac{\epsilon^2 J_2}{8} |\nabla u|^2 + W_\beta(u) dr, \quad (3.3.4)$$

αφού έχουμε ήδη παραλείψει τους όρους μεγαλύτερης τάξης. Αυτό είναι το κανονικό συναρτησιακό Ginsburg-Landau, στην περίπτωση αυτή η (3.3.2) είναι η εξίσωση Cahn-Hilliard

$$u_t - \nabla \cdot \left\{ \mu[u] \nabla \left( \frac{\delta \tilde{E}[u]}{\delta u} \right) \right\} = 0, \quad (3.3.5)$$

με μη τετριμμένη κινητικότητα  $\mu(u) = Du(1 - u)$ : θυμίζουμε ότι στην κανονική εξίσωση Cahn-Hilliard έχουμε  $\mu(u) = 1$ . Παρατηρούμε ότι οι περικοπές στις βαθμωτές εκφράσεις που χρησιμοποιούνται εδώ αγνοούν τις επιδράσεις από όρους υψηλότερης τάξης καθώς και πιθανές ανισotropίες στο δυναμικό  $J$ . Όμως, κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία οι εξισώσεις Allen-Cahn και Cahn-Hilliard γίνονται ακριβή ανακλιμακωμένα όρια των μεσοσκοπικών μοντέλων και των συστημάτων υποκείμενων σωματιδίων.

### 3.3.3 Ένα Απλοποιημένο Μοντέλο με Πολλαπλούς Μικροσκοπικούς Μηχανισμούς

Για να δείξουμε τα αποτελέσματα των πολλαπλών μηχανισμών θεωρούμε μια απλοποίηση της εξίσωσης (3.3.3) η οποία διατηρεί την θεμελιώδη δομή και μπορεί να ληφθεί ακριβώς από την (3.3.2) κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία, όταν  $k_r = 0$  και  $J_m = J_d = J$ :

$$u_t = D\Delta(-\Delta u + W'(u)) + \Delta u - W'(u), \quad (3.3.6)$$

$W$  είναι ένα διπλό δυναμικό με wells  $\pm 1$ , ο όρος της Cahn-Hilliard αντιστοιχεί στην επιφανειακή διάχυση, ενώ αυτός της Allen-Cahn στην προσρόφηση/εκρόφηση. Αναφέρουμε την (3.3.6) ως την βαθμωτή εξίσωση Cahn-Hilliard/Allen-Cahn.

## 3.4 Μαθηματική Δομή της Βαθμωτής Εξίσωσης CH/AC

Στη συνέχεια μελετάμε με αυστηρό τρόπο την συμπεριφορά της βαθμωτής εξίσωσης CH/AC (3.3.6), καθώς ο χρόνος αναπροσαρμόζεται με  $\epsilon^2$  και ο χώρος με  $\epsilon$ , το οποίο περιγράφει την μακρόχρονη συμπεριφορά των μεγάλων συμπλεγμάτων. Σύμφωνα με αυτή την αναπροσαρμογή της διάχυσης η εξίσωση παίρνει την εξής μορφή:

$$\begin{cases} \partial_t u &= \epsilon^2 D \left( -\Delta \left( \Delta u + \frac{f(u)}{\epsilon^2} \right) \right) + \Delta u + \frac{f(u)}{\epsilon^2} \\ u &= 1, \quad \text{στο } \partial\Omega \\ u(x, 0) &= u_0(x), \end{cases} \quad (3.4.1)$$

όπου  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ,  $n > 1$ , είναι ένα λείο φραγμένο χωρίο.

Αρχικά παρουσιάζουμε κάποιες παρατηρήσεις που αφορούν την μαθηματική δομή της (3.3.6) και της (3.4.1). Η ελεύθερη ενέργεια

$$F_\epsilon(u) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} \epsilon |\nabla u|^2 + \int_{\Omega} \frac{1}{\epsilon} W(u) \quad (3.4.2)$$

ισούται με  $\epsilon^{-1} \tilde{E}[u]$ , όπου το  $\tilde{E}[u]$  είναι όπως την (3.3.4). Η εξίσωση (3.4.1) είναι μια ροή κλίσης για την ενέργεια (3.4.2) ως προς την μετρική

$$\langle f, g \rangle_{A^\epsilon} := \langle f, (A^\epsilon)^{-1} g \rangle, \quad (3.4.3)$$

όπου  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  δηλώνει το  $L^2$ -βαθμωτό γινόμενο και

$$A := -D\Delta + I, \quad (Af)(x/\epsilon) = A^\epsilon(f(x/\epsilon))$$

είναι αυτοσυζυγής τελεστές ως προς το  $L^2$ -βαθμωτό γινόμενο. Ειδικότερα,

$$A^\epsilon = -\epsilon^2 D\Delta + I,$$

δηλαδή είναι μια μικρή διαταραχή του ταυτοτικού τελεστή, υπό την προϋπόθεση ότι οι δεύτερες παράγωγοι είναι φραγμένες.

Έστω

$$\mathcal{A}^\epsilon(u) := \Delta u + \epsilon^{-2} f(u), \quad f(u) = -W'(u). \quad (3.4.4)$$

Η εξίσωση Allen-Cahn, βλ. [2], γίνεται υπό εναλλαγή της κλίμακας διάχυσης του χώρου και του χρόνου

$$\partial_t u = \mathcal{A}^\epsilon(u). \quad (3.4.5)$$

Η εξίσωση που εξετάζουμε σε αυτή την εργασία, (3.4.1), έχει τη δομή

$$\partial_t u = A^\epsilon(\mathcal{A}^\epsilon(u)).$$

Έτσι η εξίσωση (3.4.1) είναι τυπικά μια μικρή (απλή ακόμα) διαταραχή της (3.4.5) και θα περίμενε κανείς ότι το όριο της εξέλιξης θα περιγραφόταν από το ίδιο όριο όπως η εξίσωση Allen-Cahn, δηλαδή από την κίνηση από την μέση καμπυλότητα:  $u \rightarrow \pm 1$  σχεδόν παντού, και η διεπαφή η οποία οριοθετεί την περιοχή όπου το  $u$  είναι αρνητικό κινείται σύμφωνα με την

$$V = \kappa,$$

όπου  $V$  είναι η ταχύτητα της διεπαφής στην κανονική κατεύθυνση, και  $\kappa$  η μέση καμπυλότητα της διεπαφής.

Ωστόσο, η μικρή διαταραχή από τον όρο υψηλότερης τάξης γίνεται σχετικά κοντά με την διεπαφή, όπου οι παράγωγοι της  $u$  γίνονται μεγάλες. Ως εκ τούτου, βρίσκουμε ποιοτικά την ίδια συμπεριφορά, δηλαδή κίνηση από την μέση καμπυλότητα, αλλά με διαφορετικούς συντελεστές.

Στην πραγματικότητα λαμβάνουμε

$$V = \mu\sigma\kappa, \quad (3.4.6)$$

όπου εδώ το  $\mu$  είναι μια αποτελεσματική κινητικότητα και το  $\sigma$  είναι η επιφανειακή τάση. Για να ορίσουμε το  $\mu$  και το  $\sigma$ , χρειαζόμαστε το στάσιμο κύμα για την μονοδιάστατη εξίσωση Allen-Cahn, δηλαδή μια λύση  $q : \mathbb{R} \rightarrow (-1, 1)$  των παρακάτω σχέσεων

$$\partial_{zz}^2 u = -f(u), \quad \lim_{z \rightarrow \pm\infty} u(z) = \pm 1.$$

Τότε το  $\mu$  δίνεται από

$$\mu = 2 \left( \int_{\mathbb{R}} \chi \partial_z q \right)^{-1}, \quad (3.4.7)$$

όπου το  $\chi$  ορίζεται ως

$$A\chi = \partial_z q. \quad (3.4.8)$$

Η κινητικότητα είναι εντελώς διαφορετική από αυτή της εξίσωσης Allen-Cahn, όπου η αντίστοιχη έκφραση είναι ίση με [26],

$$2 \left( \int_{\mathbb{R}} \partial_z^2 q \right)^{-1}.$$

Αργότερα θα δείξουμε ότι η κινητικότητα  $\mu$  είναι μεγαλύτερη από αυτήν της εξίσωσης Allen-Cahn, δηλαδή ο υποκείμενος μηχανισμός διάχυσης επιταχύνει την εξέλιξη του συμπλέγματος. Η επιφανειακή τάση  $\sigma$  ορίζεται ως, [26]

$$\sigma = \int_{-1}^1 \sqrt{(1/2)W(s)} ds = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} |\partial_z q|^2$$

που είναι η ίδια με αυτήν της εξίσωσης Allen-Cahn.

Χρησιμοποιώντας ένα γραμμικό επιχείρημα η κινητικότητα ορίζεται με τον παρακάτω τρόπο: Ψάχνουμε για μονοδιάστατες λύσεις της εξίσωσης

$$\partial_t u = \epsilon^2 \left( -D\Delta \left( \Delta u - \frac{f(u)}{\epsilon^2} \right) \right) + \Delta u - \frac{f(u)}{\epsilon^2} + \epsilon^{-1}h, \quad (3.4.9)$$

δηλαδή μια μικρή διαταραχή προστίθεται στην  $f$ . Η λύση θα είναι της μορφής  $u(t, x) = q(c(h)t - x) + \mathcal{O}(\epsilon)$ , και η συνάρτηση  $c(h)$  είναι (τουλάχιστον στην υψηλότερη τάξη) της μορφής

$$c(h) = \mu h,$$

η οποία ορίζει την κινητικότητα.

Για να βρούμε μια ποσοτική έκφραση της κινητικότητας σε μονοδιάστατους όρους  $q$ , θα χρειαστούμε την γραμμικοποίηση της (3.4.1) γύρω από μια συνάρτηση  $u$  :

$$\mathcal{L}_u v := A(\Delta v + f'(u)v), \quad \mathcal{L}^\epsilon v := A^\epsilon(\Delta v + \epsilon^{-2}f'(u)v), \quad (3.4.10)$$

όπου το  $A = -D\Delta + I$  είναι όπως προηγουμένως.

Για περαιτέρω χρήση ορίζουμε για  $Q(z) \in L^2(\mathbb{R})$  τον μονοδιάστατο γραμμικό τελεστή

$$\mathcal{L}_1 Q := -D\partial_z^2(\partial_z^2 Q + f'(q(z))Q) + \partial_z^2 Q + f'(q(z))Q. \quad (3.4.11)$$

Σημειώνουμε ότι  $\mathcal{L}_1 = A\mathcal{M}q$ , όπου

$$\mathcal{M} := \partial_z^2 + f'(q(z))$$

είναι ο γραμμικός τελεστής Allen-Cahn.

Τώρα η (3.4.7) μπορεί να γίνει κατανοητή από τις ακόλουθες ασυμπτωτικές:

$$c\partial_z q - h = \mathcal{L}_1^\epsilon Q,$$

και ο όρος επιλυσιμότητας Fredholm δίνει

$$c \int_{\mathbb{R}} \chi \partial_z q = \int_{\mathbb{R}} \chi,$$

και καθώς

$$\int_{\mathbb{R}} \chi = \int_{\mathbb{R}} \partial_z q + \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \Delta \chi}_{=0} = 1 - (-1) = 2,$$

λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} c &= 2 \left( \int_{\mathbb{R}} \chi \partial_z q \right)^{-1} h \\ \mu\sigma &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \partial_z^2 q d\xi}{\int_{-\infty}^{\infty} \partial_z q \chi d\xi}. \end{aligned} \quad (3.4.12)$$

Ας σημειώσουμε ότι δοκιμάζοντας την

$$-D\partial_{zz}^2 \chi + \chi = \partial_z q$$

με την λύση  $\chi$  λαμβάνουμε

$$\int \chi^2 \leq \int |\partial_z \chi|^2 + \int \chi^2 \leq \|\chi\|_2 \|\partial_z q\|_2,$$

και επομένως

$$\|\chi\|_2 \leq \|\partial_z q\|_2.$$

Αυτό συνεπάγεται ότι

$$\int \chi \partial_z q = \int |\partial_z \chi|^2 + \int \chi^2 \leq \|\chi\|_2 \|\partial_z q\|_2 \leq \|\partial_z q\|_2^2,$$

συνεπώς

$$\mu\sigma = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \partial_z^2 q \, d\xi}{\int_{-\infty}^{\infty} \partial_z q \, \chi \, d\xi} \geq 1,$$

ώστε η διάχυση επιταχύνει την μέση καμπυλότητα. Σημειώνουμε ότι για  $D = 0$ , η εξίσωση (3.4.8) συνεπάγεται ότι  $\partial_z q = \chi$ , δηλαδή  $\mu\sigma = 1$  που αντιστοιχεί στην εξίσωση Allen-Cahn.

Ενώ το όριο εξέλιξης είναι - μαζί με τους συντελεστές - το ίδιο όπως στην εξίσωση Allen-Cahn, η μαθηματική αντιμετώπιση είναι αναγκαστικά αρκετά διαφορετική, επειδή η εξίσωση Allen-Cahn έχει την αρχή της συγκρίσεως, ενώ η (3.4.1) στερείται αυτή την σημαντική ιδιότητα. Από την άλλη πλευρά, το όριο εξέλιξης έχει την αρχή της συγκρίσεως. Ως εκ τούτου η εξίσωσή μας, (3.4.1), είναι μια μη-μονότονη προσέγγιση ενός μονότονου νόμου εξέλιξης. Επομένως, τα ισχυρά εργαλεία για να περάσουμε στο όριο καθώς το  $\epsilon \rightarrow 0$  πέρα από τις μοναδικότητες του ορίου εξέλιξης, οι οποίες βασίζονται στην αρχή της συγκρίσεως (όπως γίνεται για παράδειγμα στο [6]) δεν είναι διαθέσιμα στην δική μας περίπτωση. Αντίθετα, δείχνουμε την σύγκλιση μέχρι να εμφανιστεί η πρώτη μοναδικότητα του ορίου εξέλιξης δημιουργώντας μια τυπική αυστηρή ασυμπτωτική έκφραση με τη βοήθεια της γραμμικής σταθερότητας, όπως στο [1].

## Κεφάλαιο 4

# Η Εξίσωση Cahn-Hilliard/Allen-Cahn

### 4.1 Το Συνεχές Πρόβλημα

Μελετάμε την παρακάτω εξίσωση Cahn-Hilliard/Allen-Cahn που διαταράσσεται από θόρυβο:

$$\begin{aligned} u_t &= -\rho\Delta(\Delta u - f'(u)) + (\Delta u - f'(u)) + \sigma(u)\dot{W} \quad \text{στο } \Omega \times [0, T), \\ u(x, 0) &= u_0(x) \quad \text{στο } \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} &= \frac{\partial \Delta u}{\partial \nu} = 0 \quad \text{στο } \partial\Omega \times [0, T), \end{aligned} \tag{4.1.1}$$

όπου  $\rho$  είναι η σταθερά διάχυσης και για απλότητα υποθέτουμε ότι το  $\rho$  είναι ίσο με 1. Η συνάρτηση  $f(u) = (1 - u^2)^2$  είναι το διπλό δυναμικό (double-well potential) και η παράγωγος της  $f$  είναι  $f'(u) = -4u(1 - u^2)$ ,  $\sigma(\cdot)$  είναι μια φραγμένη συνάρτηση Lipschitz,  $W$  είναι η διαδικασία Wiener και  $\nu$  είναι το εξωτερικό κάθετο διάνυσμα. Εδώ, το  $\Omega$  είναι ένα φραγμένο χωρίο στον  $\mathbb{R}^d$  με  $d = 1, 2, 3$ .

**Παρατήρηση 4.1.1.** Για λόγους απλότητας, θα θεωρήσουμε ότι και η συνάρτηση  $\sigma(\cdot)$  είναι ίση με 1.

**Πρόταση 4.1.2.** Η ασθενής μορφή της εξίσωσης (4.1.1) είναι η παρακάτω,

$$\begin{aligned} \langle u(t), \phi \rangle - \langle u_0, \phi \rangle &+ \int_0^t \langle \nabla(-\Delta u + f'(u))(\tau), \nabla \phi \rangle d\tau \\ &+ \int_0^t \langle (-\Delta u + f'(u))(\tau), \phi \rangle d\tau = \langle W(t), \phi \rangle. \end{aligned} \tag{4.1.2}$$



Απόδειξη. Πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση (4.1.1) με  $\phi \in \dot{H}^1$  και ολοκληρώνοντας στον χρόνο και στον χώρο έχουμε

$$\begin{aligned} \int_0^t \int_{\Omega} u_t(\tau) \phi d\tau d\tau &= \int_0^t \int_{\Omega} -\Delta(\Delta u - f'(u)) \phi d\tau d\tau \\ &+ \int_0^t \int_{\Omega} (\Delta u - f'(u)) \phi d\tau d\tau + \int_0^t \int_{\Omega} \dot{W}(\tau) \phi d\tau d\tau. \end{aligned}$$

Στη συνέχεια χρησιμοποιούμε τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου στον  $L^2(\Omega)$  καθώς και τις συνοριακές συνθήκες,

$$\begin{aligned} \langle u(t), \phi \rangle - \langle u_0, \phi \rangle + \int_0^t \langle \Delta(\Delta u - f'(u))(\tau), \phi \rangle d\tau \\ - \int_0^t \langle (\Delta u - f'(u))(\tau), \phi \rangle d\tau = \langle W(t), \phi \rangle. \end{aligned}$$

Για να ολοκληρώσουμε την απόδειξη χρησιμοποιούμε την έκφραση

$$\langle A(\Delta u - f'(u)), \phi \rangle = \langle \nabla(\Delta u - f'(u)), \nabla \phi \rangle.$$

□

Γράφουμε την εξίσωση (4.1.1) σε μια μη αυστηρή αφηρημένη μορφή στον χώρο  $H = L^2(\Omega)$  ως εξής

$$\begin{aligned} dX + [(A + I)(AX + f'(X))]dt &= dW, \quad t \in (0, T] \\ X(0) &= X_0, \end{aligned} \tag{4.1.3}$$

όπου ο τελεστής  $A$  έχει οριστεί προηγουμένως.

**Ορισμός 4.1.3.** Η ήπια λύση (*mild solution*) της (4.1.3) είναι μια διαδικασία  $X$  με τιμές στον  $H$ , σχεδόν σίγουρα συνεχής (*a.s.c*), η οποία ικανοποιεί την ακόλουθη εξίσωση:

$$\begin{aligned} X(t) &= X_0 e^{-t(A^2+A)} - \int_0^t (A + I) f'(X(s)) e^{-(t-s)(A^2+A)} ds \\ &+ \int_0^t e^{-(t-s)(A^2+A)} dW(s), \end{aligned} \tag{4.1.4}$$

σχεδόν σίγουρα για  $t \in [0, T]$ . [9]

**Ορισμός 4.1.4.** Η ασθενής λύση (*weak solution*) της εξίσωσης (4.1.3) είναι μια διαδικασία  $X$  με τιμές στον  $H$ , η οποία είναι συνεχής σχεδόν σίγουρα (*a.s*) και ικανοποιεί την εξίσωση

$$\begin{aligned} \langle X(t), \phi \rangle - \langle X_0, \phi \rangle + \int_0^t [\langle X(\tau), A^2 \phi \rangle + \langle f'(X(\tau)), A \phi \rangle] d\tau \\ + \int_0^t [\langle X(\tau), A \phi \rangle + \langle f'(X(\tau)), \phi \rangle] d\tau = \langle W(t), \phi \rangle, \end{aligned} \tag{4.1.5}$$

σχεδόν σίγουρα για όλα τα  $\phi \in H^4$ ,  $t \in [0, T]$ . Επιπλέον, ισχύει ότι  $\frac{\partial \phi}{\partial \nu} = \frac{\partial \Delta \phi}{\partial \nu} = 0$  στο  $\partial \Omega$ . [9]

Επειδή  $A = -\Delta$  η εξίσωση (4.1.5) γράφεται ως

$$\begin{aligned} \langle X(t), \phi \rangle - \langle X_0, \phi \rangle + \int_0^t \langle \nabla X(\tau), \nabla (\Delta \phi) \rangle d\tau - \int_0^t \langle \nabla f'(X(\tau)), \nabla \phi \rangle d\tau \\ - \int_0^t \langle \nabla X(\tau), \nabla \phi \rangle d\tau + \int_0^t \langle f'(X(\tau)), \phi \rangle d\tau = \langle W(t), \phi \rangle. \end{aligned}$$

Στη συνέχεια χρησιμοποιούμε τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου αλλά και τον ορισμό  $\langle \nabla u, \nabla w \rangle := \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla w dx$ , για να λάβουμε

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} X(t) \phi dx - \int_{\Omega} X_0 \phi dx = - \int_0^t \int_{\Omega} \nabla X(\tau) \cdot \nabla (\Delta \phi) dx d\tau + \int_0^t \int_{\Omega} \nabla f'(X(\tau)) \cdot \nabla \phi dx d\tau \\ + \int_0^t \int_{\Omega} \nabla X(\tau) \cdot \nabla \phi dx d\tau - \int_0^t \int_{\Omega} f'(X(\tau)) \phi dx d\tau \\ + \int_{\Omega} \phi dW(s). \end{aligned}$$

Εφαρμόζοντας την πρώτη ταυτότητα του Green (2.3.6) στην παραπάνω εξίσωση παίρνουμε

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} X(t) \phi dx - \int_{\Omega} X_0 \phi dx = - \int_0^t \int_{\partial \Omega} X(\tau) \frac{\partial \Delta \phi}{\partial \nu} ds d\tau + \int_0^t \int_{\Omega} X(\tau) \Delta^2 \phi dx d\tau \\ + \int_0^t \int_{\partial \Omega} f'(X(\tau)) \frac{\partial \phi}{\partial \nu} ds d\tau - \int_0^t \int_{\Omega} f'(X(\tau)) \Delta \phi dx d\tau \\ + \int_0^t \int_{\partial \Omega} X(\tau) \frac{\partial \phi}{\partial \nu} ds d\tau - \int_0^t \int_{\Omega} X(\tau) \Delta \phi dx d\tau \\ - \int_0^t \int_{\Omega} f'(X(\tau)) \phi dx d\tau + \int_{\Omega} \phi dW(s). \end{aligned}$$

Τέλος, χρησιμοποιούμε τις συνοριακές συνθήκες  $\frac{\partial \phi}{\partial \nu} = \frac{\partial \Delta \phi}{\partial \nu} = 0$  και η εξίσωση απλοποιείται ως εξής:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (X(t) - X_0) \phi dx = \int_0^t \int_{\Omega} X(\tau) \Delta^2 \phi dx d\tau - \int_0^t \int_{\Omega} f'(X(\tau)) \Delta \phi dx d\tau \\ - \int_0^t \int_{\Omega} X(\tau) \Delta \phi dx d\tau - \int_0^t \int_{\Omega} f'(X(\tau)) \phi dx d\tau \\ + \int_{\Omega} \phi dW(s). \end{aligned}$$

## 4.2 Το Πρόβλημα Πεπερασμένων Στοιχείων

Ανάλογα με την παραπάνω εξίσωση (4.1.2), μπορούμε να ορίσουμε την λύση πεπερασμένων στοιχείων  $u_h(t) \in S_h$  της (4.1.1) ως

$$\begin{aligned} \langle u_h(t), \phi_h \rangle - \langle u_0, \phi_h \rangle + \int_0^t \langle \nabla(-\Delta u_h + P_h f'(u_h))(\tau), \nabla \phi_h \rangle d\tau \\ + \int_0^t \langle (-\Delta u_h + P_h f'(u_h))(\tau), \phi_h \rangle d\tau = \langle W(t), \phi_h \rangle. \end{aligned}$$

Όπως προηγουμένως, η μη αυστηρή αφηρημένη μορφή της εξίσωσης αυτής στον χώρο των συνεχών συναρτήσεων  $S_h$  δίνεται από

$$\begin{aligned} dX_h + [(A_h + I)(A_h X_h + P_h f'(X_h))]dt &= P_h dW, \quad t \in (0, T] \\ X_h(0) &= P_h X_0. \end{aligned} \tag{4.2.1}$$

Επειδή ο  $S_h$  είναι ένας χώρος πεπερασμένης διάστασης και  $f$  είναι ένα πολυώνυμο, η εξίσωση (4.2.1) έχει μοναδική λύση  $X_h$ , [9], σχεδόν παντού συνεχή, που ικανοποιεί την εξίσωση

$$\begin{aligned} X_h(t) = e^{-t(A_h^2 + A_h)} P_h X_0 - \int_0^t e^{-(t-s)(A_h^2 + A_h)} (A_h + I) P_h f'(X_h) ds \\ + \int_0^t e^{-(t-s)(A_h^2 + A_h)} P_h dW(s), \end{aligned}$$

σχεδόν παντού για  $t \in (0, T]$ .

## Κεφάλαιο 5

### Ομαλότητα της Λύσης

Αρχικά, για τα παρακάτω θυμίζουμε τον Ορισμό (4.1.4) για την ασθενή (weak) λύση και τον αντίστοιχο Ορισμό (4.1.3) για την ήπια (mild) λύση.

**Θεώρημα 5.0.1.** Αν  $T > 0$  και  $Tr(A^{\delta-1}Q) < \infty$  για  $\delta > 0$  και υποθέσουμε ότι το  $X_0$  είναι  $\mathcal{F}_0$ -μετρήσιμο με τιμές στον  $H$ , τότε υπάρχει μοναδική ασθενής λύση  $X$  της (4.1.3). [9]

**Πόρισμα 5.0.2.** Υποθέτουμε ότι  $\|A^{\frac{1}{2}}Q^{\frac{1}{2}}\|_{HS} < \infty$  μόνο για την περίπτωση όπου το  $\gamma$  είναι ίσο με 1 και το  $X_0$  είναι  $\mathcal{F}_0$ -μετρήσιμο με τιμές στον  $H^1$  που ικανοποιεί την σχέση  $\|X_0\|_{L^2(\Omega, H^1)}^2 + \|X_0\|_{L^4(\Omega, L^4)}^4 \leq \rho$  για κάποιο  $\rho \geq 0$ . Τότε η ασθενής λύση  $X$  της (4.1.3) είναι επίσης η ήπια λύση.

*Απόδειξη.* Η συνθήκη  $\|A^{\frac{1}{2}}Q^{\frac{1}{2}}\|_{HS} < \infty$  συνεπάγεται ότι  $Tr(A^{\delta-1}Q) < \infty$  με  $\delta = 1$  επειδή  $\|Q^{\frac{1}{2}}\|_{HS}^2 < \infty$ . Επομένως, από το προηγούμενο θεώρημα υπάρχει μοναδική ασθενής λύση  $X$  της εξίσωσης (4.1.3). Έστω  $\epsilon > 0$ , ορίζουμε  $\Omega_\epsilon \subset \Omega$  με  $P(\Omega_\epsilon) \geq 1 - \epsilon$ . Πρώτα δείχνουμε ότι η λύση  $X$  ικανοποιεί την (4.1.4) στο  $\Omega_\epsilon$ . Υπάρχει μια μοναδική ασθενής λύση της (4.1.3), έτσι το μόνο που έχουμε να δείξουμε είναι ότι η δεξιά πλευρά της (4.1.4) ικανοποιεί την (4.1.5) στο  $\Omega_\epsilon$ . Η μοναδική ασθενής λύση του προβλήματος αρχικών τιμών

$$\begin{aligned} dZ + (A^2 + A)Zdt &= dW, \\ Z(0) &= 0 \end{aligned} \tag{5.0.1}$$

είναι η  $Z(t) = \int_0^t e^{-(t-s)(A^2+A)} dW(s)$ , που είναι ίση με  $W_A(t)$ , [9]. Στη συνέχεια, γράφουμε  $Y(t) = X(t) - W_A(t)$  και έχουμε

$$Y(t) = X_0 e^{-t(A^2+A)} - \int_0^t (A + I)f'(X(s))e^{-(t-s)(A^2+A)} ds. \tag{5.0.2}$$

Αρκεί να δείξουμε ότι η εξίσωση (5.0.2) ικανοποιεί την

$$\begin{aligned} \int_\Omega (Y(t) - X_0) \phi dx - \int_0^t \int_\Omega Y(\tau) \Delta^2 \phi dx d\tau + \int_0^t \int_\Omega f'(X(\tau)) \Delta \phi dx d\tau \\ + \int_0^t \int_\Omega Y(\tau) \Delta \phi dx d\tau + \int_0^t \int_\Omega f'(X(\tau)) \phi dx d\tau = 0, \end{aligned} \tag{5.0.3}$$

στο  $\Omega_\epsilon$ ,  $\phi \in H^4$ . Πρώτα από όλα, η εξίσωση (5.0.2) είναι η λύση του παρακάτω προβλήματος αρχικών τιμών

$$\begin{aligned}\dot{Y}(t) + (A^2 + A)Y(t) + (A + I)f'(X(t)) &= 0, \\ Y(0) &= X_0,\end{aligned}$$

το οποίο συνεπάγεται ότι

$$\frac{d}{dt} \langle Y(t), \phi \rangle + \langle (A^2 + A)Y(t), \phi \rangle + \langle (A + I)f'(X(t)), \phi \rangle = 0.$$

Ολοκληρώνουμε την παραπάνω εξίσωση και χρησιμοποιούμε την αρχική συνθήκη  $Y(0) = X_0$ , έτσι έχουμε

$$\begin{aligned}\langle Y(t), \phi \rangle - \langle X_0, \phi \rangle + \int_0^t [\langle A^2 Y(s), \phi \rangle + \langle AY(s), \phi \rangle] ds \\ + \int_0^t [\langle Af'(X(s)), \phi \rangle + \langle f'(X(s)), \phi \rangle] ds = 0,\end{aligned}$$

με  $\phi \in H^4$  και  $\frac{\partial \phi}{\partial \nu} = \frac{\partial \Delta \phi}{\partial \nu} = 0$  στο  $\partial \Omega_\epsilon$ . Όπως προηγουμένως, μπορούμε να γράψουμε την παραπάνω εξίσωση στη μορφή

$$\begin{aligned}\langle Y(t), \phi \rangle - \langle X_0, \phi \rangle + \int_0^t \langle \nabla Y(\tau), \nabla (\Delta \phi) \rangle d\tau - \int_0^t \langle \nabla f'(X(\tau)), \nabla \phi \rangle d\tau \\ - \int_0^t \langle \nabla Y(\tau), \nabla \phi \rangle d\tau + \int_0^t \langle f'(X(\tau)), \phi \rangle d\tau = 0.\end{aligned}$$

Συνεχίζοντας, χρησιμοποιούμε τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου και φτάνουμε στην ακόλουθη εξίσωση

$$\begin{aligned}\int_\Omega Y(t) \phi dx - \int_\Omega X_0 \phi dx = - \int_0^t \int_\Omega \nabla Y(\tau) \cdot \nabla (\Delta \phi) dx d\tau + \int_0^t \int_\Omega \nabla f'(X(\tau)) \cdot \nabla \phi dx d\tau \\ + \int_0^t \int_\Omega \nabla Y(\tau) \cdot \nabla \phi dx d\tau - \int_0^t \int_\Omega f'(X(\tau)) \phi dx d\tau.\end{aligned}$$

Εφαρμόζοντας την πρώτη ταυτότητα του Green (2.3.6) στην παραπάνω εξίσωση παίρνουμε

$$\begin{aligned}\int_\Omega Y(t) \phi dx - \int_\Omega X_0 \phi dx = - \int_0^t \int_{\partial \Omega} Y(\tau) \frac{\partial \Delta \phi}{\partial \nu} ds d\tau + \int_0^t \int_\Omega Y(\tau) \Delta^2 \phi dx d\tau \\ + \int_0^t \int_{\partial \Omega} f'(X(\tau)) \frac{\partial \phi}{\partial \nu} ds d\tau - \int_0^t \int_\Omega f'(X(\tau)) \Delta \phi dx d\tau \\ + \int_0^t \int_{\partial \Omega} Y(\tau) \frac{\partial \phi}{\partial \nu} ds d\tau - \int_0^t \int_\Omega Y(\tau) \Delta \phi dx d\tau \\ - \int_0^t \int_\Omega f'(X(\tau)) \phi dx d\tau.\end{aligned}$$

Η εξίσωση αυτή μαζί με τις συνοριακές συνθήκες  $\frac{\partial \phi}{\partial \nu} = \frac{\partial \Delta \phi}{\partial \nu} = 0$ , δίνουν την (5.0.3). Χρησιμοποιώντας την ανισότητα Sobolev και την  $\|X(t)\|_1 \leq C$ , [22], παίρνουμε

$$\begin{aligned} \|f'(X(s))\| &= \|4(X(s))^3 - 4X(s)\| \leq C\|(X(s))^3\| + C\|X(s)\| \\ &= C\|X(s)\|_{L^6}^3 + C\|X(s)\| \leq C(\|X(s)\|_{H^1}^3 + \|X(s)\|) \\ &\leq C(\|X(s)\|_1^3 + \|X(s)\|) \leq C \end{aligned}$$

για  $t \in (0, T]$ ,  $\omega \in \Omega_\epsilon$ . Σημειώνουμε ότι η σταθερά  $C$  εξαρτάται από  $\epsilon$ ,  $\rho$ ,  $Q$ ,  $T$ . Αυτό δείχνει επίσης ότι το ντετερμινιστικό ολοκλήρωμα της (4.1.4) ανήκει στον  $L^1([0, T], H)$  στο  $\Omega_\epsilon$  από την αναλυτικότητα της ημιομάδας:

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega_\epsilon} \int_0^t \|(A + I)e^{-(t-s)(A^2+A)} f'(X(s))\| ds dx d\tau &= \\ &= \int_0^T \int_0^t \int_{\Omega_\epsilon} \|(A + I)e^{-(t-s)(A^2+A)} f'(X(s))\| ds d\tau dx \\ &\leq C \int_0^T \int_0^t \int_{\Omega_\epsilon} \|f'(X(s))\| ds d\tau dx \leq C. \end{aligned}$$

□

Στο επόμενο θεώρημα μελετάμε την ομαλότητα του  $Y$ . Χρησιμοποιούμε την ισχυρότερη υπόθεση  $\|A^{\frac{\gamma}{2}} Q^{\frac{1}{2}}\|_{HS} < \infty$  για  $\gamma = 2, 3$  και το γεγονός ότι  $W_A(t)$  είναι στον  $H^3$  σχεδόν σίγουρα (βλ. Θεώρημα (2.4.2)) και δείχνουμε ότι η λύση  $X(t)$  είναι στον  $H^3$  σχεδόν σίγουρα.

**Θεώρημα 5.0.3.** Υποθέτουμε ότι  $\|A^{\frac{\gamma}{2}} Q^{\frac{1}{2}}\|_{HS} < \infty$  για  $\gamma = 2, 3$  και ότι το  $X_0$  είναι  $\mathcal{F}_0$ -μετρήσιμο με τιμές στον  $H^3$  ικανοποιώντας την  $\|X_0\|_{L^2(\Omega, H^1)}^2 + \|X_0\|_{L^4(\Omega, L^4)}^4 \leq \rho$  για κάποιο  $\rho \geq 0$ . Έστω  $T > 0$  και  $\epsilon \in (0, 1)$  και το  $\Omega_\epsilon$  ορίζεται όπως προηγουμένως. Έστω ότι  $K_T$  είναι μια σταθερά που εξαρτάται από τα  $\rho$ ,  $Q$ ,  $T$  τέτοια ώστε να ισχύει  $\|X_0\|_3 \leq c$  στο  $\Omega_\epsilon$ . Έστω ότι το  $X$  είναι η λύση που αναφέρουμε στο Θεώρημα (5.0.1) και ισχύει η  $Y = X - W_A$ . Τότε  $X, Y \in C([0, T], H) \cap L^\infty([0, T], H^3)$  σχεδόν σίγουρα και για κάθε  $\omega \in \Omega_\epsilon$ ,

$$\|Y(t)\|_3 \leq C \text{ στο } \Omega_\epsilon, \quad t \in (0, T], \quad (5.0.4)$$

$$\|X(t)\|_3 \leq C \text{ στο } \Omega_\epsilon, \quad t \in (0, T]. \quad (5.0.5)$$

*Απόδειξη.* Η συνέχεια της λύσης  $X$  περιλαμβάνεται ήδη στο Θεώρημα (5.0.1) και η συνέχεια της  $Y$  προκύπτει από την συνέχεια των  $X$  και  $W_A$ . Για να δείξουμε ότι  $X, Y \in L^\infty([0, T], H^3)$  σχεδόν σίγουρα αρκεί να δείξουμε την (5.0.4) και την (5.0.5) για τυχαίο  $\epsilon > 0$  και  $P(\Omega_\epsilon) \geq 1 - \epsilon$ . Έστω  $t \in (0, T]$  και  $\omega \in \Omega_\epsilon$ . Από την αναφορά [22] έχουμε

$$\|X(t)\|_1^2 \leq \epsilon^{-1} K_T, \quad \|W_A(t)\|_3 \leq \epsilon^{-1} K_T. \quad (5.0.6)$$

Παίρνουμε ημινόρμες στην

$$Y(t) = e^{-t(A^2+A)}X_0 - \int_0^t (A+I)e^{-(t-s)(A^2+A)}f'(X(s))ds$$

έτσι έχουμε

$$\begin{aligned} |Y(t)|_3 &= \left| e^{-t(A^2+A)}X_0 - \int_0^t (A+I)e^{-(t-s)(A^2+A)}f'(X(s))ds \right|_3 \\ &\leq |e^{-t(A^2+A)}X_0|_3 + \left| \int_0^t (A+I)e^{-(t-s)(A^2+A)}f'(X(s))ds \right|_3 \\ &\leq |e^{-t(A^2+A)}X_0|_3 + \int_0^t |(A+I)e^{-(t-s)(A^2+A)}f'(X(s))|_3 ds. \end{aligned}$$

Χρησιμοποιούμε την ισότητα  $\|A^{\frac{s}{2}}v\| = |v|_s$  για  $s = 3$  και λαμβάνουμε την ανισότητα:

$$|Y(t)|_3 \leq \|e^{-t(A^2+A)}A^{\frac{3}{2}}X_0\| + \int_0^t \|A^{\frac{3}{2}}e^{-(t-s)(A^2+A)}(A+I)f'(X(s))\|ds.$$

Τώρα χρησιμοποιούμε την (2.2.5) και η παραπάνω ανισότητα παίρνει την μορφή

$$|Y(t)|_3 \leq c\|A^{\frac{3}{2}}X_0\| + \int_0^t c(t-s)^{-\frac{3}{4}}\|(A+I)f'(X(s))\|ds.$$

Για τον πρώτο όρο του δεξιού μέλους χρησιμοποιούμε πάλι την ισότητα  $\|A^{\frac{s}{2}}v\| = |v|_s$  για  $s = 3$  και παίρνουμε

$$|Y(t)|_3 \leq c|X_0|_3 + c \int_0^t (t-s)^{-\frac{3}{4}}\|(A+I)f'(X(s))\|ds.$$

Ενώ για τον όρο  $\|(A+I)f'(X(s))\|$  λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} \|(A+I)f'(X(s))\| &= \|Af'(X(s)) + f'(X(s))\| \\ &= \|\Delta f'(X(s)) + f'(X(s))\| \\ &\leq \|\Delta f'(X(s))\| + \|f'(X(s))\|. \end{aligned} \tag{5.0.7}$$

Από το φράγμα του μη-γραμμικού όρου και συγκεκριμένα από την ανισότητα (2.7.1) έχουμε  $\|\Delta f'(X(s))\| \leq c(1 + \|X(s)\|_1^2)\|X(s)\|_3$  και για την νόρμα  $\|f'(X(s))\|$  έχουμε

$$\begin{aligned} \|f'(X(s))\| &= \|4(X(s))^3 - 4X(s)\| \leq c\|(X(s))^3\| + c\|X(s)\| \\ &\leq c\|X(s)\|_{L^6}^3 + c\|X(s)\|_{L^6} = c\|X(s)\|_{L^6}(\|X(s)\|_{L^6}^2 + 1) \\ &\leq c\|X(s)\|_{H_1}(1 + \|X(s)\|_{H_1}^2) \leq c\|X(s)\|_1(1 + \|X(s)\|_1^2), \end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τις ανισότητες  $\|u\|_{L^6} \leq c\|u\|_{H^1}$  και  $\|u\|_{H^1} \leq c\|u\|_1$ . Επομένως, για την (5.0.7) παίρνουμε  $\|(A + I)f'(X(s))\| \leq \|\Delta f'(X(s))\|$  διότι ισχύει  $\|X(s)\|_1 \leq \|X(s)\|_3$ . Άρα, αντικαθιστώντας όλα τα παραπάνω στην  $|Y(t)|_3$ :

$$|Y(t)|_3 \leq c|X_0|_3 + c \int_0^t (t-s)^{-\frac{3}{4}} (1 + \|X(s)\|_1^2) \|X(s)\|_3 ds$$

και επειδή  $X(s) = Y(s) + W_A(s)$  λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} |Y(t)|_3 &\leq c|X_0|_3 + c \int_0^t (t-s)^{-\frac{3}{4}} (1 + \|X(s)\|_1^2) \|Y(s) + W_A(s)\|_3 ds \\ &\leq c|X_0|_3 + c \int_0^t (t-s)^{-\frac{3}{4}} (1 + \|X(s)\|_1^2) (\|Y(s)\|_3 + \|W_A(s)\|_3) ds. \end{aligned}$$

Επειδή  $(I - P)Y(t) = (I - P)X_0$  είναι σταθερό, παίρνουμε το ίδιο ακριβώς φράγμα για τη νόρμα  $\|Y(t)\|_3$

$$\|Y(t)\|_3 \leq c\|X_0\|_3 + c \int_0^t (t-s)^{-\frac{3}{4}} (1 + \|X(s)\|_1^2) (\|Y(s)\|_3 + \|W_A(s)\|_3) ds.$$

Χρησιμοποιώντας, επίσης, την (5.0.4) έχουμε

$$\begin{aligned} \|Y(t)\|_3 &\leq c\|X_0\|_3 + c \int_0^t (t-s)^{-\frac{3}{4}} (1 + \epsilon^{-1}K_T) (\|Y(s)\|_3 + \epsilon^{-1}K_T) ds \\ &= c\|X_0\|_3 + c \int_0^t [(t-s)^{-\frac{3}{4}} (1 + \epsilon^{-1}K_T) \|Y(s)\|_3 + (t-s)^{-\frac{3}{4}} (1 + \epsilon^{-1}K_T) \epsilon^{-1}K_T] ds \\ &= c\|X_0\|_3 + c \int_0^t (t-s)^{-\frac{3}{4}} (1 + \epsilon^{-1}K_T) \|Y(s)\|_3 ds + c \int_0^t (t-s)^{-\frac{3}{4}} (1 + \epsilon^{-1}K_T) \epsilon^{-1}K_T ds \\ &= c\|X_0\|_3 + c(1 + \epsilon^{-1}K_T) \int_0^t (t-s)^{-\frac{3}{4}} \|Y(s)\|_3 ds + c(1 + \epsilon^{-1}K_T) \epsilon^{-1}K_T \int_0^t (t-s)^{-\frac{3}{4}} ds \\ &\leq c\|X_0\|_3 + c(1 + \epsilon^{-1}K_T) \int_0^t (t-s)^{-\frac{3}{4}} \|Y(s)\|_3 ds + c\epsilon^{-1}K_T(1 + \epsilon^{-1}K_T)T^{\frac{1}{4}}. \end{aligned}$$

Τέλος, εφαρμόζοντας το Λήμμα Gronwall (2.5.1) με τα  $a$  και  $\beta$  να παίρνουν τις τιμές  $a = 1$  και  $\beta = \frac{1}{4}$ , ενώ για τα  $A$  και  $B$  θέτουμε

$$A = c\|X_0\|_3 + c\epsilon^{-1}K_T(1 + \epsilon^{-1}K_T), \quad B = c(1 + \epsilon^{-1}K_T),$$

παίρνουμε

$$\|Y(t)\|_3 \leq A + B \int_0^t (t-s)^{-\frac{3}{4}} \|Y(s)\|_3 ds, \quad t \in (0, T].$$



Τότε, υπάρχει μια σταθερά  $C = C(B, T, a, \beta)$  τέτοια ώστε

$$\|Y(t)\|_3 \leq CA = C(c, T), \quad t \in (0, T].$$

Το φράγμα για τη νόρμα  $\|X(t)\|_3$  είναι  $\|X(t)\|_3 \leq C(c, T)$  γιατί ισχύει η σχέση  $\|X(t)\|_3 = \|Y(t) + W_A(t)\|_3$ , η οποία συνεπάγεται ότι

$$\begin{aligned} \|X(t)\|_3 &\leq \|Y(t)\|_3 + \|W_A(t)\|_3 \\ &\leq C(c, T) + \epsilon^{-1}K_T \\ &\leq C. \end{aligned}$$

□

Να σημειώσουμε ότι η απόδειξη του Θεωρήματος (5.0.3) δείχνει ότι κάτω από τις υποθέσεις που αναφέρονται σε αυτό το θεώρημα,  $f'(X(t)) \in D(A)$  σχεδόν σίγουρα και  $\|Af'(X(t))\| < \infty$  σχεδόν σίγουρα για  $t \in [0, T]$ . Επομένως, η λύση  $X$  ικανοποιεί μια πιο αυστηρή ήπια λύση της (4.1.4):

$$\begin{aligned} X(t) &= X_0 e^{-t(A^2+A)} - \int_0^t (A + I)f'(X(s))e^{-(t-s)(A^2+A)} ds \\ &\quad + \int_0^t e^{-(t-s)(A^2+A)} dW(s). \end{aligned}$$

## Κεφάλαιο 6

### Συμπεράσματα

Το πρόβλημα της αλλαγής φάσης από την πλευρά της Φυσικής ερμηνεύεται με τους μικροσκοπικούς μηχανισμούς spin flip και spin exchange που αφορούν, αντίστοιχα, στην προσρόφηση/εκρόφηση του σωματιδίου από την επιφάνεια στη φάση του αερίου και αντίστροφα και από τη διάχυση ενός σωματιδίου πάνω στην επιφάνεια. Στα Μαθηματικά οι εξισώσεις που επιλύουν αυτό το πρόβλημα είναι η Cahn-Hilliard και η Allen-Cahn. Η πρώτη περιγράφει την επιφανειακή διάχυση και η δεύτερη την προσρόφηση/εκρόφηση στην επιφάνεια.

Το πρόβλημα της συνδυασμένης εξίσωσης που αποτελείται από την Cahn-Hilliard, την Allen-Cahn και την διαδικασία Wiener διατυπώθηκε σε μια μη αυστηρή αφηρημένη μορφή στον  $L^2(\Omega)$  ως εξής:

$$\begin{aligned} dX + [(A + I)(AX + f'(X))]dt &= dW, \quad t \in (0, T] \\ X(0) &= X_0. \end{aligned} \tag{6.0.1}$$

Η μορφή αυτή της εξίσωσης αποδείχτηκε πιο χρήσιμη συγκριτικά με την (4.1.1). Η ήπια λύση της (6.0.1) δίνεται από τον τύπο

$$\begin{aligned} X(t) = X_0 e^{-t(A^2+A)} - \int_0^t (A + I)f'(X(s))e^{-(t-s)(A^2+A)}ds \\ + \int_0^t e^{-(t-s)(A^2+A)}dW(s). \end{aligned} \tag{6.0.2}$$

Θέτοντας  $Y(t) = X(t) - W_A(t)$ , όπου  $X(t)$  είναι η (6.0.2) και  $W_A(t) = \int_0^t e^{-(t-s)(A^2+A)}dW(s)$  αποδείχτηκε ότι η ασθενής λύση της  $X$  ικανοποιεί επίσης την ήπια λύση (6.0.2). Επιπλέον, χρησιμοποιώντας το φράγμα για τους μη-γραμμικούς όρους (η σχετική απόδειξη υπάρχει στην ενότητα 2.7) αλλά και την μοναδικότητα της ασθενούς λύσης του  $X(t)$  αποδείξαμε την ομαλότητα του  $Y(t)$ .

Μια περαιτέρω μελέτη σε σχέση με τα ήδη υπάρχοντα αποτελέσματα θα αποτελούσε η εκτίμηση του σφάλματος της μη-γραμμικής εξίσωσης Cahn-Hilliard/ Allen-Cahn κάνοντας χρήση της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων.

# Βιβλιογραφία

- [1] N. D. Alikakos, P. W. Bates, X. Chen. *Convergence of the Cahn-Hilliard equation to the Hele-Shaw model*. Arch. Rational Mech. Anal., 128(2):165–205, 1994.
- [2] S. Allen, J.W. Cahn, *A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening*, Acta Metall. 27:1084-1095, 1979.
- [3] D.C. Antonopoulou, G.D. Karali, *Existence of solution for a generalized Stochastic Cahn-Hilliard Equation on convex domains*, Discrete Contin. Dyn. Syst. B, 16(1), pp. 31–55, 2011.
- [4] D.C. Antonopoulou, G.D. Karali, A. Millet, Y. Nagase, *Existence of solution and of its density for a Stochastic Cahn-Hilliard/Allen-Cahn equation*, in progress.
- [5] D.C. Antonopoulou, G.D. Karali, A.D. Talidou, *Numerical study and error analysis for the multi-dimensional stochastic Cahn-Hilliard/Allen-Cahn equation*, in progress.
- [6] G. Barles, P.E. Souganidis. *A new approach to front propagation problems: Theory and applications*. Arch. Rational Mech. Anal., 141:237–296, 1998.
- [7] X. Chen, *Existence, uniqueness, and asymptotic stability of traveling waves in nonlocal evolution equations*, Adv. Differential Equations 2, 125 (1997).
- [8] G. Da Prato, A. Debussche, *Stochastic Cahn-Hilliard equation*, Nonlinear Anal., 26 (1996), pp. 241-263.
- [9] G. Da Prato, J. Zabczyk, *Stochastic Equations in Infinite Dimensions*, Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [10] A. De Masi, E. Orlandi, E. Presutti, L. Triolo, *Glauber evolution with Kač potentials: I. Mesoscopic and macroscopic limits, interface dynamics*, Nonlinearity 7, 633 (1994).
- [11] C. M. Elliott, S. Larsson, *Error estimates with smooth and nonsmooth data for a finite element method for the Cahn-Hilliard equation*, Math. Comp., 58 (1992), pp. 603-630, S33-S36.

- [12] G. Ertl, *Oscillatory kinetics and spatio-temporal self-organization in reactions at solid surfaces*, Science 254, 1750 (1991).
- [13] G. Giacomin, J. Lebowitz, E. Presutti, *Deterministic and stochastic hydrodynamic equations arising from simple microscopic model systems*, in Stochastic Partial Differential Equations: Six Perspectives. Edited by R. Carmona and B. Rozovskii, Math. Surveys Monogr., Vol. 64, p. 107, Amer. Math. Soc., Providence, RI (1999).
- [14] G. H. Gilmer, P. Bennema, *Simulation of crystal growth with surface diffusion*, J. Appl. Phys. 43, 1347 (1972).
- [15] M. Hildebrand, A. S. Mikhailov, *Mesosopic modeling in the kinetic theory of adsorbates*, J. Phys. Chem. 100, 19089 (1996).
- [16] R. Imbihl, G. Ertl, *Oscillatory kinetics in heterogeneous catalysis*, Chem. Rev. 95, 697 (1995).
- [17] G. Karali, M. A. Katsoulakis, *The role of multiple microscopic mechanisms in cluster interface evolution*, J. Differential Equations 235(2), pp. 418-438 (2007).
- [18] M. A. Katsoulakis, P. E. Souganidis, *Generalized motion by mean curvature as a macroscopic limit of stochastic Ising models with long range interactions and Glauber dynamics*, Comm. Math. Phys. 169, 61 (1995).
- [19] M. A. Katsoulakis, P. E. Souganidis, *Stochastic Ising models and anisotropic front propagation*, J. Stat. Phys. 87, 63 (1997).
- [20] M. A. Katsoulakis, D. G. Vlachos, *From microscopic interactions to macroscopic laws of cluster evolution*, Phys. Rev. Letters 84, 1511 (2000).
- [21] M. A. Katsoulakis, D. G. Vlachos, *Mesosopic modeling of surface processes*, in “Multiscale Models for Surface Evolution and Reacting Flows”, IMA Vol. Math. Appl. 136 (2003), 179-198.
- [22] M. Kovács, S. Larsson, A. Mesforush, *Finite element approximation of the Cahn-Hilliard-Cook equation*, SIAM J. Numer. Anal. 49 (2011), 2407-2429.
- [23] D. P. Landau, K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, (2000).
- [24] S. Larsson, A. Mesforush, *Finite element approximation of the linearized Cahn-Hilliard-Cook equation*, IMA J. Numer. Anal. (2011).
- [25] J. L. Lebowitz, E. Orlandi, E. Presutti, *A particle model for spinodal decomposition*, J. Stat. Phys. 63, 933 (1991).

- [26] H. Spohn, *Interface motion in modes with Stochastic dynamics*, J. Stat. Phys. 71, no. 5-6, 1081-1132, (1993).
- [27] V. Thomée, *Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems*, Springer-Verlang, Berlin, 1997.