
BOLLETTINO

UNIONE MATEMATICA ITALIANA

Sezione A – La Matematica nella Società e nella Cultura

ULISSE STEFANELLI

Modelli di transizione di fase con movimenti microscopici

*Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. 7-A—La
Matematica nella Società e nella Cultura (2004), n.3, p. 579–582.*

Unione Matematica Italiana

http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_2004_8_7A_3_579_0

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

Modelli di transizione di fase con movimenti microscopici.

ULISSE STEFANELLI

1. – Introduzione.

Lo studio matematico dei fenomeni di transizione di fase presenta un evidente interesse applicativo ed è proprio di una varietà di contesti differenti. Si considerino, a titolo d'esempio, la solidificazione e liquefazione di misture solido-liquide, le transizioni solido-solido nelle leghe e nei polimeri, la combustione, l'elasto-plasticità, la formazione del vetro, la crescita dei cristalli.

A partire dai primi contributi di Stefan, la letteratura matematica sulle transizioni di fase si è sviluppata lungo due direzioni principali: da un lato si è assistito ad un continuo perfezionamento modellistico al fine di includere descrizioni di fenomeni ed effetti sempre nuovi, dall'altro si è progredito nella precisazione matematica dei modelli già esistenti. In questo quadro, i modelli alle derivate parziali rivestono certamente un ruolo di cruciale rilevanza in considerazione della loro capacità di descrizione e predizione.

Questa tesi si propone di fornire alcuni risultati analitici in relazione ad una nuova teoria macroscopica per transizioni di fase solido-liquide recentemente proposta da M. Frémond [4]. L'aspetto saliente di questo nuovo approccio modellistico consiste nella descrizione degli effetti dei movimenti microscopici delle molecole sulla transizione di fase. In molti contesti applicativi la sostanza che cambia di fase può essere infatti considerata come un mezzo macroscopicamente *rigido*. D'altra parte un cambiamento di fase implica, dal punto di vista euristico, una riorganizzazione della sostanza a livello molecolare ed è quindi appropriato renderne conto mediante la modellizzazione dei movimenti microscopici.

La teoria in esame si propone di interpretare la relazione tra le scale modellistiche microscopiche e macroscopiche mediante un approccio di tipo energetico. In particolare, si considera il contributo macroscopico alle usuali relazioni di bilancio dovuto alla potenza dei movimenti molecolari. In questo quadro, la tesi si occupa dello studio di alcuni problemi a valori iniziali ed al contorno per il sistema di relazioni alle derivate parziali che scaturisce dalle sopradette equazioni di bilancio. Sono stati affrontati sia il problema dell'esistenza globale di soluzioni che, in alcuni casi, della loro approssimabilità mediante opportuni schemi di semi-discretizzazione rispetto al tempo.

2. – Modello.

Si consideri una sostanza che presenti due sole fasi e che occupi una regione regolare $\Omega \subset \mathfrak{R}^n$ con $n = 1, 2, 3$. Vogliamo studiare l'evoluzione nell'intervallo finito di tempo $(0, T)$ delle funzioni incognite di stato θ (temperatura assoluta) e χ (parametro d'ordine). In particolare la grandezza χ è descrittiva della transizione di fase e può essere interpretata come la proporzione di una delle due fasi rispetto all'altra. Le relazioni che governano la dinamica della sostanza sono classicamente la relazione di bilancio energetico ed il principio delle potenze virtuali. In riferimento a quest'ultimo si considerano espressamente dei termini aggiuntivi che rappresentano le potenze interne virtuali riferite all'azione dei movimenti molecolari. Infine, un'opportuna scelta dei funzionali di densità di energia libera e di dissipazione forniscono le relazioni costitutive necessarie a chiudere il modello. Il sistema di equazioni alle derivate parziali che ne deriva è il seguente:

$$(1) \quad c_s \dot{\theta} + L \dot{\chi} - k \Delta \theta = - \frac{L}{\theta_c} (\theta - \theta_c) \dot{\chi} + \mu \dot{\chi}^2 + \xi \dot{\chi},$$

$$(2) \quad \mu \dot{\chi} - \nu \Delta \chi + \xi + \eta = \frac{L}{\theta_c} (\theta - \theta_c),$$

$$(3) \quad \xi \in \alpha(\dot{\chi}), \quad \eta \in \beta(\chi),$$

dove il punto indica la derivazione rispetto al tempo, Δ denota classicamente il laplaciano rispetto alle variabili spaziali, c_s è la densità di calore specifico, L è la densità di calore latente relativo alla transizione di fase, k è la costante di diffusività termica, θ_c è la temperatura critica di transizione di fase, μ è un parametro di dissipazione e ν è collegato all'energia d'interfaccia.

Nella relazione (3) i simboli $\alpha, \beta \subset \mathfrak{R} \times \mathfrak{R}$ rappresentano due grafici massimali monotoni, eventualmente multivoci. In particolare, scelte fisicamente rilevanti sono $\alpha = \partial I_{[0, +\infty)}$ (dove $I_{[0, +\infty)}$ rappresenta la funzione indicatrice $I_{[0, +\infty)}(x) = 0$ se $x \geq 0$ e $I_{[0, +\infty)}(x) = +\infty$ altrimenti) e ∂ è il sottodifferenziale nel senso dell'Analisi Convessa) e $\alpha = 0$. Nel primo caso $\dot{\chi}$ è vincolata ad essere non-negativa, modellizzando così la situazione di una transizione di fase *irreversibile*. D'altra parte la scelta $\alpha \equiv 0$ non pone alcun vincolo sul segno di $\dot{\chi}$ e si riferisce alla situazione *reversibile*.

Per quanto riguarda la scelta del grafico β dobbiamo osservare che il caso fisicamente più significativo è $\beta = \partial I_{[0, 1]}$ che forza χ a prendere solo valori in $[0, 1]$. Quest'ultimo vincolo è particolarmente naturale nella situazione ove χ sia interpretato come una proporzione di fase.

Il sistema (1)-(3) è in stretta relazione con alcuni modelli classici per transizioni di fase. La scelta $\alpha \equiv 0, \mu = \nu = 0$ e $\beta = \partial I_{[0, 1]}$ permette infatti di ricondursi al ben noto problema di Stefan a due fasi. Ponendo invece $\alpha \equiv 0, \nu = 0$ e $\beta = \partial I_{[0, 1]}$ otteniamo il classico modello di *rilassamento di fase* di Frémond e Visintin [5].

Infine, una opportuna linearizzazione di (1)-(3) con la scelta $\alpha \equiv 0$ porta ai cosiddetti modelli di *campo di fase*. L'interesse dell'approccio alla modellizzazione delle transizioni di fase solido-liquido mediante i movimenti microscopici non si esaurisce quindi in una descrizione più accurata del fenomeno ma propone anche la possibilità di ottenere in maniera unificata alcuni modelli noti. Questo aspetto è particolarmente interessante in quanto i citati modelli classici sono spesso derivati e giustificati termodinamicamente in maniera del tutto indipendente. Al contrario la derivazione del modello con i movimenti microscopici permette direttamente di verificare la consistenza termodinamica per il sistema (1)-(3).

3. - Risultati.

Sono stati dimostrati alcuni risultati di esistenza ed approssimabilità di soluzioni per modelli nella classe (1)-(3) accoppiati ad opportune condizioni iniziali ed al contorno. In linea generale, l'analisi consiste generalmente nello studio di problemi approssimanti, nella stima a priori delle rispettive soluzioni e nel passaggio al limite rispetto all'approssimazione. L'implementazione di questo programma per le scelte modellistiche concrete presentate nella tesi ha richiesto la risoluzione di alcune difficoltà. In primo luogo si è reso necessario provare la positività della temperatura per ogni soluzione del sistema (1)-(3). Questa proprietà è infatti rilevante non solo dal punto di vista della consistenza termodinamica dei modelli ma anche in relazione alla possibilità di ottenere stime a priori adeguate sulle soluzioni approssimanti. È stato quindi necessario dimostrare opportuni principi di massimo per (1)-(3) che garantissero, a partire da dati iniziali positivi, la positività della temperatura θ per ogni tempo. Una seconda difficoltà analitica relativa allo studio di (1)-(3) consiste nel trattare le nonlinearità di tipo quadratico presenti in (1). A questo scopo sono stati predisposti impianti di stime a priori efficaci, eventualmente suggeriti dall'analogia tra la teoria delle transizioni di fase con micro-movimenti e la termo-visco-elasticità. Infine, si è posto il problema di passare al limite nella doppia nonlinearità di (2)-(3). Questo punto è stato risolto mediante l'uso di tecniche di compattezza, monotonia e semicontinuità.

Nell'ambito dei risultati di esistenza recentemente ottenuti in collaborazione con P. Colli, Ph. Laurençot, F. Luterotti e G. Schimperna, nella tesi sono presentati tre modelli particolari:

1. Il modello tridimensionale con α qualsiasi (eventualmente $\alpha = \partial I_{[0, +\infty)}$ per descrivere le transizioni irreversibili), $\nu = 0$ e $\beta = \partial I_{[0, 1]}$. Utilizzando accuratamente tecniche per equazioni differenziali ordinarie ed un'opportuna approssimazione per regolarizzazione e troncatura, siamo stati in grado di provare l'esistenza globale di una soluzione in spazi funzionali adeguati [1].

2. Il modello unidimensionale con $\alpha \equiv 0$ (transizioni di fase reversibili) e β coercivo qualsiasi. Abbiamo studiato una regolarizzazione e provato opportune

stime a priori che hanno permesso di passare al limite per compattezza e monotonia e provare l'esistenza di una soluzione forte globale [2].

3. Il modello unidimensionale con $\alpha = \partial I_{[0, +\infty)}$ (transizioni irreversibili) e β coercivo qualsiasi. Metodi di compattezza e semicontinuità hanno permesso di passare al limite rispetto ad un'approssimazione per regolarizzazione [3].

L'implementazione di opportune simulazioni numeriche per soluzioni di (1)-(3) pare cruciale al fine di poter validare la prospettiva modellistica della teoria delle transizioni di fase con micro-movimenti. In questa direzione la tesi presenta un primo studio circa la possibilità di un'effettiva approssimazione numerica di un modello della classe (1)-(3). In particolare, è stato necessario ridursi al modello tridimensionale semplificato dove $\alpha = \partial I_{[0, +\infty)}$ (transizioni irreversibili), β coercivo qualsiasi e $\mu = 0$ in (1) mentre è diverso da zero altrove. Questo modello descrive il comportamento della sostanza sotto l'ipotesi di *piccole perturbazioni*, anche per regimi lontani dalla temperatura critica θ_c . È stata proposta una procedura di semidiscretizzazione rispetto al tempo a passi variabili. Si dimostra che il relativo schema discreto (completamente implicito) è stabile e convergente. Inoltre è stato possibile fornire delle stime a priori dell'errore di discretizzazione di ordine ottimale. Queste stime risultano indipendenti dalla scelta dei passi temporali e possono essere d'aiuto nell'implementazione di una procedura risolutiva di tipo adattativo.

BIBLIOGRAFIA

- [1] COLLI P., LUTEROTTI F., SCHIMPERNA G. e STEFANELLI U., *Global existence for a class of generalized systems for irreversible phase changes*, NoDEA Nonlinear Differential Equations Appl., **9** (2002), 255-276.
- [2] LAURENÇOT PH., SCHIMPERNA G. e STEFANELLI U., *Global existence of a strong solution to the one-dimensional full model for irreversible phase transitions*, J. Math. Anal. Appl., **271** (2002), 426-442.
- [3] LUTEROTTI F. e STEFANELLI U., *Existence result for the one-dimensional full model of phase transitions*, Z. Anal. Anwendungen, **21** (2002), 335-350, *Errata & Addendum*, *ibid.*, **22** (2003), 239-240.
- [4] FRÉMOND M., *Non-smooth Thermomechanics*, Springer-Verlag, Berlin (2002).
- [5] FRÉMOND M. e VISINTIN A., *Dissipation dans le changement de phase. Surfusion. Changement de phase irréversible*, C. R. Acad. Sci. Paris Sér. II Méc. Phys. Chim. Sci. Univers. Sci. Terre, **301** (1985), 1265-1268.

IMATI - CNR, v. Ferrata, 1, I-27100, Pavia; e-mail: ulisse@imati.cnr.it

Dottorato in Matematica e Calcolo Scientifico

(sede amministrativa: Università di Pavia) - Ciclo XIV

Direttore di ricerca: Prof. Pierluigi Colli, Università di Pavia