

---

# BOLLETTINO

# UNIONE MATEMATICA ITALIANA

*Sezione A – La Matematica nella Società e nella Cultura*

---

ELISABETTA ROCCA

## Modelli di transizione di fase di tipo Penrose-Fife

*Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. 8-A—La  
Matematica nella Società e nella Cultura (2005), n.3-1, p. 625–628.*

Unione Matematica Italiana

[http://www.bdim.eu/item?id=BUMI\\_2005\\_8\\_8A\\_3-1\\_625\\_0](http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_2005_8_8A_3-1_625_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 di tipo Penrose-Fife

ELISABETTA ROCCA

### 1. – Introduzione.

Lo studio di fenomeni di transizione di fase, che tuttora presenta un notevole interesse applicativo, risale al 1873, anno in cui la prima equazione di stato che regolasse l'evoluzione di sostanze soggette a transizioni di fase fu introdotta da van der Waals. Successivamente, nel 1937, Landau presentò la teoria delle transizioni di fase di second'ordine (un esempio di tali fenomeni sono le transizioni dalla fase ferromagnetica a quella paramagnetica alla temperatura di Curie). Successivamente questa teoria fu estesa anche a fenomeni di transizioni di fase di prim'ordine da Devonshire (un esempio sono i processi di fusione, sublimazione e trasformazione di solidi da una struttura cristallina all'altra).

Ovviamente, la derivazione di questa teoria richiede l'introduzione di una quantità fisica che differisce nelle due fasi; nella teoria di Landau questa prende il nome di *parametro d'ordine*. Questa nomenclatura viene dalla *magnetizzazione* nelle transizioni di fase ferromagnetiche-paramagnetiche: gli spins sono disordinati nella fase paramagnetica ed ordinati in quella ferromagnetica. Nella tesi si utilizza il simbolo  $\chi$  per denotare tale parametro. Se consideriamo, ad esempio, fenomeni di diffusione di una sostanza confinata in un contenitore limitato  $\Omega \subset \mathcal{R}^3$  in cui avvengono i fenomeni di transizione di fase,  $\chi$  rappresenta la *proporzione locale* di una delle due fasi. In questa teoria macroscopica si può supporre  $\chi \equiv -1$  nella fase puramente solida,  $\chi \equiv 1$  in quella puramente liquida e  $-1 < \chi < 1$  quando si ha un miscuglio delle due fasi. Se consideriamo invece fenomeni di *separazione di fase* (ad esempio in leghe binarie),  $\chi$  rappresenta la *concentrazione* della sostanza.

A partire dai primi lavori di Stefan, la letteratura matematica e quella modellistica su questi argomenti si sono notevolmente sviluppate. Questa tesi si propone di studiare problemi ai valori iniziali ed al contorno per il sistema di equazioni alle derivate parziali che proviene da modelli di transizione di fase proposti nel 1990 da O. Penrose e P.C. Fife [3]. Nonostante questi modelli siano stati introdotti abbastanza recentemente, il numero di lavori anche matematici già presenti in letteratura è notevole; tuttavia, molti problemi restano tuttora insoluti. Per esempio, dal punto di vista analitico, questioni di buona positura per leggi di flusso di calore particolarmente interessanti o lo studio del comportamento per tempi lunghi delle soluzioni di problemi ai valori iniziali ed al contorno per i sistemi di equazioni alle derivate parziali che provengono da modelli di tipo Penrose-Fife, appunto, sono ancora da investigare e questa tesi vuol essere di spunto anche per la discussione di tali argomenti.

## 2. – Il modello.

Questa tesi, come già annunciato nell'Introduzione, si occupa dello studio analitico di sistemi di equazioni alle derivate parziali che descrivono l'evoluzione delle variabili di fase  $\mathcal{S}$  (la temperatura assoluta del sistema) e  $\chi$  (il parametro d'ordine) nel dominio cilindrico  $Q_T := \Omega \times (0, T)$ , dove  $T$  rappresenta il tempo finale della transizione di fase. Le relazioni che governano la dinamica del processo sono ottenute (nella derivazione originale di Penrose e Fife [3]) in termini del *funzionale di entropia* tramite le relazioni di bilancio dell'energia interna del sistema (equazione che regola l'evoluzione di  $\mathcal{S}$ ) e l'equazione di bilancio della massa (che regola l'evoluzione di  $\chi$ ). Per un'opportuna scelta del funzionale di entropia (che porta anche alla *consistenza termodinamica* del modello) e della legge di flusso ( $\mathbf{q} := -\nabla[\phi(\mathcal{S})]$ , dove  $\nabla$  indica il gradiente fatto rispetto alle variabili spaziali) si ottengono i seguenti sistemi (per  $j = 0, 1$ ) di equazioni alle derivate parziali:

$$(1) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} (\mathcal{S} + \lambda(\chi)) - \Delta \phi(\mathcal{S}) = g & \text{in } Q_T; \\ \mu \frac{\partial \chi}{\partial t} + (-\Delta)^j \left[ -\varepsilon \Delta \chi + \sigma'(\chi) + \beta(\chi) + \frac{\lambda'(\chi)}{\mathcal{S}} - \frac{\lambda'(\chi)}{\mathcal{S}_C} \right] \ni 0 & \text{in } Q_T, \end{cases}$$

Il simbolo  $-\Delta (= (-\Delta)^1)$  rappresenta qui l'operatore di Laplace spaziale, mentre  $\frac{\partial}{\partial t}$  indica la derivata rispetto alla variabile temporale, usiamo inoltre la convenzione per cui  $(-\Delta)^0$  rappresenta l'operatore Identità e studiamo i due sistemi accoppiati con condizioni al bordo ed iniziali opportune. La quantità positiva  $\mathcal{S}_C$  rappresenta la temperatura critica del sistema,  $\mu$  è collegata alla mobilità del sistema,  $\varepsilon$  all'ordine di grandezza dell'energia di interfaccia, ed infine  $g$  rappresenta una sorgente di calore. Nella tesi si sono anche considerate analisi asintotiche al tendere a zero di questi parametri  $\varepsilon$  e  $\mu$ , particolarmente piccoli nelle applicazioni significative.

Da un punto di vista modellistico, se  $\chi$  rappresenta la densità o concentrazione di una sostanza (come una componente in una lega metallica), allora segue dal *principio di conservazione della massa* che il processo dinamico non può cambiare la massa totale del sistema (a meno che non ci sia un flusso di massa attraverso il contorno). Questa situazione è bene descritta dal sistema (1), per  $j = 1$ , se si accoppiano alla seconda equazione condizioni di flusso di massa nullo, cioè condizioni di Neumann omogenee sul potenziale chimico della transizione di fase  $w \in -\varepsilon \Delta \chi + \sigma'(\chi) + \beta(\chi) + \lambda'(\chi)/\mathcal{S} - \lambda'(\chi)/\mathcal{S}_C$ . Parleremo in questo caso di *sistema conservato*. Infatti, integrando per parti in spazio la seconda equazione in (1) ed usando tale condizione al contorno, si ottiene che la media spaziale di  $\chi$  rimane costante durante tutta l'evoluzione. Il caso invece in cui  $j = 0$  verrà detto *non conservato*.

Nel sistema (1) l'accoppiamento delle due equazioni è dato dal termine  $\lambda'(\chi)$ , che è un termine collegato al *calore latente* della transizione di fase; in generale questa funzione può essere di tipo polinomiale del primo o del second'ordine in  $\chi$ . Inoltre,  $\beta \in \mathcal{R} \times \mathcal{R}$  in (1) rappresenta un grafo massimale e monotono, eventualmente mul-

tivoco, che proviene dalla parte convessa del funzionale di energia libera (cioè il funzionale di entropia cambiato di segno), mentre  $\sigma'$  dalla sua parte regolare ma non convessa. In particolare, si può considerare il caso fisicamente interessante in cui  $\beta = \partial\hat{\beta}$  (dove  $\partial$  è il sottodifferenziale dell'Analisi Convessa e  $\hat{\beta}$  è una funzione propria, convessa e semicontinua inferiormente);  $\hat{\beta} + \sigma$  può avere la forma del classico potenziale di doppio pozzo  $W(\chi) := (\chi^2 - 1)^2$  oppure può anche essere del tipo  $W(\chi) = I_{[-1,1]}(\chi) + \sigma(\chi)$  con  $\sigma$  funzione liscia concava e dove  $I_{[-1,1]}$  rappresenta la funzione Indicatrice dell'intervallo  $[-1, 1]$ . Quest'ultimo caso (in cui  $\chi$  è forzata ad assumere solo valori in  $[-1, 1]$ ) è particolarmente interessante nel caso, in cui  $\chi$  sia interpretato come una proporzione di fase.

In letteratura, ed anche all'interno della tesi stessa, si sono inoltre considerate diverse possibilità per quanto riguarda la forma della legge di flusso di calore, cioè la forma della funzione  $\phi$  che appare nella prima equazione in (1). Ricordiamo qui il contributo fondamentale del lavoro di Colli e Laurençot [2] in cui si prova l'esistenza di soluzioni per il sistema (1), per  $j = 0$ ,

$$(2) \quad \phi(\mathcal{J}) \sim -\kappa_1/\mathcal{J} + \kappa_2\mathcal{J}, \quad (\kappa_1, \kappa_2 > 0)$$

e quando la prima equazione è accoppiata con condizioni al bordo di Terzo tipo per  $\phi(\mathcal{J})$ . Questa legge di flusso sembra particolarmente interessante in quanto descrive bene il comportamento del sistema sia per valori di  $\mathcal{J}$  vicini a zero, sia per valori grandi di  $\mathcal{J}$ , per i quali la legge di Fourier rappresenta meglio l'evoluzione. In passato si sono introdotte anche leggi di flusso che volevano affrontare il caso in cui il calore fosse trasportato attraverso un fenomeno di conduzione a velocità sì grandi, ma non infinite. A tale scopo in un lavoro del 1968 Gurtin e Pipkin introdussero una legge di flusso *con memoria* in cui  $q$  dipende dalla storia passata di  $\nabla\mathcal{J}$  e non solo dal suo valore attuale, cioè  $q(x, t) = - \int_{-\infty}^t k(t-s)\nabla\mathcal{J}(x, s) ds$ , per  $(x, t) \in Q_T$ , con  $k$  nucleo di memoria. Alcuni dei risultati ottenuti in questa tesi riguardano appunto il sistema (1) in cui si considerano generalizzazioni di tali leggi di flusso con memoria, ma singolari in  $\mathcal{J}$ .

### 3. - I risultati.

Nella tesi si sono ottenuti risultati di buona positura e regolarità delle soluzioni per i sistemi (1), con  $j = 0, 1$ , con diverse scelte di leggi di flusso singolari in  $\mathcal{J}$  con o senza memoria e per diverse condizioni al bordo sulla temperatura (condizioni di Terzo tipo o di Neumann). Le tecniche utilizzate si basano su metodi di approssimazione (con metodi di discretizzazione in tempo o metodi di regolarizzazione)-stime a priori-passaggio al limite, tramite risultati di monotonia e compattezza, particolarmente utili soprattutto per la presenza di forti nonlinearità nel sistema (come il grafo  $\beta$  o la funzione  $\phi$  in (1)). Possiamo citare qui alcuni dei risultati ottenuti nella tesi.

– In [4] si è provato, utilizzando una tecnica di regolarizzazione in tempo, la buona positura per il sistema (1) nel caso conservato (cioè per  $j = 1$ ), accoppiato con condizioni di Terzo tipo per  $\phi(\mathcal{D})$  e di Neumann omogenee per  $\chi$  e per  $w$ , quando la legge di flusso fosse della forma (2), ma con memoria, e la nonlinearità  $\beta$  fosse il sottodifferenziale di una funzione propria, convessa e semicontinua inferiormente qualunque, includendo i casi fisicamente significativi elencati precedentemente. Si è provato inoltre l'unicità di soluzioni più regolari ottenute per una scelta di dati più regolari.

– In [5], in collaborazione con Giulio Schimperna, ho studiato il sistema (1) nel caso conservato (cioè con  $j = 1$ ) quando la legge di flusso fosse del tipo Fourier, cioè  $\phi(\mathcal{D}) = \mathcal{D}$  nella prima equazione. In letteratura si trovano ben pochi lavori in cui si analizzi tale accoppiamento; notevoli problemi sorgono infatti quando si vuol stimare il termine  $1/\mathcal{D}$  nella seconda equazione, non essendo questo presente nella prima. In [5] abbiamo ovviato a questa difficoltà scegliendo opportune funzioni di  $\mathcal{D}$  come test nella seconda equazione ed usando teoremi di compattezza ad hoc.

– Per quanto riguarda risultati analitici su modelli di tipo Penrose-Fife, sono presenti molti lavori in letteratura che accoppiano la prima equazione con condizioni di terzo tipo sulla temperatura, o sulla funzione  $\phi(\mathcal{D})$ , ma ben pochi invece trattano condizioni di Neumann o di Dirichlet. In [1], in collaborazione con Pierluigi Colli, Gianni Gilardi e Giulio Schimperna, ho ottenuto un risultato di buona positura per il sistema (1) in cui la prima equazione fosse accoppiata con condizioni al bordo di Neumann non omogenee per  $\phi(\mathcal{D})$  (con  $\phi$  sostanzialmente della forma (2), ma un po' più generale) nel caso non conservato, cioè quando  $j = 0$ . In questo lavoro abbiamo ovviato alla mancanza di coercività, data appunto da tali condizioni al bordo, stimando la media spaziale del termine  $1/\mathcal{D}$  usando unicamente la seconda equazione.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] COLLI P., GILARDI G., ROCCA E. e SCHIMPERNA G., *On a Penrose-Fife phase-field model with non-homogeneous Neumann boundary condition for the temperature*, Differential and Integral Equations, **17** (2004), 511-534.
- [2] COLLI P. e LAURENÇOT PH., *Weak solutions to the Penrose-Fife phase field model for a class of admissible heat flux laws*, Phys. D, **111** (1998), 311-334.
- [3] PENROSE O. e FIFE P.C., *Thermodynamically consistent models of phase field type for the kinetics of phase transitions*, Phys. D, **43** (1990), 44-62.
- [4] ROCCA E., *The conserved Penrose-Fife phase field model with special heat flux laws and memory effects*, J. Int. Eq. Appl., **14** (2002), 425-466.
- [5] ROCCA E. e SCHIMPERNA G., *The conserved Penrose-Fife system with Fourier heat flux law*, Nonlinear Anal. Ser. A: Theory Methods, **53** (2003), 1089-1100.

Dipartimento di Matematica "F. Enriques", Università degli Studi di Milano

e-mail: rocca@mat.unimi.it

Dottorato in Matematica e Calcolo Scientifico (sede amministrativa):

Università di Pavia - Ciclo XV

Direttore di ricerca: Prof. Gianni Gilardi, Università di Pavia