

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA TRE  
FACOLTÀ DI SCIENZE M.F.N.

Sintesi della Tesi di Laurea in Matematica  
di  
Roberto Raffo

**Algoritmo numerico per la  
simulazione della fase solida in un  
processo di transizione di fase  
liquido/solido**

Relatore  
Prof. Daniela Mansutti

ANNO ACCADEMICO 2001 - 2002  
OTTOBRE 2002

Roberto Raffo è nato a Roma il 4 Ottobre del 1978.

Ha conseguito il Diploma di Maturità presso l'Istituto Tecnico Commerciale XXVIII.

Si è immatricolato al Corso di Laurea in Matematica presso l'Università di RomaTre nell'A.A. 1997-1998.

Ha svolto le attività di tutorato per l'insegnamento di

- AN1 / Laboratorio di Programmazione e calcolo (Prof. Falcone - A.A. 1999-2000)
- AN1 / Analisi Numerica 1° modulo (Prof. Ferretti - A.A. 2000-2001)
- AN1 / Analisi Numerica 1° modulo (Prof. Ferretti - A.A. 2001-2002)
- IN1 / Informatica 1° modulo (Prof. Liverani - A.A. 2002-2003, in svolgimento)

E' inoltre stato vincitore di

- Borsa di studio A.DI.S.U. nell'A.A. 1997/1998
- Borsa di studio A.DI.S.U. nell'A.A. 1998/1999
- Borsa di studio A.DI.S.U. nell'A.A. 1999/2000
- Borsa di studio A.DI.S.U. nell'A.A. 2000/2001
- Borsa di studio A.DI.S.U. nell'A.A. 2001/2002
- Borsa di studio extra-curricolare nell'A.A. 2001/2002

## TESINE ORALI PRESENTATE

1. Teorema di Chebychev (Teoria dei numeri - Prof. Pappalardi)
2. Metodo di eliminazione di Gauss (Analisi Numerica - Prof. Ferretti)

# Indice

<b>Introduzione</b>	<b>I</b>
<b>1 Modello matematico</b>	<b>III</b>
1.1 Fase solida . . . . .	IV
1.2 Fase liquida . . . . .	VI
<b>2 Procedura front-fixing e soluzione numerica</b>	<b>VII</b>
2.1 Procedura front-fixing . . . . .	VII
2.2 Discretizzazione . . . . .	VIII
<b>3 Algoritmo di calcolo</b>	<b>IX</b>
<b>4 Soluzione di un problema test</b>	<b>XIII</b>
4.1 Fusione di un lamina rettangolare di gallio . . . . .	XIV
4.2 Risultati numerici . . . . .	XV
<b>5 Conclusione</b>	<b>XXI</b>
<b>Riferimenti bibliografici</b>	<b>XXII</b>

# Introduzione

L'oggetto di questa tesi, svolta presso l'Istituto per le Applicazioni al Calcolo M.Picone, CNR, Roma, è la progettazione e implementazione di un algoritmo numerico per la simulazione dei processi di cambiamento di fase.

Si tratta di un lavoro propedeutico allo sviluppo di un progetto finanziato dall'Agenzia Spaziale Italiana.

Lo scopo che spinge allo studio di questo problema è l'interesse sempre crescente da parte dell'industria nella conoscenza dei materiali, soprattutto metallici, al fine di garantirne un elevato standard di qualità.

La qualità del solido finale è infatti fortemente influenzata dai processi di cambio di fase liquido/solido che hanno luogo durante la sua produzione [Hup].

Lo stato dell'arte dei modelli matematici è in continua evoluzione. Dapprima nella descrizione del fenomeno si erano limitati a considerare come unico fattore responsabile del processo, la conduzione del calore. Un modello classico è stato proposto da Stefan [Cra]; un modello più recente è quello di tipo "Phase-Field" [Fix]. Sperimentalmente si è notato però, che altri meccanismi fisici vanno presi in considerazione. Ad esempio la convezione della fase liquida, modifica notevolmente il trasferimento dell'energia e questo si ripercuote in modo evidente sulla forma dell'interfaccia di fase.

Nel 1986 Gau e Viskanta proposero [Gau] i risultati di un esperimento di fusione di una lamina di gallio ed evidenziarono chiaramente il fatto che l'interfaccia di fase assume una forma curva attorno alle celle di convezione del liquido. Sono stati formulati quindi vari modelli che oltre alla conduzione prendono in considerazione anche il trasporto convettivo. Questi modelli sono stati poi risolti numericamente da vari autori (Dantzig [Dan], Brent-Voller-Reid [Bre], Cerimele-Mansutti-Pistella [Cer]).

Nei lavori fin qui considerati la fase solida era assunta indeformabile. Recenti

esperimenti di fusione sviluppati da Gondi, Montanari, Evangelista e Buroni [Gon] segnalano la possibilità che i moti convettivi del liquido inducano delle deformazioni della fase solida nell'intorno dell'interfaccia. Questa è la motivazione alla base di questa tesi, dove prenderemo in considerazione anche la dinamica del solido, che verrà descritto, per semplicità, come un solido linearmente elastico [Man], [Bal], [Raj].

Per quel che riguarda poi la soluzione delle equazioni per l'evoluzione di un materiale che subisce una transizione di fase, la principale difficoltà è la forma curva ed incognita dei domini spaziali. Questo aspetto viene qui affrontato con l'ausilio di trasformazioni di coordinate che consentono di lavorare su domini fissi rettangolari. Questa procedura è nota con il nome di "front-fixing" [Cra]. Del resto lo studio numerico qui sviluppato sarà basato su discretizzazioni alle differenze finite.

In questa tesi sarà riprodotta l'evoluzione nel tempo della lamina di gallio dell'esperimento di fusione di Gau-Viskanta, per la prima volta includendo lo studio delle deformazioni della fase solida. I risultati a confronto con quelli ottenuti da Santi [San] nel caso di fase solida indeformabile, evidenziano, come maggior valore, differenze pari allo 0,738% rispetto alla posizione del fronte di fase.

Tuttavia in prossimità del fronte, come segnalato dagli sperimentali [Gon], il solido appare "tirato" dalla fase liquida in movimento e la forma del fronte cambia localmente assecondando le deformazioni, seppure infinitesime, del solido; inoltre il carattere del moto di avanzamento del fronte diventa oscillatorio come era da attendersi per la tipologia di materiale solido scelta (linearmente elastico). Sicuramente un limite del presente studio è la lunghezza dei tempi di calcolo da addurre essenzialmente alla convergenza difficoltosa dei metodi iterativi per i sistemi lineari. L'infiltramento della griglia nell'intorno del fronte di fase, per esempio, potrebbe essere una misura da adottare per migliorare l'accuratezza nella zona critica del dominio ed ottenere migliori inizializzazioni delle procedure iterative. Inoltre sarà lavoro successivo anche l'individuazione di una schema di adimensionalizzazione del modello complessivo che porti alla fine a sistemi discreti con matrici meglio bilanciate.

La tesi è organizzata nel seguente modo: nel capitolo 1 viene introdotto il modello matematico a partire dai postulati delle tre leggi di conservazione.

Nel capitolo 2 viene formulato matematicamente un problema prototipo con l'introduzione di alcune ipotesi semplificative. Nel capitolo 3 viene riformulato il modello in termini di funzioni potenziale. Nel capitolo 4 descriveremo ed introdurremo le tecniche di discretizzazione da noi adottate. Nel capitolo 5 descriveremo l'algoritmo. La stesura del capitolo seguirà nell'ordine la struttura a blocchi dell'algoritmo e del codice di calcolo. Nel capitolo 6 presenteremo l'esperimento "benchmark" di fusione di una lamina di gallio (Gau e Viskanta) con l'inclusione degli effetti di deformazione del solido. La tesi è completata da alcune appendici nelle quali vengono riassunte le equazioni differenziali alle derivate parziali da noi studiate.

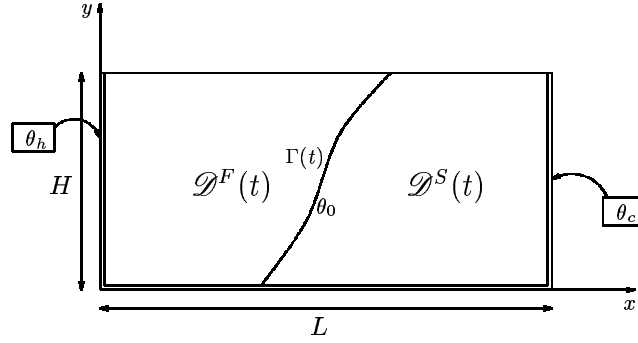
## 1 Modello matematico

Utilizzando la legge di conservazione della massa, di conservazione della quantità di moto e di conservazione dell'energia abbiamo introdotto un modello matematico che descrive un processo di transizione di fase liquido/solido.

Da queste tre leggi abbiamo ricavato quattro equazioni differenziali alle derivate parziali per ciascuna fase ed altre quattro per il bilancio delle quantità sull'interfaccia di fase. Abbiamo quindi ottenuto un sistema di dodici equazioni differenziali alle derivate parziali.

Consideriamo una lamina rettangolare confinata all'interno di una cavità di lunghezza  $L$  ed altezza  $H$ .

Sia  $\theta_0$  la temperatura di fusione, costante tipica del materiale del quale è composta la lamina. Supponiamo che alle estremità della cavità siano applicate due temperature costanti  $\theta_h$  e destra  $\theta_c$  rispettivamente per la parete sinistra e destra tali che  $\theta_h > \theta_0 > \theta_c$ .



Questa differenza di temperatura indurrà una transizione di fase nel dominio nel quale sarà quindi presente un'interfaccia di fase  $\Gamma = \Gamma(t)$  variabile nel tempo. Denotiamo quindi  $\mathcal{D}^F(t)$  il dominio all'interno del quale è presente il materiale liquefatto (*dominio liquido*),  $\mathcal{D}^S(t)$  il dominio contenente il materiale solido (*dominio solido*) e denotiamo inoltre  $\mathcal{D} \equiv \mathcal{D}^F(t) \cup \mathcal{D}^S(t)$ .

Le equazioni che descrivono il modello sono strettamente accoppiate tra loro ed inoltre sono definite in un dominio che varia col tempo e di conseguenza saranno tutte dipendenti anche da esso.

Abbiamo quindi un modello globale definito complessivamente dalle equazioni della fase solida, da quelle della fase liquida e da equazioni valide sull'interfaccia di fase.

Abbiamo poi adottato delle ipotesi semplificative al fine di ottenere un modello più semplice. Le riduzioni da noi apportate sono già state trattate nella letteratura del settore e si è verificato sperimentalmente che queste non modificano eccessivamente le potenzialità del modello.

Esprimiamo ora le equazioni originarie, scritte in termini delle variabili primitive (velocità per la fase liquida e deformazioni per quella solida), in termini di funzioni potenziale. Introduciamo quindi due funzioni potenziale per la fase liquida ( $\psi, \phi$ ) ed una funzione potenziale per quella solida ( $\chi$ ).

## 1.1 Fase solida

Consideriamo le equazioni per la fase solida scritte in termini della funzione potenziale  $\chi$ .

Nella prima equazione

$$\rho_0 \frac{\partial^2 J}{\partial t^2} = \mu \Delta J + \rho_0 \alpha g \frac{\partial \theta^S}{\partial X} \quad (A_{\chi-J})$$

indichiamo con  $\rho_0$  la densità, con  $\mu$  la seconda costante di Lamè, con  $\alpha$  il coefficiente di espansione volumetrica e con  $g$  l'accelerazione di gravità.  $\theta^S$  è la temperatura della fase solida mentre  $J$  è definita dalla

$$J = \frac{\partial U_2}{\partial X} - \frac{\partial U_1}{\partial Y} \quad (1.1)$$

dove  $U \equiv (U_1, U_2)$  sono le deformazioni in coordinate lagrangiane. L'equazione  $(A_{\chi-J})$  ha un carattere iperbolico con un termine sorgente nella temperatura.

L'equazione che segue è invece un'equazione del potenziale

$$\Delta \chi = -J \quad (B_{\chi-J})$$

dove  $\chi$  è definito dalla

$$\mathbf{U} = \nabla \times \chi \quad (1.2)$$

Infine l'ultima equazione della fase solida è l'equazione di tipo parabolico che ci fornisce l'evoluzione del campo di temperature

$$\rho_0 c_p^S \frac{\partial \theta^S}{\partial t} = k^S \Delta \theta^S \quad (C_{\chi-J})$$

dove  $c_p^S$  è il calore specifico del mezzo e dove  $k^S$  è la costante di conducibilità termica.

Queste equazioni concludono la modellizzazione della fase solida. Abbiamo infatti 3 equazioni (A), (B) e (C) per le tre incognite  $\chi$ ,  $J$  e  $\theta^S$ .



## 1.2 Fase liquida

Nella fase liquida utilizziamo il *Teorema di Decomposizione di Helmholtz-Hodge* per decomporre il campo di velocità  $\mathbf{v}^F$  come il rotore di una funzione vettoriale  $\boldsymbol{\psi}$  che chiameremo *Potenziale Vettore* ed il gradiente di una funzione scalare  $\phi$  che chiameremo *Potenziale Scalare*.

Per la prima equazione avremo

$$\rho_0 \left[ \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \left( \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial \zeta}{\partial y} \left( -\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] =$$

$$\hat{\mu} \Delta \zeta + \rho_0 \alpha g \frac{\partial \theta^F}{\partial x} \quad (D_{\psi-\phi-\zeta})$$

dove  $\hat{\mu}$  è il coefficiente di viscosità cinematica mentre  $\zeta$  è la cosiddetta vorticità definita dalla

$$\zeta = \frac{\partial v_2}{\partial x} - \frac{\partial v_1}{\partial y} \quad (1.3)$$

la  $D_{\psi-\phi-\zeta}$  è detta equazione di trasporto di vorticità.

Scriviamo ora l'equazione per l'evoluzione della temperatura nella fase liquida

$$\rho_0 c_p^F \left[ \frac{\partial \theta^F}{\partial t} + \frac{\partial \theta^F}{\partial x} \left( \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial \theta^F}{\partial y} \left( -\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] =$$

$$\hat{\mu} \left[ \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \right)^2 + \left( -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)^2 \right] + k^F \Delta \theta^F$$

$$(E_{\psi-\phi-\zeta})$$

dove, anche in questo caso,  $k^F$  è la conducibilità termica e  $c_p^F$  è il calore specifico.

Abbiamo infine le equazioni dei potenziali

$$\Delta\phi = 0 \qquad (F_{\psi-\phi-\zeta})$$

$$\Delta\psi = -\zeta \qquad (G_{\psi-\phi-\zeta})$$

che sono le ultime due equazioni per la fase liquida. Abbiamo infatti 4 equazioni (D)-(G) per le 4 incognite  $\psi$ ,  $\zeta$ ,  $\phi$  e  $\theta^F$ .

## 2 Procedura front-fixing e soluzione numerica

Come descritto precedentemente il nostro problema concerne due domini  $\mathcal{D}^S(t)$  e  $\mathcal{D}^F(t)$  interfacciati tramite una frontiera mobile, alla quale è associata una funzione  $x = f(y, t)$ .

Possiamo quindi descrivere il nostro fronte di fase  $\Gamma(t)$

$$\Gamma(t) \equiv \{(x, y) : x = f(y, t), y \in [0, H]\} \qquad (2.1)$$

Per risolvere il problema al calcolatore vorremo adottare un metodo alle differenze finite e quindi creare un reticolo discreto di punti equidistanti. Poiché è più agevole lavorare su reticoli rettangolari, sorge allora il problema di gestire i domini curvilinei  $\mathcal{D}^S(t)$  e  $\mathcal{D}^F(t)$ .

Inoltre vorremmo definire una griglia costante nel tempo e questo richiede una elaborazione, visto che il dominio varia col tempo.

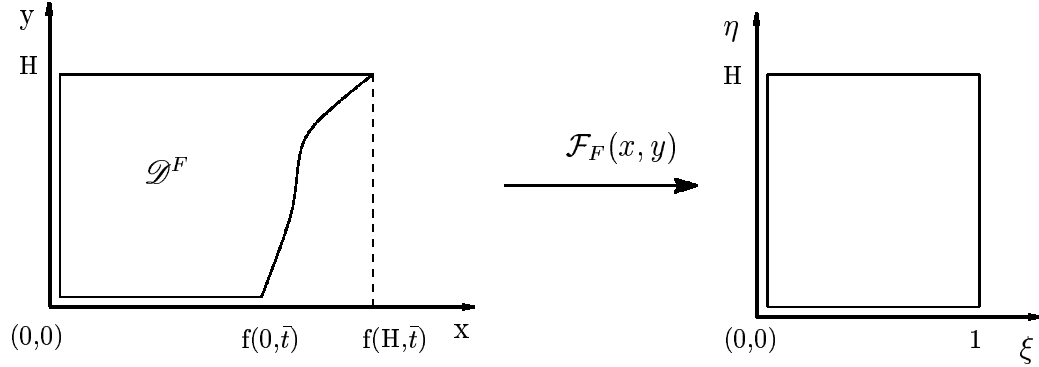
### 2.1 Procedura front-fixing

Adottiamo allora un cambio di coordinate, procedura conosciuta col nome di **front-fixing** [Cra], il quale “raddrizzerà” i domini  $\mathcal{D}^S(t)$  e  $\mathcal{D}^F(t)$  trasformandoli in rettangolari ed altresì li fisserà nel tempo.

Passeremo quindi dal sistema cartesiano  $(x, y)$  al sistema curvilineo  $(\xi, \eta)$ .  
Per il dominio liquido avremo:

$$\mathcal{F}_F : (x, y) \in \mathcal{D}^F \mapsto (\xi, \eta) \in [0, 1] \times [0, H] \quad (2.2)$$

$$\xi = \frac{x}{f(y, t)} \quad \eta = y$$



Questo cambio di coordinate ci porta quindi dal dominio  $[0, f(y, t)] \times [0, H]$  al dominio  $[0, 1] \times [0, H]$ .

Possiamo adottare un cambiamento di coordinate analogo per la fase solida.

## 2.2 Discretizzazione

Per risolvere il sistema di equazioni alle derivate parziali adottiamo un metodo di discretizzazione alle differenze finite su una griglia sfalsata (*staggered grid*). Abbiamo adottato, per le variabili spaziali all'interno del dominio, uno schema alle differenze centrate; abbiamo inoltre adottato un'approssimazione alle differenze finite, unilaterali del secondo ordine verso l'interno, per i punti vicino al bordo. Abbiamo inoltre usato il metodo di *Eulero in avanti* per la variabile temporale. La nostra discretizzazione risulterà quindi essere del secondo ordine nelle variabili spaziali e del primo ordine in quella temporale:

$$\tau(\Delta\xi, \Delta\eta, \Delta t) = O(\Delta\xi^2, \Delta\eta^2, \Delta t) \quad (2.3)$$

dove  $\tau$  è l'errore di troncamento locale.

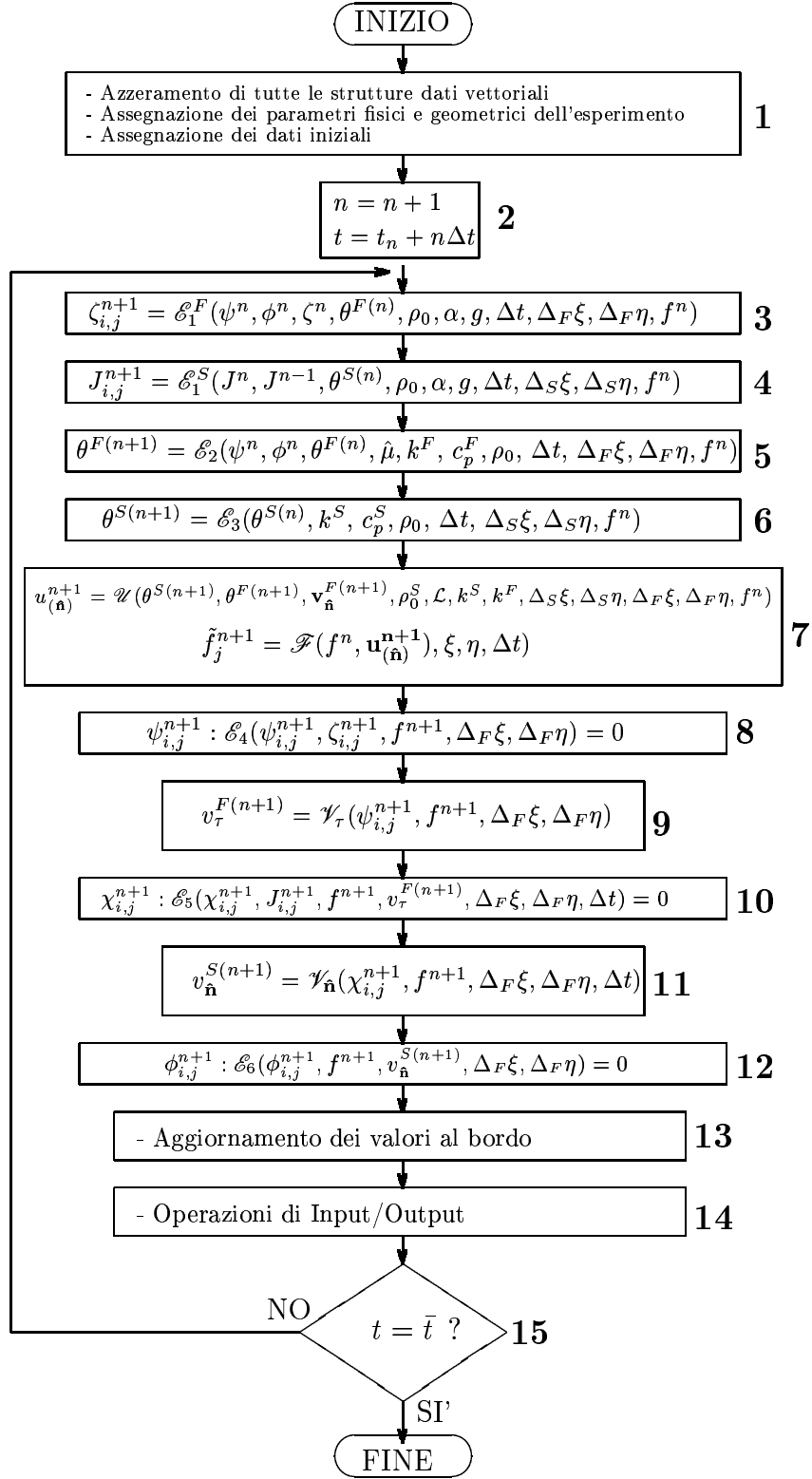
La discretizzazione da noi adottata fa sì che il nostro schema sia consistente. L'analisi della convergenza e quindi della stabilità del nostro schema risulta essere particolarmente difficile a causa della non linearità del problema differenziale, del dominio mobile e del notevole numero di variabili incognite non separate.

Uno svantaggio di questo tipo di metodo numerico, è quello di essere vincolato da una condizione di tipo Courant- Friedrichs-Levy (CFL) sulla scelta dei passi spaziale e temporale. Mentre per i singoli problemi di tipo parabolico od iperbolico sussiste una relazione esatta tra passo spaziale e temporale che ci assicura la stabilità, non riusciamo invece a trovare una relazione che valga globalmente, relazione che è stata parzialmente sviluppata soltanto per la fase liquida, in [Cer].

### 3 Algoritmo di calcolo

Introduciamo ora l'algoritmo numerico da noi progettato per la simulazione di una processo di transizione di fase liquido/solido. Premettiamo che seguiremo una procedura di "splitting" per la quale risolveremo un'equazione alla volta adottando uno schema temporale esplicito per ogni equazione evolutiva.

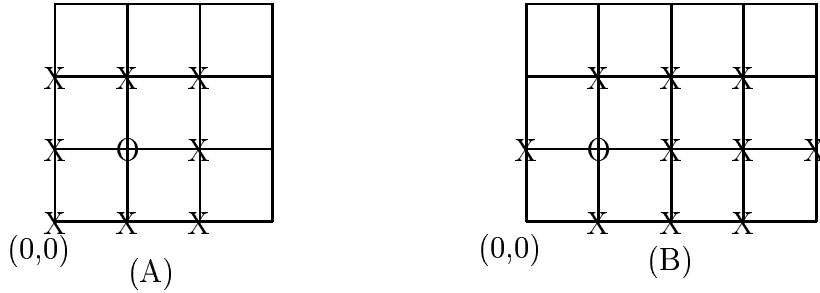
Descriviamo l'algoritmo utilizzando il seguente diagramma a blocchi:



Blocco 1 Vengono effettuate delle operazioni all'esterno del ciclo temporale che vanno fatte una volta soltanto durante l'esecuzione del programma.

Blocco 2 Avanzamento del passo temporale.

Blocco 3 Tramite  $\mathcal{E}_1^F$ , che è una funzione dei suoi argomenti che definisce l'operatore differenziale discreto, aggiorniamo  $\zeta^{n+1}$  in modo esplicito. Una difficoltà che sorge nella scrittura di  $\mathcal{E}_1^F$  è legata alle differenze centrate per i punti vicino agli spigoli. Naturalmente per poter supporre l'esistenza di una soluzione classica all'equazione  $(D_{ff})$  (e quindi a tutto il nostro modello), che sia cioè in  $C^2(\mathcal{D}^F(t)) \forall t > t_0$ , è necessario che anche  $\partial \mathcal{D}^F(t)$  sia ugualmente regolare. A tal fine non richiameremo incognite discrete sugli spigoli che potremo perciò immaginare smussati.



Per esempio prendiamo in esame l'angolo in basso a sinistra di  $\mathcal{D}^F(t)$ . Se con schemi centrati per calcolare le derivate nel punto "O" di figura A abbiamo bisogno dei 9 punti intorno contrassegnati con delle "X", adottando gli schemi, sempre del secondo ordine, del tipo:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial \xi}(\xi_i, \eta_j, t_n) \simeq \frac{-3 \zeta_{i,j}^n + 4 \zeta_{i+1,j}^n - \zeta_{i+2,j}^n}{2 \Delta \xi} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial^2 \zeta}{\partial \xi^2}(\xi_i, \eta_j, t_n) \simeq \frac{2 \zeta_{i,j}^n - 5 \zeta_{i+1,j}^n + 4 \zeta_{i+2,j}^n - 2 \zeta_{i+3,j}^n}{\Delta \xi^2} \quad (3.2)$$

giungiamo ad approssimazioni che richiamano le variabili assegnate nei punti "X" di figura B, dove l'assegnazione sullo spigolo  $(0,0)$  è stata

evitata.

Sottolineiamo ora un'altra difficoltà incontrata nella discretizzazione della derivata temporale, dove abbiamo commesso un'altra imprecisione. Essendo il nostro un problema con un dominio che dipende dal tempo, al passo  $t_{n+1}$  la griglia spaziale fisica non è la stessa di quella al passo  $t_n$ . Quindi la valutazione della  $\zeta_{i,j}^{n+1}$  non è effettuata sulla posizione fisica che il nodo  $(i, j)$  avrà all'istante  $t_{n+1}$  ma sulla posizione fisica occupata all'istante  $t_n$ .

Praticamente questa approssimazione passa attraverso uno "stiramento" della  $\zeta$  sulla griglia al tempo  $t_{n+1}$ . Valutiamo quindi questo errore. Possiamo considerare la velocità del bordo della cella uguale alla velocità del fronte di fase  $\mathbf{u}_{\hat{\mathbf{n}}}$ . Quindi

$$\Delta e = |\mathbf{u}_{(\hat{\mathbf{n}})}| \Delta t$$

dove  $\Delta e$  è la distanza tra il nodo al tempo  $n$  e quello al tempo  $n + 1$ . Questo errore dipenderà quindi dal passo temporale scelto e dalla velocità del fronte. Questo è un altro motivo che ci spinge a considerare un  $\Delta t$  "piccolo".

Blocco 4 Analogamente al precedente aggiorniamo  $J^{n+1}$  in modo esplicito.

Il problema dell'incogruenza delle griglie si ripresenta qui, in maniera più forte, perché abbiamo tre griglie diverse in quanto questa equazione richiama anche il passo  $t_{n-1}$ . Comunque la stima dell'errore che possiamo fare è simile alla precedente e cioè:

$$\Delta e = \left( |\mathbf{u}_{(\hat{\mathbf{n}})}^n| + |\mathbf{u}_{(\hat{\mathbf{n}})}^{n-1}| \right) \Delta t$$

che è dello stesso ordine di grandezza.

Blocco 5 Aggiornamento di  $\theta^{F(n+1)}$ .

Blocco 6 Aggiornamento di  $\theta^{S(n+1)}$ .

Blocco 7 Nella prima parte calcoliamo, tramite la cosiddetta *Condizione di Stefan* la velocità di avanzamento del fronte di fase  $u_{\hat{n}}$ . Nella seconda parte usando tale velocità calcoliamo, tramite l'equazione del moto del fronte di fase, il suo spostamento, che dovremo poi interpolare sui nodi della griglia.

Blocco 8 Passiamo ora allo studio delle equazioni dei potenziali. La tecnica di soluzione sarà molto diversa da quella adottata per le precedenti. Infatti risolveremo queste equazioni, per la prima volta assieme alle condizioni al bordo.

La differenza sostanziale tra queste e le precedenti è che non contengono esplicitamente derivate temporali. La risoluzione implicita ci condurrà ad un sistema lineare di equazioni di  $(nx \cdot ny)$  equazioni in  $(nx \cdot ny)$  incognite.

La soluzione di tale sistema sarà proprio la matrice delle  $\psi^{n+1}$ .

Blocco 9 Aggiorniamo ora la velocità tangenziale sull'interfaccia di fase, che nel nostro "splitting" del modello, utilizziamo come condizione al contorno per la  $\chi$  sul bordo mobile.

Blocco 10 Aggiornamento di  $\chi^{n+1}$ .

Blocco 11 Aggiornamento della velocità normale sull'interfaccia di fase che utilizziamo come condizione al contorno per la  $\phi^{n+1}$  sul bordo mobile.

Blocco 12 Aggiornamento di  $\phi^{n+1}$ .

Blocco 13 Aggiornamento dei valori al bordo.

Blocco 14 Operazioni di Input/Output.

## 4 Soluzione di un problema test

Per testare l'algoritmo ed il codice di calcolo costruiti, si è simulato un esperimento di fusione di una lamina di gallio sul quale abbiamo un vasto numero di risultati in letteratura ([Cer], [Bre], [Dan], [Rad], [Vis]) con i quali possiamo confrontare i nostri risultati. Tale materiale viene prescelto in quanto



alcune proprietà fisiche del liquido e del solido sono quasi uguali e costanti nel tempo durante il cambiamento di fase (per esempio si osserva solo una piccola variazione di densità ( $\simeq 1\%$ ) essendo la differenza di volume molto piccola). Inoltre il fatto che abbia una temperatura di fusione non troppo elevata ( $29.94^\circ C$ ) rispetto ad altri metalli, come l'acciaio o il titanio, fa sì che gli esperimenti fisici siano più facilmente riproducibili.

## 4.1 Fusione di un lamina rettangolare di gallio

La geometria e le condizioni fisiche adottate sono quelle utilizzate dagli sperimentatori Gau e Viskanta [Gau]. Si considera una cavità rettangolare avente tutte le pareti rigide, quelle superiori ed inferiori adiabatiche, mentre la parete di sinistra viene mantenuta ad una temperatura  $\theta_h > \theta_0$  e quella di destra ad una temperatura  $\theta_c < \theta_0$ , dove  $\theta_0$  è la temperatura di fusione.

Al tempo  $t = 0$  nella cavità il materiale è solido tranne che per una piccola striscia che è liquefatta. Man mano che il calore della parete di sinistra si diffonde, il materiale liquefa e il fronte di fase avanza nel tempo lungo la direzione orizzontale.

Le dimensioni della cavità sono  $8,89\text{ cm} \times 6,35\text{ cm}$ . La parete calda è posta ad una temperatura  $\theta_h = 311,16^\circ K$  e la parete fredda alla temperatura  $\theta_c = 301,16^\circ K$ . Inoltre per il gallio vengono usati i seguenti parametri rilevati alla temperatura media dell'esperimento di  $305,16^\circ K$ :

- *Calore latente di fusione:*  $\mathcal{L} = 80160\text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$
- *Coefficiente termico di espansione volumetrica:*  $\tilde{\alpha} = 1,81 \times 10^{-3}\text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
- *Densità:*  $\rho^S = \rho^F = \rho_0 = 6093\text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$
- *Temperatura di fusione:*  $\theta_0 = 302,94^\circ K$
- *Conducibilità termica:*  $k^F = k^S = 32\text{ W} \cdot \text{m}^{-1}$
- *Calore specifico:*  $c_p^F = c_p^S = 381,5\text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
- *Seconda costante di Lamè:*  $\mu = 8,59 \cdot 10^{10}\text{ N/m}^2$

## 4.2 Risultati numerici

Nelle pagine seguenti mostreremo i risultati numerici che abbiamo calcolato e li confronteremo con quelli ottenuti da Santi in [San].

Nella simulazione in [San] si era considerato il solido indeformabile (come del resto in [Dan], [Bre], [Cer]). Qui abbiamo fissato il passo temporale  $\Delta t = 10^{-6} \text{sec}$  ed abbiamo adottato una griglia spaziale di  $121 \times 11$  nodi (ossia  $61 \times 11$  sia nel dominio solido  $\mathcal{D}^S$  che in quello liquido  $\mathcal{D}^F$ ).

La scelta del passo temporale e del numero dei nodi è stata determinata sperimentalmente non avendo stime a priori per la stabilità dello schema numerico (condizione di tipo CFL). Inoltre con tali valori si ottiene (per verifica sperimentale) la convergenza del metodo iterativo di soluzione del sistema lineare per cui come dato iniziale si adotta il valore della variabile incognita al passo precedente che risulta avere una piccola distanza dall'attuale solo per valori sufficientemente "piccoli" di  $\Delta t$ . Abbiamo poi fissato ad  $l(0) = 10^{-3}$  lo spessore della striscia di gallio inizialmente già fusa.

Il grafico che segue è quello della funzione  $f(y, t)$ , cioè il fronte di fase, dopo 10000 passi temporali :

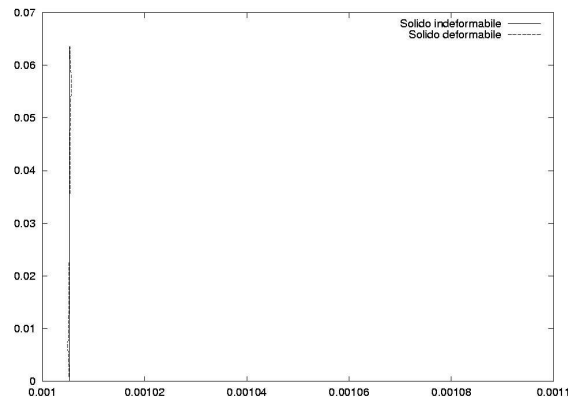


Figura 1: Evoluzione del fronte di fase dopo 10000 passi temporali.

L'intervallo delle  $x$  considerato è  $[0.001; 0.0011]$  per poter evidenziare differenze tra i due risultati (ingrandimento di circa 1000 : 1): la linea continua rappresenta il fronte di fase senza deformazioni come in [San] mentre quella tratteggiata è il risultato originale del nostro algoritmo che considera il

contributo al fronte anche da parte del solido. Notiamo che l'evoluzione orizzontale è quasi la stessa ed il valor medio del grafico tratteggiato coincide proprio con la funzione disegnata con una linea continua. Anche la differenza di forma è lieve visto che il solido subisce piccole deformazioni.

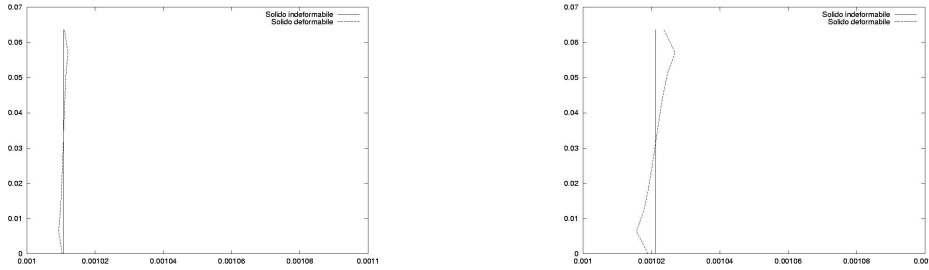


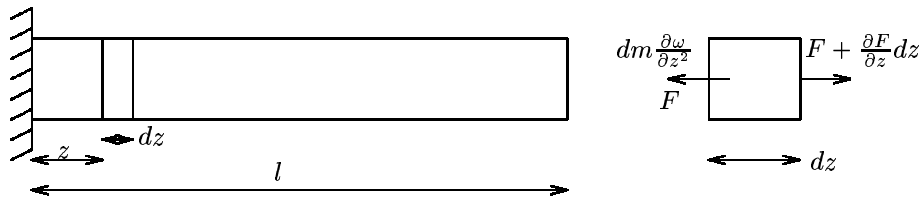
Figura 2: Evoluzione del fronte di fase dopo 20000 e 40000 passi temporali.

Dalle figura 2 vediamo come aumenta la differenza nella forma del fronte di fase rispetto a quella del caso con solido indeformabile. Infatti le deformazioni, che vengono create dal contatto col liquido, che per convezione circola in senso orario, si accumulano. Tuttavia il valor medio delle due funzioni rimane circa lo stesso.

Una scansione più dettagliata dei grafici ci mostra però un altro aspetto interessante calcolato dall'algorithm.

Fino ad ora abbiamo considerato grafici ad una distanza temporale l'uno dall'altro di almeno  $5 \cdot 10^3 \cdot 10^{-6} sec = 5 \cdot 10^{-3} sec$ .

Se effettuiamo un'analisi più dettagliata considerando, ad esempio, una distanza temporale di  $10^{-4} sec$  notiamo che in realtà il verso della velocità del fronte non è costante bensì evolve oscillando nel tempo. Qui abbiamo considerato i grafici a 29400, 29500 e 29600 passi temporali e notiamo come il fronte a 29600 passi temporali si trova più indietro rispetto a quello a 29400 iterazioni ma è più avanzato rispetto a quello a 29500 passi temporali.



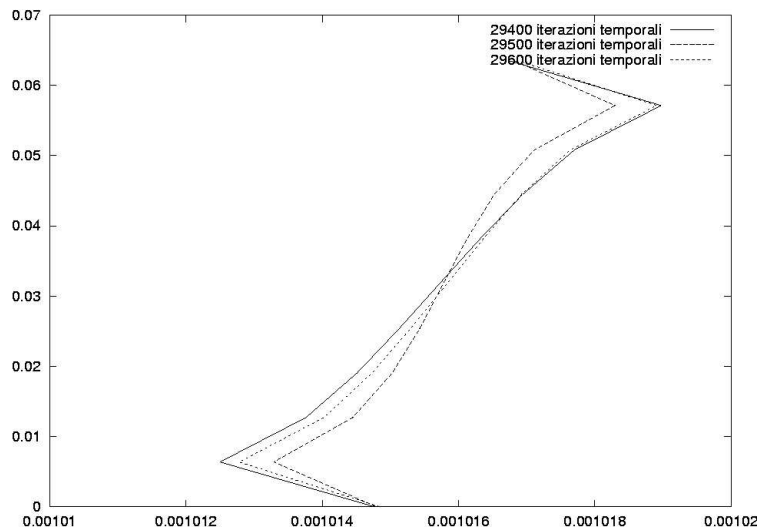


Figura 3: Evoluzione del fronte di fase dopo 29400, 29500 e 29600 passi temporali (Zoom 10000:1)

Queste oscillazioni sono tanto più frequenti quanto più avanziamo nel tempo in quanto saranno dovute ad una sempre maggiore sovrapposizione di onde. Per capire meglio queste oscillazioni possiamo tentare un'analisi su un modello molto semplificato.

Consideriamo ad esempio una trave omogenea prismatica di lunghezza  $l$  soggetta ad oscillazioni longitudinali come in figura

Sia  $\rho_t$  la densità del materiale della trave, sia  $F$  la risultante delle forze agenti e indichiamo con  $\mu_t$  il modulo di elasticità di Young. Allora la legge che governa lo spostamento assiale  $w$  è del tipo

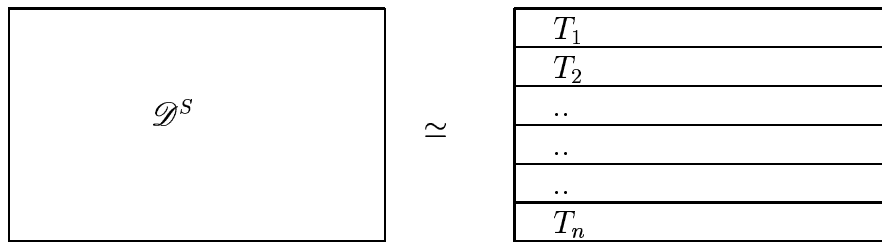
$$\frac{\partial^2 w}{\partial z^2} = \frac{\rho_t}{\mu_t} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \quad (4.1)$$

che è un'equazione delle onde simile a quella che governa le componenti di deformazione della fase solida.

Si può calcolare una soluzione del tipo:

$$w = A \operatorname{sen} \left( \frac{\pi z}{2l} \right) \operatorname{sen} \left( \frac{\pi}{2l} \sqrt{\frac{\mu_t}{\rho_t}} t \right) \quad (4.2)$$

In prima approssimazione e soltanto per fare un'analisi qualitativa dei risultati possiamo considerare la nostra lamina di gallio solida come formata dalla sovrapposizione di tali travi unidimensionali



Questa è evidentemente un'approssimazione che non considera il legame molecolare tra le “travi” e quindi la natura bidimensionale della nostra lamina; inoltre la soluzione (4.2) è calcolata per una trave libera ad un estremo che non è il nostro caso.

Tali “travi” subiscono sollecitazioni da parte del liquido, le prime in alto vengono spinte verso l'interno, mentre vengono “tirate” verso l'esterno quelle in basso come osservato dagli sperimentali in [Gon]. Queste subiscono sollecitazioni continue e non costanti ma dipendenti sia dal tempo che dalla posizione.

Quindi oscillano come abbiamo visto nella figura 3 e come ci aspettavamo dall'equazione appena risolta (4.2). Di tali oscillazioni non possiamo dire nulla in quanto sono combinazione lineare delle varie soluzioni associate ai diversi tipi di sollecitazioni fornite dal liquido.

Se calcoliamo la velocità come:

$$\frac{dw}{dt} = \frac{Z(z)\pi}{2l} \sqrt{\frac{\mu_t}{\rho_t}} \text{sen}\omega t \quad (4.3)$$

notiamo che essa cambia segno ed inoltre dipende dalla modulo di elasticità di Young che è dell'ordine di  $10^{10} \text{kg/m}^2$ . Si hanno quindi oscillazioni molto rapide difficili da seguire se non con un passo temporale  $\Delta t$  "piccolo".

Le deformazioni che subisce il solido sono quindi dovute allo scorrere del fluido sull'interfaccia di fase. Se osserviamo il campo delle velocità nel fluido notiamo che esso gira nel suo dominio in senso orario.

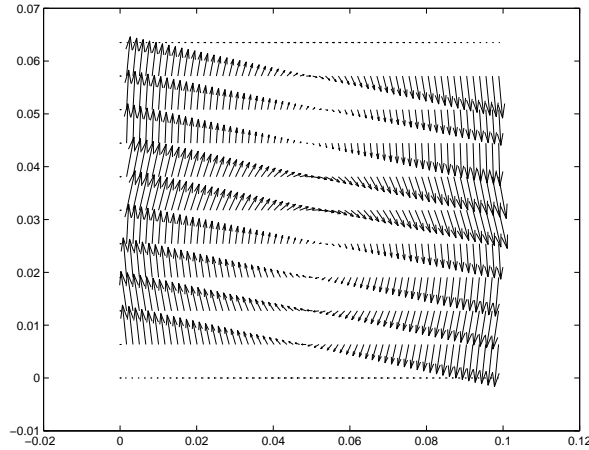


Figura 4: Campo delle velocità all'interno della fase liquida dopo 10000 passi temporali.

Il grafico delle velocità all'interno della fase liquida che abbiamo visto in figura 4 è la rappresentazione del campo vettoriale  $\mathbf{v}^F \equiv (v_1^F, v_2^F)$ . Ogni freccia rappresenta un vettore di modulo proporzionale alla lunghezza della freccia. Le più grandi di esse sono dell'ordine di  $10^{-4}$  mentre le più piccole

dell'ordine di  $10^{-5}$ . Ognuna di esse a come punto d'applicazione un punto della griglia  $(x_i, y_j)$ ,  $\forall i = 1, \dots, nx$ ,  $\forall j = 1, \dots, ny$ .

Le deformazioni da esso indotte nel solido seguono quindi tale direzione; il solido viene "spinto" dal liquido nella parte alta e viene "tirato" nella parte bassa:

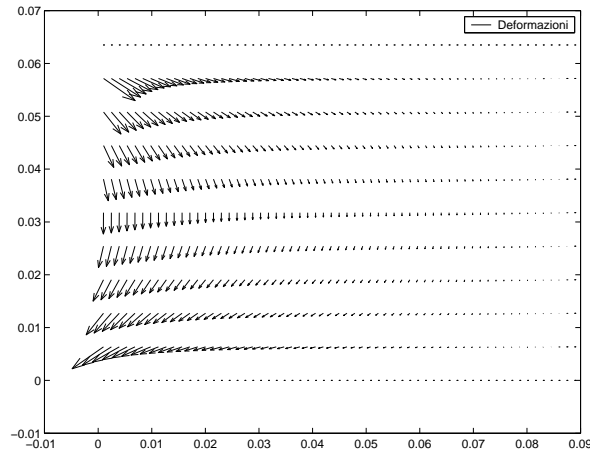


Figura 5: Campo di deformazioni all'interno della fase solida dopo 10000 passi temporali.

Lo stesso dicasi per il campo vettoriale di figura 5.2.0.e esso rappresenta il campo delle deformazioni all'interno della fase solida  $\mathbf{U}^S \equiv (U_1^S, U_2^S)$ . L'ordine di grandezza delle frecce di modulo maggiore, quelle più vicine al fronte di fase, è di  $10^{-6}$  mentre quelle di modulo minore, che sono quelle vicino alla parete fissa, è di  $10^{-9}$ . L'ordine di grandezza delle deformazioni aumenta gradualmente fino ad arrivare, dopo 40000 passi temporali, ad avere come ordine di grandezza  $10^{-5}$  le frecce di modulo maggiore e  $10^{-8}$  quelle di modulo minore.

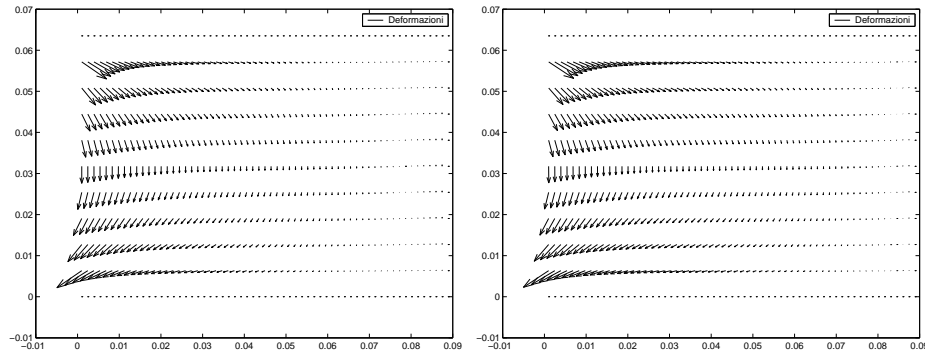


Figura 6: Campo di deformazioni all'interno della fase solida dopo 20000 e 40000 passi temporali.

## 5 Conclusione

In questa tesi abbiamo affrontato il problema di considerare anche le deformazioni del solido in un processo di transizione di fase liquido/solido per la prima volta nella letteratura su questo argomento. In particolare abbiamo usato la geometria e la fisica dell'esperimento di Gau e Viskanta [Gau], che consiste nella fusione di una lamina di gallio confinata in una cavità rettangolare. Abbiamo poi confrontato i risultati ottenuti, con quelli di Santi [San] tratti nel caso di fase solida indeformabile, evidenziando differenze massime pari allo 0,738% rispetto alla posizione del fronte di fase.

I valori delle deformazioni della fase solida che abbiamo calcolato, sono in linea con le recenti segnalazioni degli sperimentali (Gondi, Montanari, et al.) [Gon]: il solido appare "tirato" dalla fase liquida in movimento convettivo e la forma del fronte cambia localmente assecondando le deformazioni, seppure infinitesime, del solido.

Inoltre abbiamo osservato che per il solido preso in considerazione (linearmente elastico), cambia anche il carattere del moto di avanzamento del fronte di fase, diventando oscillatorio, a differenza del caso in cui il solido era considerato indeformabile, dove il verso della velocità di avanzamento del fronte era costante.

Nel codice di calcolo che abbiamo costruito, un obiettivo importante è stato quello di ottimizzare l'occupazione di memoria allocando meno variabili pos-



sibili e soprattutto scegliendo una memorizzazione compatta per le matrici sparse. Abbiamo inoltre trovato sperimentalmente il parametro di rilassamento ottimale per la convergenza dei metodi iterativi di soluzione dei sistemi lineari. I tempi di calcolo del codice sono però consistenti. Sarà obiettivo di lavoro successivo quello di ridurli, introducendo accorgimenti come l'adimensionalizzazione del modello complessivo per un bilanciamento migliore delle matrici dei sistemi discreti, l'infittimento della griglia nella zona critica del dominio (il fronte) per ottenere migliori inizializzazioni delle procedure iterative.

Il codice dell'algoritmo numerico è stato scritto nel linguaggio Fortran 77, utilizzando la sola procedura esterna della NAG per calcolare un' interpolazione.

I grafici del fronte di fase sono stati ottenuti con il programma GnuPlot 3.7 per Linux, quelli per le deformazioni con MatLab presso l'Istituto delle Applicazioni al Calcolo (C.N.R.), Roma.

Le simulazioni numeriche sono state realizzate su un personal computer Pentium III 600 Mhz, sul quale è installato il sistema operativo Linux, impiegando il seguente tempo di cpu: 64h 55min 59sec.

64h 55min 59sec.

## Riferimenti bibliografici

- [Ang] F.ANGOTTI, A.BORRI, *Lezioni di scienza delle costruzioni*, Dipartimento di ingegneria meccanica, Università di Perugia, (1997).
- [Apo] T.M.APOSTOL, *Calolo Volume III, Analisi II*, Bollati Borlinghieri.
- [Bal] F.BALDONI, *thermomechanics of Solidification*, Pittsburg Univ. Press, (1997)
- [Bat] G.K.BATCHELOR, *An introduction to fluid dynamics*, Cambridge University Press, (1977).

- [Ber] G.BERNARDINI, *Fisica Generale, Parte I*, Editrice Veschi, (1987).
- [Bre] A.D.BRENT, V.R.VOLLER AND K.J.REID, *Enthalpy-porosity technique for modeling convection-diffusion phase change: application to the melting of a pure metal*, Num. Heat Transfer **13**, (1988).
- [Brt] O.BERTRAND, B.BINET, H.COMBEAU, S.COUTURIER, D.GOBIN, M.LACROIX, P.LE QUÉRÉ, M.MÉDALE, J.MERCINGER, H.SADAT, G.VIEIRA, *Melting driven by natural convection. A comparison exercise: first result*, International Journal of Thermodynamic Sciences **31**, (1999), 5-26.
- [But] F.N.FRITSCH, J.BUTLAND, *A method for constructing local monotone piecewise cubic interpolants*, SIAM J.Sci.Stat.Comput., **5**, (1984).
- [Cer] M.M.CERIMELE, D.MANSUTTI, F.PISTELLA, *Numerical modeling of liquid/solid phase transition. Analysis of a gallium melting test*, Computers & Fluids **31**, (2002), 437-451.
- [Cho] A.J.CHORIN, J.E.MARSDEN, *A Mathematical introduction to Fluid Mechanics*, Springer-Verlag (1993).
- [Cou] R.COURANT, D.HILBERT, *Methods of Mathematical Physics*, (1953).
- [Cra] J.CRANK, *Free and moving boundary problems*, Oxford Science Publication, (1984).
- [Dan] J.DANTZIG, *Modelling liquid-solid phase change with melt convection*, Int. J. Num. Methods in Eng **28**, (1989).
- [Dra] P.G.DRAZIN, W.H.REID, *Hydrodynamic stability*, Cambridge University Press, (1981).
- [Far] S.J.FARLOW, *Partial differential equations for scientist and engineers*, John WilleY & Sons, (1982).

- [Fas] A.FASANO, S.MARMI, *Meccanica analitica*, Bollati Borlinghieri, (1994).
- [Fix] G.FIX, *Phase field model for free boundary problems*, in Free Boundary Problems:Theory and applications, eds. A. Fasano and M.Primicerio, Pitman Research Notes in Mathematics (1983).
- [Fri] F.N. FRITSCH, *PCHIP Final Specifications*, Lawrence Livermore National Laboratory report UCID-30194, (1982).
- [Gau] C.GAU, R.VISKANTA, *Melting and solidification of a pure metal on a vertical wall*, Transaction of the ASME, (1986).
- [Gon] P.GONDI, R.MONTANARI, E.EVANGELISTA AND G.BURONI, *X-ray study of structures in liquid metals with controlled convective motions*, Microgravity Quarterly **vol.7 no.4**, (1997).
- [Hir] G.J.HIRASAKI, J.D.HELLUMS, *Boundary Conditions on the vector and scalar potentials in viscous three-dimensional Hydrodynamics*, Quarterly of applied mathematics **Vol.XXVIII, No.2**, (1970).
- [Hel] G.J.HIRASAKI, J.D.HELLUMS, *A general formulation of the boundary conditions on the vector potential in three-dimensional hydrodynamics*, Quarterly of applied mathematics **Vol.XXVI, No.3**, (1968).
- [Hun] S.C.HUNTER, *Mechanics of continuous media*, Ellis Horwood, (1976).
- [Hup] H.E.HUPPER, *The fluid mechanics of solidification*, J.Fluid Mech. **212**, (1990).
- [Lac] M.LACROIX,V.R.VOLLER, *Finite-differences solution phase change problems*, Num. Heat Transfer Part.B **17** (1990).
- [Man] D.MANSUTTI, F.BALDONI, K.R.RAJAGOPAL, *On the influence of deformation of the forming solid in the solidification of a semi-infinite water layer of fluid*, Mathematical models & methods in applied sciences **10**, (2000).

- [Nal] M.NALLASAMY, *Numerical solution of the separating flow due to an obstruction*, Computer & Fluids **Vol.14 No.1**, (1986).
- [Qua] L.QUARTAPELLE, *Numerical solution of the incompressible Navier-Stokes equations*, Birkhäuser Verlag, (1993).
- [Qrt] A.QUARTERONI, *Modellistica numerica per problemi differenziali*, Springer, (1997)
- [Qr2] A.QUARTERONI, *Elementi di calcolo numerico*, Progetto Leonardo, (1997).
- [Rad] A.RADY AND A.K.MOHANTY, *Natural convection during melting and solidification of pure metals in a cavity*, Num. Heat Transfer Part A **29**, (1996)
- [Raj] I.J.RAO AND K.R.RAJAGOPAL, *Phenomenological modelling of polymer crystallization using the notion on multiple natural configuration*, Interfaces Free Boundaries, (In Press).
- [Rao] I.J.RAO, *Modeling of crystallization in polymers*, Thesis in department of Mechanical Engineering, A&M University, Texas, USA, (1999).
- [San] R.SANTI, *Metodo front-fixing per la soluzione numerica di un processo di transizione di fase liquido/solido*, Università degli studi di RomaTre, Tesi di laurea in matematica A.A. 2001-2002
- [Ser] J.SERRIN, *Mathematical principles of classical fluid mechanics. Handbuck der Physik* Springer-Verlag, (1959).
- [Sla] J.SLATTERY, *Momentum, energy and mass transfer in continua*, McGraw-Hill, (1972).
- [Tem] R.TEMAM, *Navier-Stokes equations: theory and numerical analysis*, North-Holland Publishing Co., (1977).
- [Tut] O.R.TUTTY, *On Vector Potential-Vorticity Methods for Incompressible Flow Problems*, Journal of computational physics **64**, (1986).

- [Vis] R.VISWANATH, Y.JALURA, *A comparison of different solution of plane-front solidification with kinetic undercooling*, Num. Heat Transfer Part.B **24** (1993).
- [Zac] E.C.ZACHMANOGLOU AND DALE W.THOE, *Introduction to Partial Differential Equations with Applications*, Dover Publications, (1986)