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

Metodo front-fixing per la soluzione numerica di un modello globale per transizione di fase liquido/solido

Sintesi della Tesi di Laurea in Matematica di Riccardo Santi

Relatore: Prof. Daniela Mansutti

Introduzione

L'oggetto di questa tesi è uno studio, da un punto di vista modellistico e numerico, di processi di transizione di fase liquido/solido, cioè il passaggio di stato di un materiale da liquido a solido, e viceversa. Durante gli ultimi anni l'analisi di questo fenomeno fisico ha catturato l'attenzione di molti matematici, fisici, ingegneri e chimici, per i complessi aspetti della modellizzazione matematica e dello studio numerico, nonché per le importanti applicazioni nel campo dell'industria. Ad esempio nella produzione di alcune leghe metalliche e plastiche, importantissimi sono i processi di solidificazione e liquefazione: da essi dipendono infatti molte delle caratteristiche chimico-fisiche che possiede il prodotto finito.

I primi lavori sulla descrizione del cambiamento di fase si erano limitati a considerare la conduzione del calore come unico meccanismo del processo di transizione di fase. Invece nella maggior parte delle situazioni reali entrano in gioco altri meccanismi fisici. Gli effetti della convezione nel liquido possono apportare un contributo non trascurabile nel trasferimento dell'energia mentre le tensioni che compaiono nel solido in formazione possono drasticamente modificare la struttura e la forma del solido stesso e spesso influenzare le complesse dinamiche della solidificazione/liquefazione molto più della semplice conduzione di calore.

In particolare il modello matematico (equazioni differenziali con relative condizioni al contorno e condizioni iniziali) utilizzato in questo lavoro tiene conto del trasferimento del calore e della massa, dell'effetto della gravità e degli effetti di convezione e deformazione del materiale.

Le equazioni di Navier-Stokes sono utilizzate per descrivere la conservazione della massa e della quantità di moto nella fase liquida. Le equazioni di conservazione della massa e della quantità di moto per un solido linearmente elastico vengono adottate per la descrizione della fase solida. In entrambe le fasi vengono poi incluse le equazioni per il bilancio dell'energia.

Questo modello è stato già sperimentato nel caso monodimensionale della fusione di una lamina infinita di ghiaccio [Man]. In questa tesi la formulazione bidimensionale viene articolata nel dettaglio (Cap. 3) a partire dalle equazioni di conservazione per sistemi continui (Cap. 1) con superfici di discontinuità (Cap. 2). Nei capitoli 4 e 5 viene riportato lo studio numerico di un esperimento noto in letterartura, fusione di una lamina di gallio solido [Cer], che viene qui riprodotto anche in presenza di effetti termocapillari. Il problema è risolto mediante l'utilizzo di metodi alle differenze finite per la discretizzazione dell'operatore differenziale, rappresentante il sistema di equazioni e relative condizioni al contorno, e mediante la tecnica del front-fixing per il trattamento numerico del fronte di fase in movimento.

1 Equazioni di conservazione per sistemi continui

Illustariamo le equazioni che regolano la conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia per un sistema continuo, cioè per un sistema

in cui ognuna delle suddette quantità risulta continua rispetto alle coordinate spaziali e temporali.

1.1 Teorema del trasporto

 $Sia \ \varphi \ un \ funzione \ scalare, \ vettoriale \ o \ tensoriale \ dipendente \ dal \ tempo \ e \ dalla \ posizione. \ Allora$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{V} \varphi \ \mathrm{d}V = \int_{V} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \ \mathrm{d}V + \int_{S} \varphi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \ \mathrm{d}S$$

dove S indica la superficie che racchiude il volume V del corpo o di una porzione di esso.

1.2 Conservazione della massa

Introduciamo il postulato di conservazione della massa:

La massa di un corpo è indipendente dal tempo.

Il postulato della conservazione della massa si può allora scrivere così:

$$\dot{M} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{V} \rho \, \mathrm{d}V = 0 \tag{1.1}$$

Utilizzando il postulato di conservazione della massa (1.1) e applicando il teorema del trasporto, possiamo ottenere la conservazione della massa in forma differenziale che in coordinate euleriane può essere scritta

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho \mathbf{v}\right) = 0 \tag{1.2}$$

mentre in coordinate lagrangiane assume la forma

$$\rho J = \rho_0 \tag{1.3}$$

in cui J e lo jacobiano della trasformazione di coordinate.

1.3 Conservazione della quantità di moto

Per studiare la conservazione della quantità di moto abbiamo bisogno di introdurre un secondo postulato che prende il nome di legge di Eulero:

La derivata rispetto al tempo della quantità di moto di un corpo è uguale alla somma delle forze agenti sul corpo stesso.

In termini analitici possiamo esprimere la legge di Eulero come

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{V} \rho \,\mathbf{v} \,\mathrm{d}V = \int_{S} \mathbf{t} \,\mathrm{d}S + \int_{V} \rho \,\mathbf{f} \,\mathrm{d}V \tag{1.4}$$

dove $\mathbf{f} \equiv \mathbf{f_i} + \mathbf{f_e}$ è il campo delle forze interne ed esterne per unità di massa e \mathbf{t} è il vettore delle forze superficiali.

Applicando nuovamente il teorema del trasporto possiamo arrivare alla formulazione differenziale di questa legge:

$$\rho \frac{\mathrm{d}\mathbf{v}}{\mathrm{d}t} = \mathrm{div} \,\mathbf{T} + \rho \,\mathbf{f} \tag{1.5}$$

in cui T rappresenta il tensore degli sforzi.

Questa equazione differenziale è conosciuta come legge del moto di Cauchy o equazione di conservazione della quantità di moto in forma euleriana.

Naturalmente è possibile esprimere la (1.5) in forma lagrangiana:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = \operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \mathbf{F} \tag{1.6}$$

1.4 Postulato sul bilancio dell'energia

Ora introduciamo il postulato sul bilancio dell'energia:

La derivata rispetto al tempo dell'energia cinetica e dell'energia interna di un corpo è uguale alla potenza delle forze che agiscono sul corpo sommata alla rapidità di trasmissione di energia al corpo.

In termini analitici il postulato sul bilancio dell'energia afferma che

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{V} \rho \left(\varepsilon + \frac{1}{2} v^{2} \right) \mathrm{d}V =
= \int_{S} \mathbf{v} \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{n}) \, \mathrm{d}S + \int_{V} \rho \left(\mathbf{v} \cdot \mathbf{f} \right) \, \mathrm{d}V + \int_{S} h \, \mathrm{d}S + \int_{V} \rho \, Q \, \mathrm{d}V \quad (1.7)$$

Il primo termine sulla destra dell'equazione descrive la potenza delle tensioni superficiali.

Il secondo rappresenta invece la potenza delle forze che agiscono sul corpo. Il terzo indica invece la velocità di trasmissione dell'energia di contatto dalla

superficie al corpo (h indica la velocità di trasmissione dell'energia di con-

tatto per unità di superficie).

Il quarto infine indica la velocità di trasmissione dell'energia delle forze interne ed esterne al corpo (Q rappresenta la velocità di trasmissione dell'energia per unità di massa ed è detto $calore\ irradiato$).

La forma differenziale dell'equazione (1.7) in coordinate euleriane è data da

$$\rho \frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{div}\,\mathbf{q} + \mathrm{tr}\left(\mathbf{T}\cdot\nabla\mathbf{v}\right) + \rho\,Q\tag{1.8}$$

avendo posto $h = -\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$

E in coordinate lagrangiane:

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{Q} + \operatorname{tr} \left(\mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{V} \right) + \rho \, Q \tag{1.9}$$

1.5 Tensore degli sforzi per solidi linearmente elastici e fluidi newtoniani incomprimibili

Il tensore degli sforzi \mathbf{T}^S di un solido elastico lineare è descritto da una relazione che è la generalizzazione della legge di Hooke

$$T_{ij}^S = K_{ijhk} E_{hk}$$
 $i, j = 1, 2, 3$ (1.10)

in cui K_{ijhk} sono le componenti di un tensore del 4° ordine, detto tensore elasticità.

Essendo un tensore del 4° ordine le componenti K_{ijhk} di \mathcal{K} sono $3^4 = 81$. Se consideriamo però la simmetria di \mathbf{T}^S e la condizione di isotropia (la risposta del materiale è indipendente dalla direzione della solecitazione) le componenti efftttivamente distinte si riducono però a 2 ed esso assume la forma

$$\mathbf{T}^{S} = \lambda \left(\operatorname{tr} \mathbf{E} \right) \mathbf{I} + 2 \,\mu \,\mathbf{E} \tag{1.11}$$

dove

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} \left[(\nabla \mathbf{U}^S) + (\nabla \mathbf{U}^S)^T \right]$$
 (1.12)

è detto tensore di deformazione del sistema e $\mathbf{U}^{S}(\mathbf{R},t) = \mathbf{r}(\mathbf{R},t) - \mathbf{r}(\mathbf{R},0)$ rappresenta lo spostamento in cooordinate lagrangiane del solido dalla sua configurazione di riferimento C_0 .

Analogamente per i fluidi newtoniani incomprimibili vale la relazione

$$\mathbf{T}^F = -p\,\mathbf{I} + 2\,\hat{\mu}\,\mathbf{D} \tag{1.13}$$

in cui

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} \left[(\nabla \mathbf{v}^F) + (\nabla \mathbf{v}^F)^T \right]$$
 (1.14)

è detta $velocità di deformazione del sistema (<math>\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$) è la velocità euleriana).

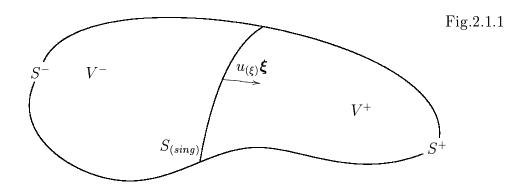
2 Equazioni di conservazione per sistemi continui multifase

Estendiamo le equazioni ottenute precedentemente per adattarle ad un continuo multifase, un sistema cioè in cui le quantità fisiche (densità, velocità, temperatura, ecc.) sono continue all'interno di ciascuna fase e subiscono una discontinuità sulle superfici che separano una fase da quella adiacente.

2.1 Teorema del trasporto per regioni contenenti superfici di singolarità

Nel nostro lavoro consideriamo l'interfaccia di fase come una superficie singolare, cioè una superficie discontinua rispetto a una o più quantità come la densità o la velocità. L'interfaccia, in generale, non è materiale e la massa viene trasferita attraverso essa. Dunque al variare dello stato del corpo e al conseguente trasferimento di massa (ad esempio ghiaccio che si scioglie e diventa acqua, un metallo che si solidifica, ecc.), la superficie di discontinuità si muove attraverso esso.

Generalizziamo allora il teorema del trasporto per applicarlo alle regioni di spazio attraverso le quali si sta muovendo l'interfaccia. Supponiamo che il nostro corpo sia diviso da una superficie singolare rispetto ad una quantità φ e rispetto alla velocità \mathbf{v} , e che essa sia in moto attraverso il sistema con una velocità di spostamento $u_{(\xi)}$ (Fig. 2.1.1). Con "velocità di spostamento" intendiamo la componente normale della velocità dei punti della superficie.



Riferendoci alla Figura 2.1.1, denotiamo con $\boldsymbol{\xi}$ il vettore unitario normale a $S_{(sing)}$ e diretto dalla regione V^- alla regione V^+ .

Indichiamo con φ^+ e φ^- i limiti di una funzione φ quando un punto \mathbf{z} tende ad un punto $\mathbf{z_0}$ appartenente a $S_{(sing)}$ rimanendo rispettivamente nella regione V^+ o V^- e cioè

$$\varphi^+ \equiv \lim_{\mathbf{z} \to \mathbf{z_0}^+} \varphi \tag{2.1}$$

$$\varphi^{-} \equiv \lim_{\mathbf{z} \to \mathbf{z}_{0}^{-}} \varphi \tag{2.2}$$

Il teorema del trasporto per regioni contenenti superfici di singolarità può essere scritto come:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{V} \varphi \, \mathrm{d}V = \int_{V} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \, \mathrm{d}V + \int_{S} \varphi \, \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, \mathrm{d}S - \int_{S_{(sinq)}} [\varphi] u_{(\xi)} \, \mathrm{d}S \tag{2.3}$$

dove le parentesi quadre indicano il salto compiuto dalla quantità racchiusa in esse nell'attraversare la superficie:

$$[\varphi] \equiv \varphi^+ - \varphi^- \tag{2.4}$$

2.2 Equazioni di conservazione su un'interfaccia di fase

Applicando il teorema del trasporto per superfici singolari alle equazioni di conservazione otteniamo una formulazione delle stesse equazioni che è valida su una superficie di singolarità. Si ha

$$\left[\rho\left(\mathbf{v}\cdot\boldsymbol{\xi}-u_{(\xi)}\right)\right]=0\tag{2.5}$$

per la conservazione della massa,

$$[\rho \mathbf{v}(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} - u_{(\xi)})] - [\mathbf{T} \cdot \boldsymbol{\xi}] = 0$$
(2.6)

per la conservazione della quantità di moto e

$$\left[\rho\left(\varepsilon + \frac{1}{2}v^2\right)\left(\mathbf{v}\cdot\boldsymbol{\xi} - u_{(\xi)}\right)\right] + \left[\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}\cdot(\mathbf{T}\cdot\boldsymbol{\xi})\right] = 0$$
 (2.7)

per la conservazione dell'energia.

In realtà può accadere che l'equazione (2.6) non sia soddisfatta e a secondo membro compaia una quantità non nulla che rende conto degli effetti di tensione superficiale (i.e. la quantità di energia necessaria per incrementare di una unità l'estensione dela superficie di un liquido a volume costante) tra le due fasi dell'interfaccia, cioè:

$$[\rho \mathbf{v}(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} - u_{(\xi)})] - [\mathbf{T} \cdot \boldsymbol{\xi}] = \sigma \mathsf{K} \boldsymbol{\xi}$$
(2.8)

in cui σ è il coefficiente di tensione superficiale e K la curvatura principale dell'interfaccia.

3 Equazioni per la descrizione di transizioni di fase liquido/solido

Descriviamo ora le equazioni che regolano il processo di transizione di fase liquido-solido in un dominio che supponiamo bidimensionale. Riportiamo l'esempio di un sitstema continuo bifase (possiamo sempre far riferimento alla figura 2.1.1) in cui una parte del materiale sia in fase liquida e l'altra in fase solida. Rappresentiamo rispettivamente la prima come un fluido viscoso newtoniano incomprimibile e la seconda con un solido elastico lineare isotropo, e riscriviamo le equazioni differenziali descritte nelle sezioni 1 e 2 adattandole a questo particolare contesto. Questo modello è stato già adottato in letteratura [Man] per lo studio della fusione di una lamina infinita di ghiaccio (caso unidimensionale).

3.1 Equazioni per la fase solida

Innanzitutto conviene nello studio del solido, addottare una descrizione di tipo lagrangiano. Infatti una delle quantità di principale interesse è lo spostamento \mathbf{U} del solido dalla propria configurazione di riferimento C_0 .

Consideriamo l'equazione di **conservazione della massa** in forma lagrangiana, e per il solido possiamo scrivere

$$\rho^S J = \rho_0^S \tag{I}$$

Richiamiamo ora invece la conservazione della quantità di moto

$$\rho^S \frac{\partial \mathbf{V}^S}{\partial t} = \operatorname{div} \mathbf{T}^S + \rho^S \mathbf{F}^S$$
(3.1)

La (3.6) è un equazione vettoriale che componente per componente può essere riscritta come

$$\rho^{S} \frac{\partial^{2} U_{1}^{S}}{\partial t^{2}} = (\lambda + \mu) \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial U_{1}^{S}}{\partial X} + \frac{\partial U_{2}^{S}}{\partial Y} \right) + \mu \left(\frac{\partial^{2} U_{1}^{S}}{\partial X^{2}} + \frac{\partial^{2} U_{1}^{S}}{\partial Y^{2}} \right) + \rho^{S} F_{X}^{S}$$
 (II)

$$\rho^{S} \frac{\partial^{2} U_{2}^{S}}{\partial t^{2}} = (\lambda + \mu) \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\partial U_{1}^{S}}{\partial X} + \frac{\partial u_{2}^{S}}{\partial Y} \right) + \mu \left(\frac{\partial^{2} U_{2}^{S}}{\partial X^{2}} + \frac{\partial^{2} U_{2}^{S}}{\partial Y^{2}} \right) + \rho^{S} F_{Y}^{S}$$
 (III)

dove F_X e F_Y sono le forze per unità di massa che agiscono rispettivamente lungo l'asse X e lungo l'asse Y.

Occupiamoci invece adesso del **bilancio dell'energia**. Eravamo giunti alla seguente espressione che descrive la conservazione dell'energia interna in forma differenziale:

$$\rho^{S} \frac{\partial \varepsilon^{S}}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{Q}^{S} + \operatorname{tr} \left(\mathbf{T}^{S} \cdot \nabla \mathbf{V}^{S} \right) + \rho^{S} Q^{S}$$
(3.2)

Ora sperimentalmente si può osservare (ed è questa la legge nota con il nome di legge di Fourier sul flusso di calore) che il flusso di calore uscente da una sezione del corpo è proporzionale al gradiente della temperatura e cioè che $\mathbf{Q} = -k \nabla \theta$.

Inoltre possiamo approssimare $\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}$ con $c_p^S \frac{\partial \theta}{\partial t}$ dove c_p^S rappresenta il calore specifico del mezzo cioè la quantità di calore necessaria per aumentare di 1°C un'unità di massa.

La (3.2) può essere allora riscritta nnel seguente modo:

$$\rho^{S} c_{p}^{S} \frac{\partial \theta^{S}}{\partial t} = k^{S} \Delta \theta^{S} + \operatorname{tr} \left(\mathbf{T}^{S} \cdot \nabla \left(\frac{\partial \mathbf{U}^{S}}{\partial t} \right) \right) + \rho^{S} Q^{S}$$
 (IV)

Abbiamo quindi ottenuto un sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali (relazioni I-IV) nelle quattro incognite ρ^S, U_1^S, U_2^S e θ^S che costituisce appunto il modello per un solido elastico lineare isotropo.

3.2 Equazioni per la fase liquida

Al contrario del solido, nel caso del fluido è preferibile utilizzare una descrizione di tipo euleriano in quanto ciò che più ci interessa è il campo delle velocità nella configurazione corrente.

Essendo il fluido incomprimibile l'**equazione di conservazione della mas**sa si riduce a

$$\frac{\partial v_1^F}{\partial x} + \frac{\partial v_2^F}{\partial y} = 0 \tag{V}$$

Ora prendendo ancora in considerazione la (3.11) riscriviamo la **conserva**zione dell'quantità di moto per un fluido incomprimibile:

$$\rho^F \frac{\mathrm{d}\mathbf{v}^F}{\mathrm{d}t} = -\nabla p^F + \hat{\mu}\Delta \mathbf{v}^F + \rho^F \mathbf{f}^F$$
(3.3)

Anche la (3.19) è un equazione vettoriale che può essere riscritta per componenti

$$\rho^F \frac{\mathrm{d}v_1^F}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial p^F}{\partial x} + \hat{\mu} \left(\frac{\partial^2 v_1^F}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_1^F}{\partial y^2} \right) + \rho^F f_x^F \tag{VI}$$

$$\rho^F \frac{\mathrm{d}v_2^F}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial p^F}{\partial y} + \hat{\mu} \left(\frac{\partial^2 v_2^F}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_2^F}{\partial y^2} \right) + \rho^F f_y^F \tag{VII}$$

Occupiamoci anche per il fluido del **bilancio dell'energia**. Come per il solido approssimiamo $\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}t}$ con $c_p^F \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t}$ e poniamo $\mathbf{q} = -k \nabla \theta$.

Inotre notando che

$$\operatorname{tr}\left(\mathbf{T}^{F} \cdot \nabla \mathbf{v}^{F}\right) = \hat{\mu} \operatorname{tr}\left(\mathbf{D} \cdot \mathbf{D}\right) \tag{3.4}$$

otteniamo

$$\rho^F c_p^F \frac{\mathrm{d}\theta^F}{\mathrm{d}t} = k^F \Delta \theta^F + \hat{\mu} \operatorname{tr} (\mathbf{D} \cdot \mathbf{D}) + \rho Q^F$$
 (VIII)

Siamo giunti quindi ad un altro sistema di quattro equazioni differenziali (V-VIII) nelle quattro incognite ρ^F , v_1^F , v_2^F e θ^F , sistema che modellizza appunto un fluido newtoniano incomprimible.

3.3 Condizioni di salto

Dopo aver definito i sistemi di equazioni che modellizzano il solido e il fluido ci occupiamo ora di definire le equazioni che che regolano le discontinuità che le variabili del continuo multifase presentano nelle regioni dello spazio in cui sia presente una interfaccia di fase.

Chiamiamo $\Gamma = \Gamma(t)$ la curva di discontinuità che separa la regioni \mathscr{D}^F e \mathscr{D}^S contenenti rispettivamente la parte liquida e la parte solida del mezzo multifase. Riscriviamo allora la **conservazione della massa**

$$\rho^{S} \left(\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}}{\mathrm{d}t}^{S} \cdot \boldsymbol{\xi} - u_{(\xi)} \right) - \rho^{F} \left(\mathbf{v}^{F} \cdot \boldsymbol{\xi} - u_{(\xi)} \right) = 0$$
 (IX)

quella del momento lineare

$$\rho^{S} \left(\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}^{S}}{\mathrm{d}t} \cdot \boldsymbol{\xi} - u_{(\xi)} \right) \mathbf{v}^{S} - \rho^{F} \left(\mathbf{v}^{F} \cdot \boldsymbol{\xi} - u_{(\xi)} \right) \mathbf{v}^{F} -$$

$$\mathbf{T}^S \cdot \boldsymbol{\xi} + \mathbf{T}^F \cdot \boldsymbol{\xi} = \sigma \,\mathsf{K} \,\boldsymbol{\xi} \quad (\mathrm{X},\mathrm{XI})$$

e infine quella dell'energia

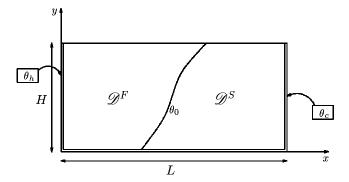
$$\rho^S \left(c_p^S \ \theta + \frac{1}{2} \left| \frac{\mathrm{d} \mathbf{u}^S}{\mathrm{d} t} \right|^2 \right) \left(\frac{\mathrm{d} \mathbf{u}^S}{\mathrm{d} t} \cdot \boldsymbol{\xi} - u_{(\xi)} \right) - k^S \nabla \theta^S \cdot \boldsymbol{\xi} - \frac{\mathrm{d} \mathbf{u}^S}{\mathrm{d} t} \cdot (\mathbf{T}^S \cdot \boldsymbol{\xi}) -$$

$$\rho^F \left(c_p^F \, \theta + \frac{1}{2} \, |\mathbf{v}^F|^2 \right) \left(\mathbf{v}^F \cdot \boldsymbol{\xi} - u_{(\boldsymbol{\xi})} \right) + k^F \, \nabla \, \theta^F \cdot \boldsymbol{\xi} + \mathbf{v}^F \cdot (\mathbf{T}^F \cdot \boldsymbol{\xi}) = 0 \quad (XII)$$

Abbiamo ottenuto ancora quattro equazioni differenziali che descrivono il comportamento delle quantità $\rho, \mathbf{u}, \mathbf{v}$ e θ nell'interno dell'interfaccia di fase Γ .

3.4 Equazioni ridotte

La descrizione matematico-numerica di un processo di transizione di fase L/S secondo l'approccio qui seguito, richiederebbe la soluzione delle otto equazioni differenziali non lineari (I)-(VIII) soggette alle quattro condizioni di salto (IX)-(XII). Vista la grande difficoltà di questo obiettivo, il modello descritto viene proposto sotto ipotesi semplificative nel seguito discusse. Supponiamo di descrivere la fusione (o solidificazione) di una lamina rettangolare di altezza H e di lunghezza L di materiale in parte liquido e in parte solido confinata in una cavità.



La liquefazione (solidificazione) è indotta attraverso l'applicazione alle pareti laterali di una termocoppia le cui temperature θ_h e θ_c sono rispettivamente di poco maggiore e di poco minore della temperatura di cambiamento di fase θ_0 che naturalmente il materiale ha sull'interfaccia. Nel nostro esperimento, per effetto del cambiamemento di stato, supponiamo che il materiale, nel passaggio da solido a liquido (o viceversa), vari di "poco" la propria densità, che dipende solamente dalla temperatura, data la sostanziale omogeneità del materiale stesso. Attraverso queste considerazioni possiamo modificare le equazione della precedente sezione con l'approssimazione di Boussinesq (Hp1) [Dra]. La base di questa approssimazione consiste nel considerare all'interno del mezzo variazioni di temperature "piccole", tanto che le conseguenti variazioni di densità siano trascurabili ovunque a eccezione del termine in cui è presente la spinta di galleggiamento (i.e. l'ultimo termine delle eqiazioni (III) e (VII)). dove la densità ρ è moltipilcata per l'accelerazione di gravità g, il cui ordine di grandezza è molto maggiore rispetto alle altre quantità

presenti nelle equazioni. Possiamo quindi scrivere per questo termine

$$\rho = \rho_0 \{ 1 - \alpha(\theta - \theta_0) \} \tag{3.5}$$

in cui α è una costante specifica del materiale detta coefficiente di espansione volumetrica.

Supponiamo ancora che non si possa verificare dissipazione di energia per irragiamento né passaggio di materiale attraverso le pareti (Hp2).

Consideriamo inoltre la tensione superficiale σ sull'interfaccia di fase uguale a zero e che sul solido e sul liquido agisca soltanto la forza di gravità (Hp3). Imponiamo la condizione di non-scivolamento (no-slip) e cioè che su Γ le velocità tangenziali del solido e del liquido siano uguali (Hp4).

Inoltre supponiamo i coefficienti λ , μ e $\hat{\mu}$ costanti anziché dipendenti dalla temperatura (Hp5).

Infine (Hp6) consideriamo che il solido sia, nel momento in cui si forma, privo di tensioni (stress-free), nella sua configurazione di riferimento, e che inoltre le successive deformazioni siano "piccole".

Assumendo (Hp1) e (Hp6) l'equazione (I) si riduce a

$$\operatorname{div} \mathbf{U}^S = 0 \tag{i}$$

mentre considerando sempre (Hp1) e (Hp3) la (II) e la (III) diventano

$$\rho_0 \frac{\partial^2 U_1^S}{\partial t^2} = (\lambda + \mu) \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial U_1^S}{\partial X} + \frac{\partial U_2^S}{\partial Y} \right) + \mu \left(\frac{\partial^2 U_1^S}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U_1^S}{\partial Y^2} \right)$$
 (ii)

$$\rho_0 \frac{\partial^2 U_2^S}{\partial t^2} = (\lambda + \mu) \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\partial U_1^S}{\partial X} + \frac{\partial U_2^S}{\partial Y} \right) + \mu \left(\frac{\partial^2 U_2^S}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U_2^S}{\partial Y^2} \right) - \rho_0 \{ 1 - \alpha (\theta^S - \theta_0) \} g \quad \text{(iii)}$$

dove g rappresenta l'accelerazione di gravità che naturalmente agisce solo lungo l'asse Y. Cerchiamo ora di riscrivere l'equazione (IV).

Nel nostro caso per (Hp2) possiamo assumere Q^S uguale a zero mentre per piccole deformazioni (Hp6) possiamo trascuare tr $(\mathbf{T}^S \cdot \nabla \mathbf{v}^S)$. L'equazione (IV) si riduce quindi a

$$\rho_0 c_p^S \frac{\partial \theta^S}{\partial t} = k^S \Delta \theta^S \tag{iv}$$

La relazione (V) rimane invece immutata e cioè

$$\frac{\partial v_1^F}{\partial x} + \frac{\partial v_2^F}{\partial y} = 0 \tag{v}$$

Come per la (ii) e la (iii) consideriamo il contributo dato dalla forza di gravità e riscriviamo la (VI) e la (VII) come

$$\rho_0 \frac{\mathrm{d}v_1^F}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial p}{\partial x} + \hat{\mu} \left(\frac{\partial^2 v_1^F}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_1^F}{\partial y^2} \right) \tag{vi}$$

$$\rho_0 \frac{\mathrm{d}v_2^F}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial p}{\partial y} + \hat{\mu} \left(\frac{\partial^2 v_2^F}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_2^F}{\partial y^2} \right) - \rho_0 \{ 1 - \hat{\alpha} (\theta^F - \theta_0) \} g \qquad \text{(vii)}$$

Riscriviamo anche la (VIII) ponendo ancora Q^F uguale a zero e ottenendo

$$\rho_0 c_p^F \frac{\mathrm{d}\theta^F}{\mathrm{d}t} = \hat{\mu} \left[\left(\frac{\partial v_1^F}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_1^F}{\partial y} + \frac{\partial v_2^F}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_2^F}{\partial y} \right)^2 \right] + k^F \Delta \theta^F \quad \text{(viii)}$$

Occupiamoci ora delle condizioni di salto. Dalla condizione (IX) e da (Hp1) si ha che

$$\mathbf{v}^S \cdot \boldsymbol{\xi} = \mathbf{v}^F \cdot \boldsymbol{\xi} \tag{ix}$$

Dall'equazione precedente e da (Hp4) otteniamo che $\mathbf{v}^S = \mathbf{v}^F$ su Γ (\star). Alla luce di quest'ultimo risultato e da (Hp1) e (Hp3) le equazione (X) e (XI) si semplificano notevolmente:

$$\mathbf{T}^S \cdot \boldsymbol{\xi} = \mathbf{T}^F \cdot \boldsymbol{\xi} \tag{x,xi}$$

Infine occupiamoci del bilancio energetico. Per far ciò introduciamo la quantità \mathcal{L} ovvero *il calore latente*. Perché si verifichi un cambiamento di fase, il sistema (solido-liquido-interfaccia) deve ricevere o cedere calore all'esterno. Questo calore (positivo o negativo) viene immagazzinato sotto forma di

energia interna che viene poi utilizzata per operare trasferimento di massa e variazioni di volume tra il dominio solido e il dominio liquido. Se vogliamo che il cambiamento di fase avvenga a pressione e temperatura costanti, il calore da fornire per unità di massa (calore latente) deve proprio uguagliare la differenza di energia interna tra la fase liquida e la fase solida per unità di massa.

Questa considerazione unita ad (Hp1) ed a (\star) ci permette di ridurre dunque la (XII) a

$$-\rho_0^S \mathcal{L}\left(\mathbf{v}^F \cdot \boldsymbol{\xi} - u_{(\xi)}\right) - k^S \nabla \theta^S \cdot \boldsymbol{\xi} + k^F \nabla \theta^F \cdot \boldsymbol{\xi} = 0 \tag{xii}$$

Dall'equazione (xii) possiamo ricavare un'altra condizione che riguarda la transizione di fase. Se infatti consideriamo il problema dal solo punto di vista della conduzione tralasciando la convezione ($\mathbf{v}^F = \mathbf{v}^S = 0$) otteniamo

$$\rho_0^S \mathcal{L} u_{(\xi)} = k^S \frac{\partial \theta^S}{\partial \boldsymbol{\xi}} - k^F \frac{\partial \theta^F}{\partial \boldsymbol{\xi}}.$$
 (St)

Questa equazione che prende il nome di condizione di Stefan ci dice come si sta muovendo il fronte di fase e ci fornisce di conseguenza l'equazione della curva Γ .

4 Modello matematico-numerico per un esperimento di fusione

Occupiamoci ora della simulazione numerica di un esperimento di fusione di una lamina di gallio solido che è riconosciuto in letteratura come "benchmark" per modelli matematico-numerici di transizione di fase liquido-solido [Brt]. Si tratta della prima fase di sperimentazione numerica delle equazioni (I)-(XII), per cui introduciamo l'ulteriore ipotesi semplificativa che la fase solida sia indeformabile.

4.1 Condizioni al contorno e condizioni iniziali

Il comportamento viscoso delle particelle di fluido adiacenti le pareti solide unito all'impenetrbilità delle pareti stesse, si può tradurre nella condizione $\mathbf{v}^F = \mathbf{0}$, che da luogo alle seguenti condizioni al contorno:

$$\mathbf{v}^{F}(x,0,t) = \mathbf{0} \qquad \forall x \in [0, f(0,t)]$$

$$\mathbf{v}^{F}(x,H,t) = \mathbf{0} \qquad \forall x \in [0, f(H,t)]$$

$$\mathbf{v}^{F}(0,y,t) = \mathbf{0} \qquad \forall y \in [0,H]$$

$$\mathbf{v}^{F}(f(y,t),y,t) = \mathbf{0} \qquad \forall y \in [0,H]$$

dove f(y, t) rappresenta per ogni y la posizione del fronte di fase.

Come già detto altrove, supponiamo che alle pareti verticali della cavità sia applicata una termocoppia che mantiene il materiale a temperatura costante; inoltre supponiamo le pareti orizzontali termicamente isolate. Questo si traduce nelle seguenti condizioni:

$$\theta^{F}(0, y, t) = \theta_{h} \qquad \forall y \in [0, H]$$

$$\frac{\partial \theta^{F}}{\partial y}(x, H, t) = 0 \qquad \forall x \in [0, f(H, t)]$$

$$\frac{\partial \theta^{F}}{\partial y}(x, 0, t) = 0 \qquad \forall x \in [0, f(0, t)]$$

cui si aggiunge la condizione sull'interfaccia di fase dove sappiamo che la temperatura del liquido è quella propria del cambiamento di fase:

$$\theta^F(f(y,t),y,t) = \theta_0 \qquad \forall y \in [0,H]$$

Analogamente, per la fase solida, le condizioni al contorno risultano:

$$\theta^{S}(L, y, t) = \theta_{c} \qquad \forall y \in [0, H]$$

$$\frac{\partial \theta^{S}}{\partial y}(x, H, t) = 0 \qquad \forall x \in [f(H, t), L]$$

$$\frac{\partial \theta^{S}}{\partial y}(x, 0, t) = 0 \qquad \forall x \in [f(0, t), L]$$

$$\theta^{S}(f(y, t), y, t) = \theta_{0} \qquad \forall y \in [0, H]$$

Al fine di innescare la simulazione numerica del processo di fusione supponiamo che in t=0 una sottile striscia di gallio sia già fusa e che quindi il fronte di fase Γ sia una linea verticale, $x=\ell(0)\neq 0$. Consideriamo inoltre il liquido fermo ed una distribuzione lineare delle termperature sia nella fase liquida che in quella solida. Le condizioni iniziali sono quindi le seguenti:

$$\mathbf{v}(x, y, 0) = 0 \qquad \forall x, y \in \mathscr{D}^F$$

$$\theta^F(x, y, 0) = \theta_h + \frac{(\theta_0 - \theta_h)}{\ell(0)} x$$
 $\forall x, y \in \mathscr{D}^F$

$$\theta^{S}(x,y,0) = \frac{(x-L)\theta_0 + (\ell(0)-x)\theta_c}{\ell(0)-L} \quad \forall x,y \in \mathscr{D}^{S}$$

4.2 Funzione di corrente e vorticità

Nello studio dei flussi in due dimensioni, le equazioni di Navier-Stokes per fluidi incomprimibili possono essere utilmente formulate in una maniera alternativa, introducendo due nuove variabili scalari, la fuzione di corrente ψ (stream function) e la vorticità ζ (vorticity function), al posto della velocità \mathbf{v} e della pressione p [Bat]. Ponendo

$$v_1 = \frac{\partial \psi}{\partial y} \qquad v_2 = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$$
 (4.1)

e

$$\zeta = \frac{\partial v_2}{\partial x} - \frac{\partial v_1}{\partial y} \tag{4.2}$$

le equazioni che modellizzano la transizione di fase diventano:

$$\rho_0 \left[\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \zeta \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial x} \zeta \right) \right] = \hat{\mu} \, \Delta \zeta + \rho_0 \, \alpha \, g \, \frac{\partial \theta^F}{\partial x} \qquad (A_{\psi - \zeta})$$

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

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

$$\rho_0 c_p^S \frac{\partial \theta^S}{\partial t} = k^S \Delta \theta \qquad (C_{\psi - \zeta})$$

$$\zeta = -\Delta\psi \tag{D_{\psi-\zeta}}$$

$$\rho_0^S \mathcal{L} u_{(\xi)} = k^S \frac{\partial \theta^S}{\partial \boldsymbol{\xi}} - k^F \frac{\partial \theta^F}{\partial \boldsymbol{\xi}}$$
 (E_{\psi-\zeta})

4.3 Metodo front-fixing

Supponiamo che il fronte di fase sia rappresentabile, in ogni istante, tramite una funzione della variabile y, e cioè che il processo di fusione sia unidirezionale. In quesso caso possiamo descrivere il fronte con l'insieme $\Gamma:\{(x,y):x=f(y,t),y\in[0,H]\}$. È chiaro che ad ogni istante di tempo t avremo un fronte di fase diverso e conseguentemente diversi domini, \mathscr{D}^S e \mathscr{D}^F , della fase solida e della fase liquida. Questa interfaccia in movimento pone quindi alcuni problemi dal punto di vista del calcolo numerico. Infatti da un lato sarebbe molto difficile rappresentare "bene" tramite un reticolo spaziale discreto \mathscr{D}^S e \mathscr{D}^F nell'intorno dell'interfaccia di fase, e dall'altro dovremmo ad ogni passo temporale cambiare i domini e di conseguenza riaggiornare i reticoli. Per questo adottiamo dei cambiamenti di coordinate che fissino il fronte di fase (front-fixing), cioè che per ogni y portino l'intervallo [0, f(y, t)] e l'intervallo [f(y, t), L] nell'intervallo [0, 1] [Cra].

Nella fase liquida introduciamo:

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

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

$$(4.3)$$

e in quella solida:

$$\mathcal{T}_S: (x,y) \in \mathcal{D}^S \longmapsto (\xi,\eta) \in [0,1] \times [0,H]$$

$$\xi = \frac{x - f(y,t)}{L - f(y,t)} \qquad \eta = y$$
(4.4)

Tramite queste trasformazioni di coordinate, per ogni tempo t, sia \mathscr{D}^S che \mathscr{D}^F vengono associati al rettangolo $[0,1]\times[0,H]$.

4.4 Metodo alle differenze finite

Denotiamo con $g=g(\xi,\eta,t):[0,1]\times[0,H]\times\mathbb{R}^+\longrightarrow\mathbb{R}$ una funzione soluzione del sistema che modellizza il processo di transizione e definiamo con h la sua funzione approssimante.. Elenchiamo di seguito gli schemi alle differenze finite utilizzati per l'approssimazione del nostro problema alle derivate parziali. Le derivate temporali prime sono state approssimate con il $metodo\ di\ Eulero\ in\ avanti\ cio\ e$

$$\frac{\partial g}{\partial t}(\xi_i, \eta_j, t_n) \simeq \frac{h_{i,j}^{n+1} - h_{i,j}^n}{\Delta t} \tag{4.5}$$

mentre per le derivate spaziali sono state usate delle differenze centrate:

$$\frac{\partial g}{\partial \xi}(\xi_i, \eta_j, t_n) \simeq \frac{h_{i+1,j}^n - h_{i-1,j}^n}{2\Delta \xi}$$

$$\frac{\partial g}{\partial \eta}(\xi_i, \eta_j, t_n) \simeq \frac{h_{i,j+1}^n - h_{i,j-1}^n}{2\Delta \eta} \tag{4.6}$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \xi^2}(\xi_i, \eta_j, t_n) \simeq \frac{h_{i+1,j}^n - 2 h_{i,j}^n + h_{i-1,j}^n}{\Delta \xi^2}$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \eta^2}(\xi_i, \eta_j, t_n) \simeq \frac{h_{i,j+1}^n - 2 h_{i,j}^n + h_{i,j-1}^n}{\Delta \eta^2}$$
(4.7)

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \xi \partial \eta}(\xi_i, \eta_j, t_n) \simeq \frac{h_{i+1, j+1}^n - h_{i+1, j-1}^n - h_{i-1, j+1}^n + h_{i-1, j-1}^n}{4 \Delta \xi \Delta \eta}$$

Per l'aggiornamento dei bordi della griglia invece, non essendo possibile utilizzare differenze centrate, sono state usate delle differenze unilaterali:

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

$$\frac{\partial g}{\partial n}(\xi_i, \eta_j, t_n) \simeq \frac{-3 h_{i,j}^n + 4 h_{i,j+1}^n - h_{i,j+2}^n}{2\Delta n}$$
(4.8)

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

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \eta^2}(\xi_i, \eta_j, t_n) \simeq \frac{2 h_{i,j}^n - 5 h_{i,j+1}^n + 4 h_{i,j+2}^n - 2 h_{i,j+3}^n}{\Delta \eta^2}$$

L'analisi della stabilità, e quindi della convergenza, del metodo alle differenze qui utilizzato risulta particolarmente difficile a causa della complessità del problema differenziale affrontato che è non lineare, presenta parti paraboliche (conduzione di calore), parti iperboliche (convezione) e parti ellittiche. Il calcolo della relazione esatta tra il passo temporale Δt ed i passi spaziali $\Delta \xi$ e $\Delta \eta$ che assicura stabilità (per il termine iperbolico sussiste ad esempio la condizione C.F.L. e analogamente per l'operatore parabolico discretizzato è nota la condizione sufficiente di stabilità [Qua]) è stato sommariamente sviluppato in [Cer] .

5 Sperimentazione numerica

5.1 Fusione di una lamina di gallio completamente confinata

La lamina di gallio è di forma rettangolare ed è confinata all'interno di una cavità rigida le cui dimensioni sono 8.89 $cm \times 6.35$ cm e le cui pareti orizzontali sono adiabatiche. Inizialmente è mantenuta ad una temperatura prossima a quella di fusione che risulta essere $\theta_0=302.94^\circ K$. La parete sinistra è mantenuta a temperatura $\theta_h=311.16^\circ K$ mentre quella destra è mantenuta a temperatura $\theta_c=301.16^\circ K$ in modo tale da indurre il processo di fusione della lamina. Gli altri parametri fisici inerenti all'esperimento sono i seguenti: il calore latente di fusione $\mathcal{L}=80160\ J\cdot kg^{-1}$, il coefficiente termico di espansione volumetrica $\hat{\alpha}=1.2\times 10^{-4}\ K^{-1}$ e la viscosità dinamica della fase liquida $\hat{\mu}=1.81\times 10^{-3}\ kg\cdot m^{-1}\cdot s^{-1}$. Inoltre il valore della densità, della conducibilità termica e del calore specifico sono assunte costanti per tutto il provino: $\rho^F=\rho^S=\rho_0=6093\ kg\cdot m^{-3},\ k^F=k^S=32\ W\cdot m^{-1}$ e $c_p^F=c_p^S=381.5\ J\cdot kg^{-1}\cdot K^{-1}$. Questi ultimi sono valori rilevati a 305.16° K

che è approsimativamente la tempertura media dell'esperimento.

Per innescare la simulazione numerica del processo di fusione abbiamo dovuto fissare innanazitutto la dimensione $\ell(0)$ della parte di gallio che supponiamo già liquefatta al tempo t=0. La scelta attuata è stata $\ell(0)=10^{-3}~cm$, lo spessore minimo per cui siamo stati in grado di simulare il flusso nella fase liquida. I risultati che presentiamo qui sono stati ottenuti con una griglia spaziale 61×11 ed un passo temporale $\Delta t = 10^{-6}s$. Per operare questa scelta abbiamo sviluppato un test di confronto con la letteratura assicurandoci di scegliere le griglie per riottenere le soluzioni numeriche presenti in [Brt], [Cer].

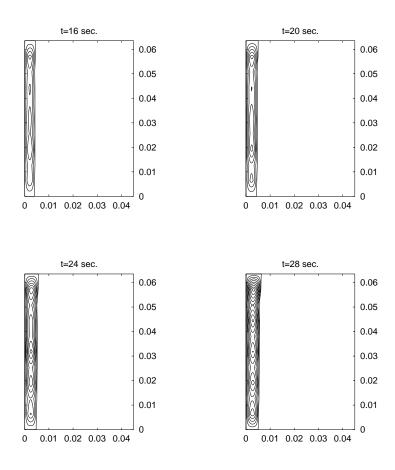
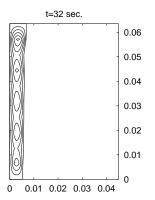
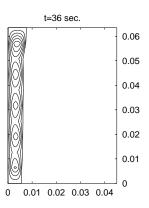
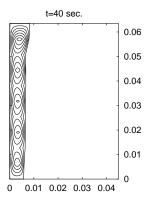
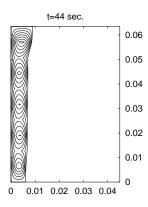


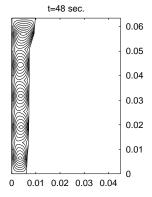
Figura 5.5.1.a: Evoluzione delle linee di corrente nel liquido

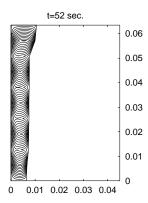












XXIII

Si osserva inizialmente ($t=16\,sec.$) nella fase liquida la formazione di quattro celle di convezione; successivamente se ne impone una quinta ($t=28\,sec.$) che permane fino all'ultimo istante di osservazione ($t=52\,sec.$). Nel tempo si nota inoltre l'avanzamento del fronte di fusione.

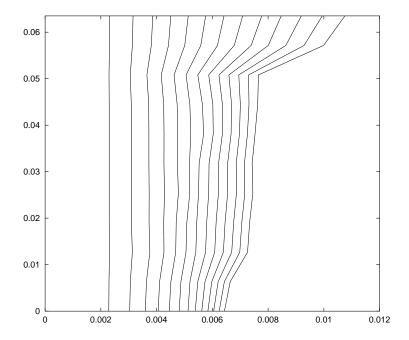


Figura 5.5.1.b: Evoluzione del fronte di fase nei tempi di osservazione

Come abbaimo detto in precedenza i moti convettivi influenzano il campo delle temperature. In particolare fanno sì che le derivate della temperatura del liquido θ^F sul fronte di fase siano maggiori nella parte superiore della lamina e minori in quella inferiore. Tenendo presente la condizione di Stefan (St) risulta allora naturale che il fronte avanzi con velocità più elevata in alto e meno elevata in basso.

6 Fusione di una lamina di gallio a contatto con aria

6.1 Termocapillarità

Supponiamo ora di aprire superiormente la cavità nella quale è contenuta la lamina di gallio. Il il bordo superiore della fase liquida è una superficie libera che supponiamo resti piatta (per semplicità) Al di sopra della superficie supponiamo vi sia invece un gas di viscosità e conducibilità termica tali che che non influenzino i flussi e il campo delle temperature del liquido.

Si ha la seguente condizione al contorno per y=H dovuta al fenomeno della termocapillarità.

$$-\gamma \,\sigma_0 \,\frac{\partial \theta}{\partial x} = \hat{\mu} \,\frac{\partial v_1}{\partial y} v_2 = 0 \forall \, x \in [0, f(H, t)]$$
(6.1)

Un caso particolare caso di termocapillarità è il cosiddetto "libero scorrimento" ($\sigma=0$) che si realizza quando la velocità orizzontale v_1^F delle particelle non varia in prossimità della frontiera superiore . Questa condizione si esprime:

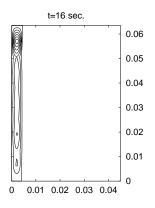
$$\frac{\partial v_1^F}{\partial y}(x, H, t) = 0 \qquad \forall x \in [0, f(H, t)]$$
$$v_2^F(x, H, t) = 0 \qquad \forall x \in [0, f(H, t)]$$

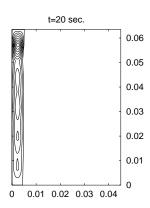
e cioè

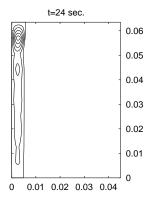
6.2 Risultati numerici

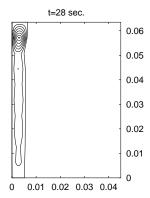
I risultati presentati in questa sezione sono quelli ottenuti con la condizione di "libero scorrimento". La griglia spaziale (61 × 11) e il passo temporale ($\Delta t = 10^{-6}$) utilizzati, così come la dimensione della striscia di lamina inizialmente liquida, sono i medesimi della simulazione precedente.

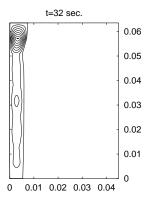
Rispetto a quest'ultimo si può osservare però una maggiore estensione del dominio liquido nella parte superiore della cavità. Ciò è coerente con il fenomeno fisico analizzato. Nel caso precedente infatti la presenza di un parete superiore ostacaolava il flusso delle particelle liquide che rimanevano "attaccate" alla suddetta parete. Ora invece le particelle sono libere di muoversi in prossimità della superficie libera e maggiore è dunque la loro velocità. Ne deriva che nella parte superiore della cavità è di maggiore entità il fenomeno del trasferimento di calore attraverso la convezione e quindi più rapido il processo di liquefazione del metallo.

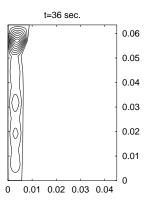


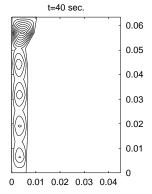


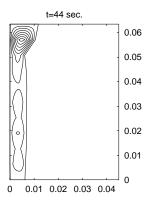












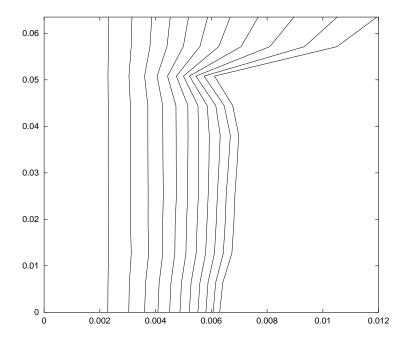


Figura 5.6.2.c: Evoluzione del fronte di fase nei tempi di osservazione

Come era logico aspettarsi, il fronte di fase si sta muovendo con una velocità maggiore rispetto al caso precedente. Al tempo $t=44\,sec$. infatti il punto più in alto del fronte è prossimo a $0.012\,cm$ mentre precedentemente al tempo $t=52\,sec$. il medesimo punto non aveva ancora raggiunto $0.011\,cm$.

Riferimenti bibliografici

- [Ang] F.Angotti, A.Borri, "Lezioni di scienza delle costruzioni", Dipartimento di ingegneria meccanica, Università di Perugia, (1997).
- [Bat] G.K.BATCHELOR, "An introduction to fluid dynamics", Cambridge University Press, (1977).
- [Ber] G.Bernardini, "Fisica Generale, Parte I", Editrice Veschi, (1987).
- [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", Internetional Journal of Thermodynamic Sciences 31, (1999), 5-26.
- [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.
- [Cra] J.Crank, "Free and moving boundary problems", Oxford Science Publication, (1984).
- [Dra] P.G.Drazin, W.H.Reid, "Hydrodynamic stability", Cambridge University Press, (1981).
- [Hun] S.C.Hunter, "Mechanics of continuous media", Ellis Horwood, (1976).
- [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 & metods in applied sciences 10, (2000).
- [Qua] L.Quartapelle, "Numerical solution of the incompressible Navier-Stokes equations", Birkhaüser Verlag, (1993).
- [Qrt] A.Quarteroni, "Modellistica numerica per problemi differenziali", Springer, (1997)

- [Rao] I.J.RAO, "Modeling of crystallization in polymers", Thesis in department of Mechanical Engineering, A&M University, Texas, USA, (1999).
- [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).