



Politecnico di Milano

SCUOLA DI INGEGNERIA INDUSTRIALE E DELL'INFORMAZIONE
Corso di Laurea Triennale in Ingegneria Matematica

TESI DI LAUREA

Modelizzazione dell'effetto loto tramite le equazioni di Allen-Cahn e di Cahn-Hilliard

uno studio numerico e presentazione di un nuovo approccio

Candidato:

Thomas Bellotti

Matricola 10434445

Relatore:

Prof.ssa Dott.ssa Simona Perotto

Ringraziamenti - Remerciements

In primo luogo, desidero ringraziare la Prof.ssa Simona Perotto per avermi aiutato e consigliato durante tutta la stesura del lavoro: la collaborazione a distanza, con un tempo limitato a disposizione e su un argomento non scelto insieme non sono certo le prerogative che rendono il lavoro più semplice; per questo il mio ringraziamento è ancora più sentito.

J'adresse mes remerciements à M. le professeur François Alouges et à M.me Flore Nabet, qui m'ont encadré pour réaliser ce projet à l'Ecole Polytechnique. En particulier, j'ai pu bénéficier d'un échange continu et fructueux avec M.me Nabet, dont le sujet de thèse présente des points en commun avec ce mémoire, bien au delà du contexte scolaire et des échéances.

A complètement de cela, je ne peux oublier mes chers camarades de l'Ecole Polytechnique : sans leur intelligence, leur rigueur et leur amitié, je ne serais pas ce que je suis. Egalement, merci à l'Ecole Polytechnique et à la France entière, qui m'ont accueilli sans aucun préjugé et avec amour.

Une pensée particulière pour Marie et Emmanuel Bresson, ainsi que pour toute leur belle famille : votre amitié a été très importante pour moi et j'espère qu'elle se poursuivra.

Compagno di questa avventura, Elia: sei stato una spalla su cui piangere quando tutto andava storto, una persona con cui sorridere quando tutto sembrava andare bene, con cui condividere una passione come l'enologia e tante altre cose; un grazie sincero perché forse da solo, non sarei dove sono ora (che non è poi gran cosa).

Cosa resta allora? Bene ... la mia famiglia: dire che siate stati fondamentali in ogni riuscita forse è riduttivo, non renderebbe conto pienamente di quello che sento. Siete le persone più altruiste che conosca, in quanto il vostro gioire per i miei piccoli traguardi non è voglia di luce riflessa, bensì desiderio di vedere che, infine, ho trovato una strada. In questo siete grandi e volte, nel mio egoismo, mi sento piccolo piccolo.

Infine, questa piccola tesi è della mia Sabry: senza di lei questo lavoro non sarebbe mai stato presentato quest'oggi o forse non sarei nello stato di presentarlo. Il tuo aiuto non si è limitato a raddrizzare il mio morale claudicante ma è stato molto di più: riportare il mio lavoro e il mio modo di scrivere la matematica all'interno dei canoni in voga nell'università italiana, nonché, ad aiutarmi a scrivere in italiano.

Indice

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | L'effetto loto e il problema della goccia | 5 |
| 1.1 | Obiettivi del presente lavoro e breve stato dell'arte | 6 |
| 1.2 | Un problema classico: una goccia su un piano | 7 |
| 1.3 | Il metodo del campo di fase e la nozione di flusso di gradiente | 8 |
| 1.4 | Risultati generali sugli spazi di Hilbert | 9 |
| 2 | L'equazione di Allen-Cahn | 11 |
| 2.1 | Derivazione | 11 |
| 2.2 | Esistenza ed unicità delle soluzioni | 11 |
| 2.3 | Bilancio d'energia e conservazione della massa | 12 |
| 2.4 | Il legame con il problema della goccia | 13 |
| 2.5 | Discretizzazione per differenze finite | 16 |
| 2.5.1 | Scelta della discretizzazione di f' attraverso un argomento energetico | 17 |
| 2.5.2 | Consistenza dello schema e precisione | 18 |
| 2.5.3 | Verifica dell'ordine di convergenza | 19 |
| 2.5.4 | Simulazione del caso 2D con splitting e condizioni di Dirichlet | 20 |
| 2.6 | Presenza in conto d'un substrato a creste e della forza di gravità. | 23 |
| 2.6.1 | Risultati numerici | 24 |
| 2.6.2 | Un risultato di convergenza della soluzione penalizzata | 26 |
| 2.6.3 | Sulla velocità di convergenza della soluzione penalizzata | 31 |
| 2.6.4 | Un miglioramento in termini di conservazione della massa | 31 |
| 2.6.5 | Un'altra miglioria nella conservazione della massa: un moltiplicatore locale-globale | 33 |
| 2.6.6 | Ruolo dei parametri di forma del substrato e della gravità | 35 |
| 3 | Equazione di Cahn-Hilliard | 39 |
| 3.1 | Derivazione | 39 |
| 3.2 | Esistenza ed unicità della soluzione | 40 |
| 3.3 | Conservazione della massa e bilancio d'energia | 40 |
| 3.4 | Discretizzazione dell'equazione 1D con le differenze finite | 41 |
| 3.4.1 | Decrescita dell'energia discreta dello schema | 42 |
| 3.4.2 | Consistenza dello schema e precisione | 43 |
| 3.4.3 | Verifica dell'ordine di convergenza | 44 |
| 3.5 | Discretizzazione con condizioni ai limiti di Neumann | 45 |
| 3.5.1 | Risultati numerici | 46 |
| 3.6 | Discretizzazione con condizioni ai limiti di Dirichlet | 48 |
| 3.6.1 | Risultati numerici | 48 |
| 4 | L'equazione di Cahn-Hilliard con condizioni ai limiti dinamiche | 51 |
| 4.1 | Il problema della goccia | 51 |
| 4.1.1 | Disuguaglianza di energia | 52 |
| 4.1.2 | Esistenza e unicità della soluzione | 53 |
| 4.1.3 | Implementazione di uno schema alle differenze finite | 53 |
| 4.1.4 | Risultati numerici | 54 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 4.2 | Decomposizione spinodale | 55 |
| 4.2.1 | Proprietà energetiche | 57 |
| 4.2.2 | Esistenza e unicità della soluzione | 57 |
| 4.2.3 | Implementazione di uno schema alle differenze finite | 57 |
| 4.2.4 | Risultati numerici | 57 |
| 5 | Conclusioni e sviluppi ulteriori | 61 |
| 5.1 | Conclusioni | 61 |
| 5.2 | Sviluppi ulteriori | 61 |
| | Bibliografia | 63 |

Capitolo 1

L'effetto loto e il problema della goccia

Osservando le foglie di più di duecento specie di piante, tra le quali la più famosa è il loto (*Nelumbo nucifera*), possiamo osservare un fenomeno singolare: la **super-idrofobia**, la cui conseguenza diretta è l'auto-pulizia, in quanto le piogge, scorrendo lungo la superficie a causa dell'idrorepellenza, portano con sé tutta la materia esterna alla foglia.

Tale sorprendente proprietà è resa possibile, non tanto, dal particolare materiale di cui è fatta la foglia, bensì, dalla **rugosità della superficie** che possiamo osservare nella figura 1.1.

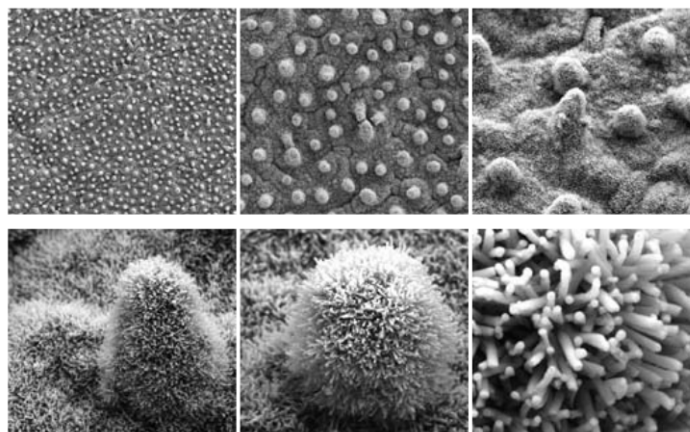


Figura 1.1: Immagini a ingrandimento crescente (nel senso della grafia destrorsa) di una foglia di loto al microscopio a scansione elettronica, la superficie è composta da protuberanze distanti poche decine di micrometri l'una dall'altra e composte a loro volta da nanostrutture tubolari. Immagine tratta da [37].

Di conseguenza, comprendere in profondità il legame tra le caratteristiche geometriche e comportamentali (nel senso meccanico del termine) di queste micro-strutture e la dinamica delle gocce di liquido è fondamentale per trarne ispirazione, al fine di progettare dei materiali super-idrofobici, autopulenti e antiadesivi.

Le applicazioni di tali superfici sono innumerevoli, tra le quali possiamo citare:

1. la **rimozione del ghiaccio dalle ali degli aerei** durante il volo, attualmente realizzata con grande dispendio energetico, impedendo l'adesione di gocce d'acqua che cristallizzerebbero con l'abbassarsi della temperatura;
2. creare una superficie antiadesiva per **evitare l'otturazione degli «stent»**, struttura cilindrica utilizzata in medicina per dilatare i vasi sanguigni, al fine di evitare una stenosi o un aneurisma;

3. diminuire l'utilizzo di prodotti, inquinanti e poco efficaci, per la **pulizia delle superfici**, in molteplici campi.

La maggior parte delle informazioni incluse sino ad ora in questa breve introduzione sono riprese e sintetizzate dall'eccellente articolo [37].

1.1 Obiettivi del presente lavoro e breve stato dell'arte

Il presente lavoro si prefigge degli obiettivi, alcuni dei quali sono, a nostra conoscenza, inediti o, comunque sia, non sono mai stati affrontati alla stessa maniera:

- **modellizzare il comportamento di una goccia di liquido su una superficie piana grazie all'equazione di Allen-Cahn dotata di condizioni al bordo di Dirichlet, che consentano la presa in considerazione delle tensioni superficiali delle interfacce tra le tre fasi e verificare numericamente la bontà e i limiti del modello attraverso il metodo delle differenze finite.**

A nostra conoscenza non vi sono lavori che abbiano affrontato esattamente lo stesso problema.

Più in generale, uno studio di stabilità di un metodo semi-implicito alle differenze finite è presentato in [46], ove la strategia per rendere in metodo numerico stabile è molto simile a quella che utilizzeremo in questo lavoro. Anche [48] riprende tale schema e affronta più in generale un'analisi di diversi schemi alle differenze finite, corredata di risultati relativi all'errore di troncatura;

- grazie ai risultati del punto precedente, **rendere conto di un substrato rugoso del tipo foglia di loto tramite una penalizzazione, seguito da una verifica tramite simulazione numerica alle differenze finite.** Anche in tal caso, non siamo a conoscenza di lavori simili, benché la letteratura nell'ambito della meccanica dei fluidi numerica (e non solo) sia ricca di esempi di utilizzo di un approccio per penalizzazione per la presa in conto di ostacoli fisici. A tale titolo possiamo citare, ad esempio, [6] e [41], relativamente alle equazioni di Navier-Stokes. L'approccio per penalizzazione è ugualmente utile per imporre qualunque tipo di condizione, come per esempio l'incompressibilità: si veda, a tale proposito, [25] o [11].

Da un punto di vista storico, i metodi di penalizzazione sono stati introdotti da Courant in [13] nel contesto dell'ottimizzazione vincolata;

- **modellizzare il comportamento di una goccia di liquido su una superficie grazie all'equazione di Cahn-Hilliard e verifica attraverso il metodo delle differenze finite.** Il caso dell'equazione di Cahn-Hilliard con condizioni di Neumann omogenee a zero accoppiata con Navier-Stokes è stato ampiamente studiato da un punto di vista sia teorico che numerico, per esempio da [7], che introduce l'equazione accoppiata con Navier-Stokes insieme con una discretizzazione alle differenze finite e da [4], che fornisce un gran numero di risultati teorici sempre sullo stesso sistema. Uno studio di stabilità e di efficienza di due diverse discretizzazioni per differenze finite è riportato in [26], mentre [44] propone uno studio del comportamento della goccia e dell'angolo di contatto statico grazie all'equazione di Cahn-Hilliard dotata di condizioni di Neumann accoppiata alle equazioni di Navier-Stokes, utilizzando dei substrati rugosi in differenti configurazioni, come faremo nel presente lavoro per l'equazione di Allen-Cahn;
- **verifica delle proprietà generali dell'equazione di Cahn-Hilliard**, come la decomposizione spinodale (si veda per esempio [10]), **grazie all'approssimazione per differenze finite.** Le proprietà teoriche di tale equazione sono ben comprese, si veda ad esempio [20] o [43].
- infine, procederemo all'**introduzione delle condizioni al bordo dinamiche per l'equazione di Cahn-Hilliard con lo scopo di migliorare la presa in conto del substrato, delle quali verificheremo le conseguenze sul sistema substrato-goccia e le proprietà generali attraverso delle simulazioni numeriche.** I primi risultati al fine di considerare un angolo di contatto non retto sono presentati in [28]. Tale tipo di equazione è stato ben compreso a livello teorico, si vedano per esempio [38], [45], [36] o [23] (per modelli ancora più complessi), ma resta ancora molto da fare dal

punto di vista numerico. Un articolo che pone i prodromi di una simulazione alle differenze finite è [29]. Indubbiamente, vi sono più risultati numerici riguardanti i metodi dei volumi/differenze finiti, tra i quali possiamo citare [8], che introduce uno schema ai volumi finiti per il sistema accoppiato Cahn-Hilliard/Navier-Stokes con buone caratteristiche di stabilità in termini di energia, oppure [19], che fornisce un'interessante digressione sugli effetti della forza di gravità sulla goccia e [18], che focalizzandosi in particolare sulla fisica del problema, introduce una approssimazione attraverso il metodo degli elementi finiti.

1.2 Un problema classico: una goccia su un piano

Il problema di una goccia di liquido su una superficie solida (altresì denominato «problema della bagnatura», per la cui storia si veda [47]) è un problema della fisica classica, formulabile in termini di **minimizzazione** di una energia d'interfaccia:

$$\min_{|\omega|=V} E(\omega) \quad (1.1)$$

ove il volume V è imposto, ω è una notazione per indicare una configurazione geometrica del sistema in senso astratto e E è un'energia della forma:

$$E(\omega) = \sigma_{SL}|\Sigma_{SL}| + \sigma_{LV}|\Sigma_{LV}| + \sigma_{SV}|\Sigma_{SV}| + \int_{\omega} G(x)dx \quad (1.2)$$

dove le grandezze σ sono le tensioni superficiali delle differenti interfacce e Σ indica le interfacce corrispondenti. Aggiungiamo inoltre il potenziale gravitazionale G , che considereremo nullo durante le analisi preliminari.

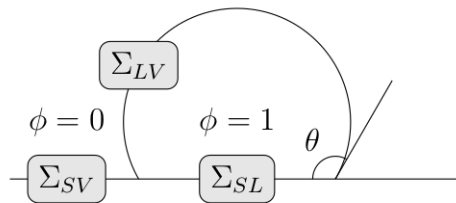


Figura 1.2: Rappresentazione schematica del problema e definizione dell'angolo di contatto θ .

La geometria del problema è illustrata dalla figura 1.2. In effetti, è evidente, in quanto problema isocoro di minimizzazione della lunghezza dell'interfaccia, che la forma di goccia soluzione del problema sia una sfera troncata dal substrato al fine di soddisfare la relazione¹ che definisce il cosiddetto **angolo di Young**:

$$\cos \theta = \frac{\sigma_{SV} - \sigma_{SL}}{\sigma_{LV}} \quad (1.3)$$

Più rigorosamente, sussiste una nota disuguaglianza isoperimetrica, la quale afferma che (si veda [24] per i dettagli della dimostrazione e per più informazioni su questo tipo di risultati, che costituiscono inaspettatamente una branca attiva di ricerca in matematica):

Teorema 1 (disuguaglianza isoperimetrica). *Sia $\gamma(t) = (x(t), y(t))$ un curva semplice, chiusa e orientata positivamente con parametrizzazione regolare C^1 di parametro $t \in [a, b]$. Denotiamo S l'area contenuta all'interno della curva γ . Allora, per L lunghezza fissata di γ , sussiste la disuguaglianza:*

$$L^2 \geq 4\pi S$$

e l'uguaglianza vale se e solo se γ è una circonferenza.

¹che si ottiene per semplice bilancio delle componenti orizzontali delle forze di tensione superficiale nel punto triplo.

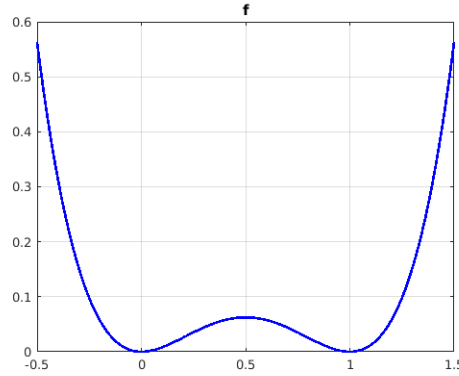


Figura 1.3: La funzione a doppio minimo f .

Questo è il motivo per il quale le bolle di sapone, se si fa astrazione della presenza della gravità (quasi ininfluyente su uno strato di materia fine) e del vento, sono di forma sferica, qualunque sia la forma del supporto che le ha generate (se regolare: i quadrati non sono ammessi).

Per il momento, il legame tra questo problema di natura essenzialmente geometrica e le equazioni alle derivate parziali potrebbe sembrare oscuro. Ciononostante, presenteremo tra poco una sorta di «regolarizzazione» dell'interfaccia tra le fasi, simile ad una approssimazione di una funzione poco regolare con una funzione C_c^∞ , che permetterà di semplificare il problema.

Ricordiamo ancora che non ci limiteremo allo studio di un substrato piatto, per il quale il problema in assenza di gravità è già ampiamente compreso, ma tenteremo anche di modellizzare la presenza di strutture particolari (micro-strutture), che conferiscono certe proprietà alla dinamica e alla statica delle fasi.

1.3 Il metodo del campo di fase e la nozione di flusso di gradiente

Illustriamo il primo grande passo che ci condurrà al legame tra la risoluzione numerica di una equazione alle derivate parziali ed il problema (1.1): introduciamo un approccio classico in dinamica delle interfacce, detto del **campo di fase**, nel quale il parametro d'interesse, normalmente una concentrazione di fase che indicheremo con la lettera greca $\phi \in [0, 1]$ e che chiameremo **parametro d'ordine**, varia con continuità. Il valore $\phi = 1$ corrisponde ad una prima fase pura (nel nostro caso il fluido) e allo stesso modo, $\phi = 0$ corrisponde all'altra fase pura (in questo lavoro, il gas).

Tale astuzia permette di tradurre dei problemi di natura assai astratta e geometrica in equazioni che potranno raramente venir risolte ma si prestano ad essere approssimate attraverso dei metodi numerici, come ad esempio il metodo delle differenze finite.

Il nostro punto di partenza sarà considerare l'**energia** del sistema che occupa il dominio limitato e regolare $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, della forma

$$E(\phi) = \int_{\Omega} \left[\frac{\epsilon}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{\epsilon} f(\phi) \right] dx \quad \text{con} \quad f(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^2 \quad (1.4)$$

ove $\epsilon > 0$ è il parametro che definisce lo spessore dell'interfaccia tra le fasi (da cui il nome di **modello a interfaccia diffusa**), a priori piccolo, e f è una funzione sufficientemente regolare a doppio pozzo in corrispondenza dei valori delle fasi pure, nel caso $\phi = 0$ e $\phi = 1$ (si veda la figura 1.3). Il ruolo del gradiente di ϕ è di penalizzare le soluzioni rapidamente oscillanti, vale a dire con rapide transizioni di fase (si veda [14]). Tale energia sarà la grandezza che minimizzeremo rispetto a due norme differenti, che daranno luogo, in un caso, all'equazione di Allen-Cahn e nell'altro, all'equazione di Cahn-Hilliard.

Le due equazioni menzionate qui sopra (introdotte rispettivamente nel 1972 e 1958) sono diretta conseguenza della definizione di cui sotto, che può essere vista come una generalizzazione dell'equazione di continuità, che costituisce un pilastro della meccanica dei fluidi e dell'elettrostatica:

Definizione 1 (flusso di gradiente). Sia V uno spazio di Banach e $E : V \rightarrow \mathbb{R}$ un funzionale d'energia di classe $C^1(V)$. Inoltre, $V \hookrightarrow H$ dove H è uno spazio di Hilbert e l'inclusione è densa. Chiamiamo **flusso di gradiente** di E per il prodotto scalare di H $(\cdot, \cdot)_H$ l'equazione differenziale:

$$\frac{d}{dt}(\phi(t), v)_H = -\langle E'(\phi(t)), v \rangle_{V', V} \quad \text{per } t > 0 \quad \forall v \in V \quad (1.5)$$

dove $E'(\phi) \in V'$ è il differenziale di E in ϕ .

Intuitivamente, l'idea di tale definizione (si veda [14]) consiste nell'osservare che per far diminuire un'energia nel tempo, è logico cercare di far evolvere il sistema nella direzione opposta al gradiente di tale energia.

1.4 Risultati generali sugli spazi di Hilbert

Prima di analizzare una possibile soluzione al problema introdotto poc'anzi, dettighiamo alcuni risultati noti che utilizzeremo a più riprese nelle prossime pagine. Salvo diversa menzione, tali risultati sono tratti, senza riportarne la dimostrazione, da [40].

Di tale opera adottiamo inoltre le definizioni degli spazi di Sobolev $H^1(\Omega)$ ed $H_0^1(\Omega)$, che evitiamo di ricordare.

Lemma 1 (formula di Green). Sia $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio limitato e di frontiera di classe C^1 , $\phi \in C^2(\Omega) \cap C^1(\bar{\Omega})$ e $\psi \in C^1(\bar{\Omega})$ due campi scalari, allora vale:

$$\int_{\Omega} \psi(x) \Delta \phi(x) dx = - \int_{\Omega} \nabla \psi(x) \cdot \nabla \phi(x) dx + \int_{\partial \Omega} \psi(x) \nabla \phi(x) \cdot n(x) dS$$

ove $n(x)$ denota la normale uscente da $\partial \Omega$.

Teorema 2 (di rappresentazione di Riesz). Sia H uno spazio di Hilbert. Per ogni $L \in H^*$ esiste un unico elemento $u_L \in H$ tale che

$$Lx = (u_L, x)_H \quad \forall x \in H$$

Inoltre

$$\|L\|_{H^*} = \|u_L\|_H$$

Teorema 3 (disuguaglianza di Poincaré). Sia $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio limitato e lipschitziano. Supponiamo che ϕ soddisfi una delle seguenti ipotesi:

1. $\phi \in H_{0, \Gamma_0}^1(\Omega)$ con $\Gamma \subset \partial \Omega$;
2. $\phi \in H^1(\Omega)$ e $\phi = 0$ su $S \subset \Omega$ tale che $m_d(S) > 0$ (misura di Lebesgue d -dimensionale);
3. $\phi \in H^1(\Omega)$ e $\int_{\Omega} \phi dx = 0$.

Allora $\exists C_p = C_p(d, \Omega) > 0$ tale che:

$$\|\phi\|_{L^2(\Omega)} \leq C_p \|\nabla \phi\|_{L^2(\Omega)}$$

Teorema 4 (di Rellich). Sia $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio limitato e lipschitziano, allora

$$H^1(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$$

e tale immersione è compatta.

Teorema 5 (di immersione di Sobolev). Sia $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ limitato e lipschitziano e sia $p^* = \frac{2d}{d-2}$ (detto esponente di Sobolev per H^1). Allora:

1. se $d > 2$, $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^p(\Omega)$ per $2 \leq p \leq p^*$ e per $2 \leq p < p^*$ l'immersione è compatta;
2. se $d = 2$, $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^p(\Omega)$ per $2 \leq p < \infty$ e l'immersione è compatta;

Inoltre $\exists C = C(d, p, \Omega) > 0$ tale che:

$$\|\phi\|_{L^p(\Omega)} \leq C \|\phi\|_{H^1(\Omega)} \quad \forall \phi \in H^1(\Omega)$$

Corollario 1. *Siano vere le ipotesi del teorema 5, allora $\exists C = C(d, p, \Omega) > 0$ tale che:*

$$\|\phi\|_{L^p(\Omega)} \leq C \|\phi\|_{H_0^1} \quad \forall \phi \in H_0^1(\Omega)$$

Dimostrazione. Per applicazione del teorema 5 e del teorema 3, otteniamo:

$$\begin{aligned} \|\phi\|_{L^p(\Omega)}^2 &\leq C_1^2 \|\phi\|_{H^1(\Omega)}^2 = C_1^2 \left(\|\phi\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla\phi\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) \leq \\ &\leq C_1^2 (C_p^2 + 1) \|\nabla\phi\|_{L^2(\Omega)}^2 = C^2 \|\phi\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

□

Infine, utilizzeremo spesso il lemma proveniente da [27], che stabilisce:

Lemma 2. *Sia f una funzione misurabile a valori su $\overline{\mathbb{R}}$, integrabile, allora l'insieme $\{|f| = +\infty\}$ è di misura nulla. In altri termini, $|f| < +\infty$ quasi ovunque.*

Capitolo 2

L'equazione di Allen-Cahn

2.1 Derivazione

L'**equazione di Allen-Cahn** nasce come flusso di gradiente dell'energia E per gli spazi funzionali $V = H_0^1(\Omega)$ e $H = L^2(\Omega)$ muniti ciascuno del proprio prodotto scalare usuale e tali che $V \hookrightarrow H$ con iniezione densa (si tratta di due componenti di una delle più famose terne hilbertiane) (si veda inoltre [12] per i calcoli che seguono e per delle proprietà interessanti dell'equazione).

In virtù della regolarità supposta per f , prendendo $\phi, v \in V$ e $t \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} E(\phi + tv) &= \int_{\Omega} \left[\frac{\epsilon}{2} |\nabla\phi + t\nabla v|^2 + \frac{1}{\epsilon} f(\phi + tv) \right] dx = \\ &= \int_{\Omega} \left[\frac{\epsilon}{2} (|\nabla\phi|^2 + t^2 |\nabla v|^2 + 2t \nabla\phi \cdot \nabla v) + \frac{1}{\epsilon} \left(f(\phi) + t f'(\phi)v + \frac{t^2}{2} v^2 f''(\phi) + \frac{t^3}{6} v^3 f'''(\bar{\phi}) \right) \right] dx \\ &\quad \text{ove } \bar{\phi} \in]\phi, \phi + tv[\text{ opportuno} \end{aligned}$$

Otteniamo dunque:

$$\langle E'(\phi), v \rangle_{V^*, V} = \int_{\Omega} \left[\epsilon \nabla\phi \cdot \nabla v + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi)v \right] dx \quad (2.1)$$

Facendo appello alla definizione (1.5), otteniamo la formulazione debole dell'equazione di Allen-Cahn:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\phi(t), v)_H &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \phi(t, x)v(x) dx = -\langle E'(\phi(t), v) \rangle_{V^*, V} = \\ &= \int_{\Omega} \left[\epsilon \nabla\phi(t, x) \cdot \nabla v(x) + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi(t, x))v(x) \right] dx \quad \forall v \in V \end{aligned}$$

Per ottenere l'equazione in formulazione classica, utilizziamo formalmente la formula di Green, il fatto che $v \in V$ e supponiamo che la soluzione sia sufficientemente regolare. Possiamo dunque scrivere:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}(t, x) = \epsilon \Delta\phi(t, x) - \frac{1}{\epsilon} f'(\phi(t, x)) \quad \text{per } (t, x) \in]0, T[\times \Omega \quad (2.2)$$

Prima di simulare numericamente l'equazione di Allen-Cahn (2.2) e di scoprire le difficoltà che ciò implica, esplicitiamo in primo luogo alcune proprietà di questa equazione, che potranno influenzare alcune nostre scelte di discretizzazione e, in secondo luogo, cerchiamo la maniera di far sì che tale equazione permetta di modellizzare ottenere la soluzione del problema (1.1).

2.2 Esistenza ed unicità delle soluzioni

Per quanto riguarda l'**esistenza, l'unicità e la regolarità delle soluzioni dell'equazione di Allen-Cahn**, facciamo riferimento, per esempio, a [31]. Ivi troviamo e riportiamo il risultato che riteniamo essere il più importante, per quanto riguarda le condizioni di Neumann:

Teorema 6. Sia $\Omega \in \mathbb{R}^d$ con $d \geq 2$ un dominio limitato e regolare e $T > 0$. Sia $\phi(t = 0, \cdot) = \phi_0 \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ la soluzione iniziale. Allora la soluzione di (2.2) con condizioni $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$ su $\partial\Omega$ esiste unica ed è inclusa in $L^\infty(0, T; H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega))$ e $\partial_t \phi \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$.

Segnaliamo che la funzione f da noi definita si presta a risultati come quello di cui sopra, pur non essendo l'unica scelta possibile proposta in letteratura, benchè sia probabilmente la più comune.

Si può anche dimostrare agevolmente un risultato di esistenza ed unicità nel caso di condizioni di Dirichlet omogenee a zero, infatti

Teorema 7. Sia $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio limitato di regolarità C^∞ e $\phi(t = 0, \cdot) = \phi_0 \in C^0(\bar{\Omega})$ tale che $\gamma_\Omega(\phi_0) = 0$ la soluzione iniziale. Allora se imponiamo che $\gamma_\Omega(\phi) = 0$, l'equazione (2.2) ammette una sola soluzione debole $\phi \in C^\infty(]0, T[\times \Omega)$ tale che $\phi \in [0, 1]$ quasi ovunque su $]0, T[\times \Omega$.

Dimostrazione. Per dimostrare l'asserto, facciamo appello al Teorema 4.3 di [40] (previa qualche piccolo aggiustamento) del quale verifichiamo immediatamente le ipotesi:

- $f(\phi) = \phi^2(1 - \phi^2)$ è una funzione C^∞ ;
- $\phi = 0$ è sottosoluzione, infatti appartiene a $L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ e $\partial_t \phi \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$. Inoltre:

1. $\forall v \in H_0^1(\Omega)$ tali che $v \geq 0$ quasi ovunque su Ω si ha

$$\langle \partial_t \phi(t), v \rangle_{L^2(\Omega)^*, L^2(\Omega)} - \epsilon \langle \nabla \phi(t), \nabla v \rangle_{L^2(\Omega)} \leq -\frac{1}{\epsilon} \langle f'(\phi), v \rangle_{L^2(\Omega)} \quad \text{quasi ovunque in } [0, T]$$

2. $\phi \leq 0$ su $\partial\Omega$;
3. $\phi \leq \phi_0$ quasi ovunque in Ω .

- $\phi = 1$ è sovrasoluzione, infatti appartiene a $L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ e $\partial_t \phi \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$. Inoltre:

1. $\forall v \in H_0^1(\Omega)$ tali che $v \geq 0$ quasi ovunque su Ω si ha

$$\langle \partial_t \phi(t), v \rangle_{L^2(\Omega)^*, L^2(\Omega)} - \epsilon \langle \nabla \phi(t), \nabla v \rangle_{L^2(\Omega)} \geq -\frac{1}{\epsilon} \langle f'(\phi), v \rangle_{L^2(\Omega)} \quad \text{quasi ovunque in } [0, T]$$

2. $\phi \geq 0$ su $\partial\Omega$;
3. $\phi \geq \phi_0$ quasi ovunque in Ω .

Di conseguenza il teorema citato poc'anzi garantisce esistenza, unicità, regolarità e il fatto che la soluzione stia in $[0, 1]$ (quasi ovunque). \square

2.3 Bilancio d'energia e conservazione della massa

Per mostrare alcune **proprietà energetiche e di conservazione** per l'equazione (2.2) utilizziamo, per semplicità, delle condizioni ai limiti di Neumann omogenee a zero¹, imponendo perciò $\frac{\partial \phi}{\partial n} = \nabla \phi \cdot n = 0$ su $\partial\Omega$.

Moltiplicando l'equazione (2.2) per $\partial_t \phi$ e integrando nello spazio, dopo aver utilizzato formalmente la formula di Green, viene:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left| \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|^2 dx &= \int_{\Omega} \epsilon \Delta \phi \frac{\partial \phi}{\partial t} dx - \frac{1}{\epsilon} \int_{\Omega} f'(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial t} dx \\ &= - \int_{\Omega} \epsilon \nabla \phi \cdot \nabla \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right) dx + \epsilon \int_{\partial\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} \frac{\partial \phi}{\partial n} ds - \frac{1}{\epsilon} \int_{\Omega} \frac{df(\phi)}{dt} dx = - \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \left[\frac{\epsilon}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{\epsilon} f(\phi) \right] dx = - \frac{dE}{dt} \\ &= \left\| \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{dE}{dt} = - \left\| \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq 0 \end{aligned}$$

Il che significa che l'energia di un sistema governato da (2.2) è **non crescente** nel tempo.

¹per evitare di dover supporre che la funzione ϕ sia a supporto compatto.

Ricerchiamo un limite inferiore per l'energia del sistema, osservando che

$$\inf_{\phi \in [0,1]} f(\phi) = 0$$

concludiamo che

$$0 \leq E(\phi) = \int_{\Omega} \left[\frac{\epsilon}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{\epsilon} f(\phi) \right] dx < +\infty$$

dunque il Lemma 2 (conseguenza diretta della disuguaglianza di Markov) ci permette di dedurre che:

$$|\nabla \phi| < +\infty \quad \text{et} \quad |\phi| < +\infty \quad \text{quasi ovunque in } \Omega$$

Per contro, l'equazione di Allen-Cahn **non conserva la massa**: integrando (2.2), grazie alla formula di Green, otteniamo:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} dx = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \phi dx = \int_{\Omega} \left[\epsilon \Delta \phi - \frac{1}{\epsilon} f'(\phi) \right] dx = \int_{\partial \Omega} \epsilon \frac{\partial \phi}{\partial n} ds - \int_{\Omega} \frac{1}{\epsilon} f'(\phi) dx = - \int_{\Omega} \frac{1}{\epsilon} f'(\phi) dx \neq 0$$

Di conseguenza, d'ora in avanti, aggiungeremo un **moltiplicatore di Lagrange** all'equazione (2.2), per imporre la conservazione della massa del sistema, il che meglio approssima la fisica di una goccia d'acqua in assenza di evaporazione o di condensazione. Indichiamo con la lettera greca λ tale moltiplicatore e poniamo:

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t}(t, x) = \epsilon \Delta \phi(t, x) - \frac{1}{\epsilon} f'(\phi(t, x)) - \lambda & \text{per } (t, x) \in]0, T[\times \Omega \\ \lambda = \frac{1}{\epsilon |\Omega|} \int_{\Omega} f'(\phi) dx \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (2.3)$$

Sottolineiamo che l'aggiunta di tale moltiplicatore è perfettamente equivalente alla minimizzazione di (1.4) nello spazio $\dot{L}^2(\Omega)$, da quanto si evince da [14]. Tale articolo sottolinea la mancanza di senso fisico di tale soluzione, in quanto viene meno il principio di azione locale: per quanto ci riguarda, nonostante tale soluzione presenti alcuni svantaggi, che avremo l'occasione di dettagliare e di risolvere in parte, i benefici di una tale formulazione restano, almeno per una analisi preliminare, assai importanti.

Il fatto di aver supposto a più riprese che $\phi \in [0, 1]$ (il che è scontato solo per le condizioni di Dirichlet omogenee a zero, grazie al Teorema 7) è conseguenza diretta della minimizzazione d'energia dalla quale deriva l'equazione di Allen-Cahn, infatti, se vi fosse un insieme di misura non nulla sul quale la funzione non appartiene a tale intervallo, verrebbe meno la minimizzazione di tale funzionale.

2.4 Il legame con il problema della goccia

Una volta compreso che le equazioni (2.2) e (3.2) ben approssimano il comportamento non stazionario di miscele di due fasi pure, è necessario fare chiarezza sulle condizioni al bordo che permettono di rendere conto delle tre tensioni superficiali del modello classico (1.4). Sorprendentemente, sarà sufficiente porsi nel contesto di una sola dimensione dello spazio, per una ragione che sarà chiara tra poco.

Per far questo, consideriamo la soluzione stazionaria ($\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$) dell'equazione (2.2). Otteniamo quindi l'equazione alle derivate ordinarie

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = \frac{1}{\epsilon^2} f'(\phi(x)) = \frac{2}{\epsilon^2} \phi(x)(1 - \phi(x))(1 - 2\phi(x)) \quad x \in [0, 1]$$

L'articolo [35] ci segnala che le sole soluzioni regolari dell'equazione stazionaria sono tali che $\lim_{x \rightarrow +\infty} \phi(x) = 1$ e che $\lim_{x \rightarrow +\infty} \phi'(x) = 0$. Moltiplichiamo l'equazione di cui sopra per ϕ' :

$$-\epsilon \phi''(x) \phi'(x) + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi(x)) \phi'(x) = 0 = -\frac{\epsilon}{2} \frac{d}{dx} |\phi'(x)|^2 + \frac{1}{\epsilon} \frac{d}{dx} f(\phi(x)) = \frac{d}{dx} \left[-\frac{\epsilon}{2} (\phi'(x))^2 + \frac{1}{\epsilon} f(\phi(x)) \right]$$

Utilizzando le condizioni introdotte poco fa, otteniamo

$$-\frac{\epsilon}{2} (\phi'(x))^2 + \frac{1}{\epsilon} f(\phi(x)) = \text{const.} = 0 \Rightarrow \frac{\epsilon}{2} (\phi'(x))^2 = \frac{1}{\epsilon} f(\phi(x)) \quad \forall x \quad (2.4)$$

È ora possibile integrare questa equazione, semplificando i calcoli con il cambiamento di variabile $\psi = 2\phi - 1$. Inoltre, la celebre congettura di De Giorgi, per la quale si veda ancora una volta [35], asserisce che la soluzione è monotona, per cui introduciamo il segno \pm a seconda che ϕ tenda verso 0 o 1 per $x \rightarrow +\infty$ e scriviamo

$$\frac{\epsilon}{2}(\phi'(x))^2 = \frac{1}{\epsilon}f(\phi(x)) = \frac{\epsilon}{8}(\psi'(x))^2 = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\psi+1}{2}\right)^2 \left(\frac{\psi-1}{2}\right)^2 = \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\psi^2-1}{4}\right)^2$$

$$\psi'(x) = \pm \frac{1}{\sqrt{2\epsilon}}(\psi(x)^2 - 1) \quad \operatorname{arctanh}(\psi(x)) = \pm \frac{1}{\sqrt{2\epsilon}}x + c$$

La risoluzione di tale equazione è semplice, in quanto si tratta della famosa equazione di Riccati, la cui soluzione è:

$$\phi(x) = \frac{1}{2} \left[\tanh \left(\pm \frac{1}{\sqrt{2\epsilon}}x + c \right) + 1 \right] \quad (2.5)$$

Al di là della forma analitica di ϕ , che utilizzeremo tra poco, è importante notare il ruolo del parametro ϵ , che è esattamente lo spessore medio della zona di interfaccia tra i valori 0 e 1. In effetti, uno sviluppo in serie di Taylor della funzione \tanh nell'intorno di $x = 0$ (in tutta generalità, visto che porremo per semplicità $c = 0$) dà:

$$\phi(x) = \frac{1}{2} \left[\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{2^{2n}(2^{2n}-1)B_{2n}}{(2n)!} \left(\pm \frac{1}{\sqrt{2\epsilon}}x \right)^{2n-1} + 1 \right] = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2\sqrt{2\epsilon}}x + o(x^3)$$

In effetti, se prendiamo l'intersezione della funzione linearizzata con la retta $y = 1$, otteniamo :

$$y = 1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{2\epsilon}}\tilde{x} \quad \tilde{x} = \sqrt{2\epsilon}$$

Per tessere il legame con il problema della goccia, calcoliamo l'energia E del sistema, il cui calcolo si semplifica grazie all'equazione (2.4) (riportiamo solo il caso di soluzione crescente, per semplicità):

$$\frac{\epsilon}{2}(\phi'(x))^2 = \frac{1}{\epsilon}f(\phi(x)) \quad \sqrt{\frac{\epsilon}{2}}\phi' = \sqrt{\frac{1}{\epsilon}f(\phi)} = \sqrt{\frac{1}{\epsilon}}\phi(1-\phi)$$

$$\begin{aligned} E(\phi) &= \int_{\Omega} \left[\frac{\epsilon}{2}(\phi')^2 + \frac{1}{\epsilon}f(\phi) \right] dx = \int_{\Omega} \underbrace{\left[\sqrt{\frac{\epsilon}{2}}\phi' - \sqrt{\frac{1}{\epsilon}}\phi(1-\phi) \right]^2}_{=0} dx + \int_{\Omega} 2\sqrt{\frac{\epsilon}{2}}\phi' \sqrt{\frac{1}{\epsilon}}\phi(1-\phi) dx = \\ &= \frac{2}{\sqrt{2}} \int_{\Omega} \phi(1-\phi)\phi' dx \end{aligned}$$

Otteniamo :

- nel caso di un salto $0 \rightsquigarrow 1$, ove il dominio è $\Omega =] - \infty, +\infty[$:

$$E(\phi) = \frac{2}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(1-\phi)\phi' dx = \frac{\sqrt{2}}{6}$$

- consideriamo il dominio $\Omega =]a, +\infty[$ con le condizioni $\phi(a) = \alpha \in]0, 1[$ e $\lim_{x \rightarrow +\infty} \phi(x) = 1$, corrispondente al salto $\alpha \rightsquigarrow 1$.

Per avere tale configurazione, è sufficiente fissare la costante c di integrazione, grazie a $c = \operatorname{arctanh}(2\alpha - 1) - \frac{a}{\sqrt{2\epsilon}}$. Otteniamo:

$$E(\phi) = \frac{2}{\sqrt{2}} \int_a^{+\infty} \phi(1-\phi)\phi' dx = \frac{2}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{6} - \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha^3}{3} \right)$$

- con lo stesso dominio del punto precedente, fissiamo $\phi(a) = \alpha \in]0, 1[$ e $\lim_{x \rightarrow +\infty} \phi(x) = 0$, corrispondente ad una soluzione decrescente e al salto $\alpha \rightsquigarrow 0$.

Si trova ugualmente che basta imporre $c = \frac{a}{\sqrt{2}\epsilon} + \operatorname{arctanh}(2\alpha - 2)$, ottenendo:

$$E(\phi) = -\frac{2}{\sqrt{2}} \int_a^{+\infty} \phi(1-\phi)\phi' dx = \frac{2}{\sqrt{2}} \left(\frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{3} \right)$$

Osserviamo che in ogni caso tale energia non dipende né da ϵ né dai punti che consideriamo essere il bordo del dominio, definendo quindi in maniera del tutto generale l'energia di una transizione.

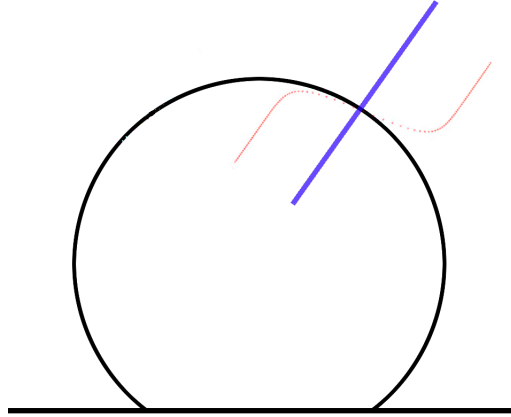


Figura 2.1: Idea dietro al passaggio da un'equazione 1D a un problema in più dimensioni: in blu un taglio qualunque perpendicolare all'interfaccia tra due fasi, in rosso il variare della funzione ϕ lungo tale retta, ove la larghezza della transizione è determinata da ϵ .

In ultima analisi, il legame tra il problema (1.1) e l'equazione (2.2) viene posto imponendo una **condizione di Dirichlet** in corrispondenza del piano che costituisce il substrato, in maniera da soddisfare l'**energia di salto prevista dalle tensioni superficiali** (si veda anche la figura 2.1).

Sia $\phi = \alpha$ con $\alpha \in]0, 1[$ sul piano di base.

- per semplicità, cominciamo con il caso

$$\sigma_{LV} = \sigma_{SV} + \sigma_{SL} \quad (2.6)$$

che intuitivamente significa che un salto energetico da $\phi = 0$ a $\phi = 1$ (da fase gassosa a fase liquida) presenta lo stesso valore della successione di salti da $\phi = 0$ a $\phi = \alpha$ (vapore-solido) seguito da $\phi = \alpha$ a $\phi = 1$ (solido-liquido). Naturalmente troveremo presto la maniera di emanciparci da questo legame forzato tra le tensioni superficiali. Per sintetizzare:

$$\begin{aligned} - \sigma_{LV} &\rightsquigarrow E_{0,1} = \frac{\sqrt{2}}{6} \\ - \sigma_{SV} &\rightsquigarrow E_{0,\alpha} = \sqrt{2} \left(\frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{3} \right) \\ - \sigma_{SL} &\rightsquigarrow E_{\alpha,1} = \sqrt{2} \left(\frac{1}{6} - \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha^3}{3} \right) \end{aligned}$$

Per proseguire, osserviamo che il problema (1.1) è equivalente ad un problema di minimizzazione la cui funzione di costo è (1.2) moltiplicata per una costante e alla quale aggiungiamo una costante additiva. Passiamo quindi al problema normalizzato:

$$\min_{|\omega|=V} \frac{\sqrt{2}}{6\sigma_{LV}} (\sigma_{SL}|\Sigma_{SL}| + \sigma_{LV}|\Sigma_{LV}| + \sigma_{SV}|\Sigma_{SV}|) = \min_{|\omega|=V} \frac{\sqrt{2}}{6} \frac{\sigma_{SL}}{\sigma_{LV}} |\Sigma_{SL}| + \frac{\sqrt{2}}{6} |\Sigma_{LV}| + \frac{\sqrt{2}}{6} \frac{\sigma_{SV}}{\sigma_{LV}} |\Sigma_{SV}|$$

Di conseguenza, per avere l'energia di transizione corretta, imponiamo

$$E_{0,\alpha} = \sqrt{2} \left(\frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{3} \right) = \frac{\sqrt{2}}{6} \frac{\sigma_{SV}}{\sigma_{LV}}$$

In effetti, qualunque altra uguaglianza tra energie e coefficiente andrebbe bene, in virtù della relazione (2.6);

- generalizziamo, eliminando l'ipotesi (2.6), osservando che l'estensione del substrato è una costante del problema, il che si scrive matematicamente:

$$|\Sigma_{SL}| + |\Sigma_{SV}| = \text{costante}$$

Ricordandoci dell'invarianza del problema di minimizzazione per addizione di una costante, possiamo rimuovervi un multiplo della misura del substrato:

$$\begin{aligned} & \min_{|\omega|=V} \sigma_{SL} |\Sigma_{SL}| + \sigma_{LV} |\Sigma_{LV}| + \sigma_{SV} |\Sigma_{SV}| - \lambda (|\Sigma_{SL}| + |\Sigma_{SV}|) = \\ & = \min_{|\omega|=V} \underbrace{(\sigma_{SL} - \lambda)}_{=\sigma'_{SL}} |\Sigma_{SL}| + \underbrace{\sigma_{LV}}_{=\sigma'_{LV}} |\Sigma_{LV}| + \underbrace{(\sigma_{SV} - \lambda)}_{=\sigma'_{SV}} |\Sigma_{SV}| \end{aligned}$$

Cerchiamo λ per ricondursi alla situazione ove (2.6) è valida per le tensioni superficiali dotati di tildi:

$$\sigma'_{LV} = \sigma'_{SL} + \sigma'_{SV} = \sigma_{SL} + \sigma_{SV} - 2\lambda \quad \lambda = \frac{\sigma_{SL} + \sigma_{SV} - \sigma_{LV}}{2}$$

ottenendo finalmente:

$$\begin{aligned} E_{0,\alpha} &= \sqrt{2} \left(\frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{3} \right) = \frac{\sqrt{2}}{6} \frac{\sigma'_{SV}}{\sigma'_{LV}} = \frac{\sqrt{2}}{6} \frac{1}{\sigma_{LV}} \left(\sigma_{SV} - \frac{\sigma_{SL} + \sigma_{SV} - \sigma_{LV}}{2} \right) = \\ &= \frac{\sqrt{2}}{12} \frac{\sigma_{SV} + \sigma_{LV} - \sigma_{SL}}{\sigma_{LV}} \end{aligned}$$

Ciò significa che il valore α da dare alla **condizione di Dirichlet** sul substrato affinché la goccia, che evolve sotto il controllo dell'equazione di Allen-Cahn (2.2), presenti l'angolo di Young dato da (1.3) una volta arrivati in regime stazionario è soluzione dell'equazione di terzo grado:

$$\frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{3} = \frac{1}{12} \frac{\sigma_{SV} + \sigma_{LV} - \sigma_{SL}}{\sigma_{LV}} = \frac{1}{12} (\cos \theta + 1) \quad \text{con } \alpha \in [0, 1] \quad (2.7)$$

2.5 Discretizzazione per differenze finite

In questo lavoro non includeremo una descrizione dettagliata della simulazione dell'equazione di Allen-Cahn in dimensione uno. Ciò nonostante, sottolineiamo che tale studio preliminare si è rivelato assai utile per mettere in pratica efficacemente delle approssimazioni in dimensione due e che una simulazione è comunque implementata nello script `../scripts/S012.m`.

Considereremo un dominio rettangolare di forma $\Omega =]a_x, b_x[\times]a_y, b_y[$, che discretizzeremo con due passi di spazio forniti da

$$\Delta x = \frac{b_x - a_x}{I + 1} \quad \Delta y = \frac{b_y - a_y}{J + 1} \quad \text{con } I, J \in \mathbb{N}^*$$

Il passo di tempo sarà $\Delta t = \frac{T}{N}$ con $N \in \mathbb{N}^*$. Conseguentemente, la soluzione discretizzata del problema sarà indicata come $\phi_{i,j}^n$ con $i \in \{1, \dots, I\}$, $j \in \{1, \dots, J\}$, $n \in \{1, \dots, N\}$, approssimando la soluzione esatta $\phi(n\Delta t, i\Delta x, j\Delta y)$.

Le incognite saranno ordinate secondo la seguente convenzione:

$$\phi^n = (\phi_{1,1}^n, \dots, \phi_{1,J}^n, \phi_{2,1}^n, \dots, \phi_{2,J}^n, \dots, \phi_{I,1}^n, \dots, \phi_{I,J}^n) \in \mathbb{R}^{IJ}$$

Infine, l'equazione (2.2) discretizzata (senza condizioni al bordo) si scrive:

$$\frac{\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n}{\Delta t} + \epsilon \frac{-\phi_{i-1,j}^{n+1} + 2\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i+1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \epsilon \frac{-\phi_{i,j-1}^{n+1} + 2\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j+1}^{n+1}}{\Delta y^2} + \frac{1}{\epsilon} df(\phi_{i,j}^n, \phi_{i,j}^{n+1}) = 0 \quad (2.8)$$

$$i \in \{1, \dots, I\} \quad j \in \{1, \dots, J\} \quad n \in \{1, \dots, N\} \quad (2.9)$$

dove la mancanza del moltiplicatore λ sarà spiegata prossimamente, in virtù di una tecnica detta **di splitting** (riferirsi a [30] per più informazioni) e l'espressione di df , approssimazione di f' , sarà determinata in maniera opportuna da garantire una proprietà di decrescenza temporale dell'energia discreta.

2.5.1 Scelta della discretizzazione di f' attraverso un argomento energetico

Al fine di scegliere come discretizzare f' , scriveremo un **bilancio di energia discreta**, simile a quello del caso continuo (sezione 2.3). In effetti, vista la non linearità dell'equazione (2.2), non possiamo procedere ad un'analisi di stabilità di tipo Von-Neumann (dettagliata per esempio in [5]), ragion per la quale un criterio di tipo energetico resta la sola strada percorribile. Per questo, consideriamo delle condizioni al bordo di Neumann omogenee a zero, discretizzate al prim'ordine. Ciò significa imporre:

$$\frac{\phi_{i,J+1}^n - \phi_{i,J}^n}{\Delta y^2} = \frac{\phi_{i,0}^n - \phi_{i,1}^n}{\Delta y^2} = 0 \quad i \in \{1, \dots, I\} \quad (2.10)$$

$$\frac{\phi_{I+1,j}^n - \phi_{I,j}^n}{\Delta x^2} = \frac{\phi_{0,j}^n - \phi_{1,j}^n}{\Delta x^2} = 0 \quad j \in \{1, \dots, J\} \quad (2.11)$$

Tali relazioni ci permetteranno di trovare un analogo della formula di Green per il caso discreto. D'altra parte, semplificheremo le notazioni e il procedimento, che si generalizza a delle dimensioni superiori con poco sforzo, ponendoci nel caso di un problema uni-dimensionale.

Siano $(\phi_j)_{0 \leq j \leq J+1}, (\mu_j)_{0 \leq j \leq J+1}$ due successioni reali rispettanti le condizioni di Neumann dell'equazione (2.10). Grazie a dei semplici calcoli, otteniamo:

$$\begin{aligned} & \overbrace{\sum_{j=1}^J \Delta x \frac{\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1}}{\Delta x^2} \mu_j}^{\approx \int_a^b \phi'' \mu dx} = \sum_{j=1}^J \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x} \mu_j - \sum_{j=1}^J \frac{\phi_j - \phi_{j-1}}{\Delta x} \mu_j \\ & = \sum_{j=1}^J \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x} \mu_j - \sum_{j=0}^{J-1} \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x} \mu_{j+1} = \sum_{j=1}^{J-1} \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x} \mu_j - \sum_{j=1}^{J-1} \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x} \mu_{j+1} \\ & = \sum_{j=1}^J \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x} (\mu_j - \mu_{j+1}) = - \underbrace{\sum_{j=1}^J \Delta x \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x} \frac{\mu_{j+1} - \mu_j}{\Delta x}}_{\approx - \int_a^b \phi' \mu' dx} \quad (2.12) \end{aligned}$$

Riscriviamo lo schema (2.8) (una volta passati alla dimensione uno) sotto la forma

$$\begin{aligned} \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} &= \frac{\epsilon}{2} \left(\frac{\phi_{i-1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1} + \phi_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{\phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i+1}^n}{\Delta x^2} \right) + \\ &+ \frac{\epsilon \Delta t}{2} \left(\frac{\phi_{i-1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1} + \phi_{i+1}^{n+1}}{\Delta t \Delta x^2} - \frac{\phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i+1}^n}{\Delta t \Delta x^2} \right) + \frac{1}{\epsilon} df(\phi_i^n, \phi_i^{n+1}) \quad (2.13) \end{aligned}$$

Per ritrovare una discretizzazione dell'energia (1.4), moltiplichiamo l'equazione (2.13) per la derivata temporale discretizzata al prim'ordine di ϕ e procediamo ad una integrazione discreta. In seguito all'applicazione di (2.12), possiamo scrivere:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^I \Delta x \left| \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} \right|^2 - \sum_{i=1}^I \frac{\Delta x}{\epsilon} df(\phi_i^n, \phi_i^{n+1}) \left(\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} \right) \\
&= -\frac{\epsilon}{2} \sum_{i=1}^I \Delta x \frac{\left(\frac{\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_i^{n+1}}{\Delta x} \right)^2 - \left(\frac{\phi_{i+1}^n - \phi_i^n}{\Delta x} \right)^2}{\Delta t} - \frac{\epsilon}{2\Delta t} \sum_{i=1}^I \Delta x \left| \frac{\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_i^{n+1}}{\Delta x} - \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_i^n}{\Delta x} \right|^2 \quad (2.14)
\end{aligned}$$

Scegliamo di approssimare la derivata temporale dell'energia $E(\phi)$ attraverso la sua discretizzazione più naturale, dunque:

$$\Delta E_n^{n+1} = \frac{\epsilon}{2} \sum_{i=1}^I \Delta x \frac{\left(\frac{\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_i^{n+1}}{\Delta x} \right)^2 - \left(\frac{\phi_{i+1}^n - \phi_i^n}{\Delta x} \right)^2}{\Delta t} + \frac{1}{\epsilon} \sum_{i=1}^I \Delta x \frac{f(\phi_i^{n+1}) - f(\phi_i^n)}{\Delta t} \quad (2.15)$$

Utilizzando (2.14) e (2.15) otteniamo:

$$\begin{aligned}
\Delta E_n^{n+1} &= \underbrace{-\sum_{i=1}^I \Delta x \left| \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} \right|^2}_{\text{dissipazione fisica}} - \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\epsilon}{\Delta t} \sum_{i=1}^I \Delta x \left| \frac{\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_i^{n+1}}{\Delta x} - \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_i^n}{\Delta x} \right|^2}_{\text{dissipazione dovuta allo schema numerico}} + \\
&\quad + \frac{1}{\epsilon} \sum_{i=1}^I \Delta x \left[\frac{f(\phi_i^{n+1}) - f(\phi_i^n)}{\Delta t} - df(\phi_i^n, \phi_i^{n+1}) \left(\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} \right) \right] \quad (2.16)
\end{aligned}$$

Giunti a questo punto, formuliamo diverse osservazioni importanti: in primo luogo, gli schemi impliciti implicano una **perdita di energia** rispetto alla sola fisica del problema, il che è una delle ragioni della loro stabilità; in secondo luogo, il solo termine del quale non conosciamo il segno si trova alla seconda linea dell'equazione (2.16), quindi impone che sia nullo ci permettete di scegliere una discretizzazione di f' pertinente. In effetti tale scelta (qualificabile di **semi-implicita**) si dimostra essere una buona approssimazione di f' che permette, inoltre, di concludere sulla **non crescita** dell'energia di un sistema la cui dinamica è approssimata da (2.8) (si veda per esempio [42] per più informazioni). Abbiamo quindi:

$$df(x, y) = \frac{f(x) - f(y)}{x - y} = (1 - x - y)[x(1 - x) + y(1 - y)] \implies \Delta E_n^{n+1} \leq 0 \quad n = 0, \dots, N - 1 \quad (2.17)$$

2.5.2 Consistenza dello schema e precisione

In questa sezione, verificheremo che lo schema (2.8) presentato qui sopra è **consistente** rispetto all'equazione di Allen-Cahn (2.2) e **preciso** all'ordine uno in tempo e all'ordine due in spazio. Inoltre, dedicheremo qualche frase a discutere la precisione legata al possibile utilizzo di uno schema di Crank-Nicolson, cioè un θ -metodo di parametro $\frac{1}{2}$.

Procederemo in maniera formale supponendo che ϕ sia derivabili con continuità un numero sufficiente di volte per dare un senso agli sviluppi di Taylor che appariranno. Inseriamo la soluzione esatta di (2.2) nello schema (2.8) (in dimensione uno per semplicità), indicando t l'istante discreto n e come $t + \Delta t$ l'istante $n + 1$. Stesso discorso per la variabile spaziale. Otteniamo:

$$\frac{\phi(t + \Delta t, x) - \phi(t, x)}{\Delta t} - \epsilon \frac{\phi(t + \Delta t, x - \Delta x) - 2\phi(t + \Delta t, x) + \phi(t + \Delta t, x + \Delta x)}{\Delta x^2} \quad (2.18)$$

$$= \partial_t \phi(t, x) + \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt} \phi(t, x) + O(\Delta t^2) - \epsilon \partial_{xx} \phi(t, x) - \frac{\epsilon \Delta x^2}{12} \partial_{xxxx} \phi(t, x) + O(\Delta x^4) + \quad (2.19)$$

$$+ \frac{1}{\epsilon} \left[f'(\phi(t, x)) + \frac{1}{2} f''(\phi(t, x)) \Delta t \partial_t \phi(t, x) + O(\Delta t^2) \right] \quad (2.20)$$

$$= \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left[\partial_t \phi(t, x) + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi(t, x)) \right] - \frac{\epsilon \Delta x^2}{12} \partial_{xxxx} \phi(t, x) + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4) \quad (2.21)$$

$$= O(\Delta t) + O(\Delta x^2) \quad (2.22)$$

In accordo con tale equazione, la **precisione** è $O(\Delta t)$ in tempo e $O(\Delta x^2)$ in spazio. Di conseguenza ci domandiamo se sia possibile ottenere un ordine quadratico di consistenza in tempo: ciò è impedito dal coefficiente $\frac{1}{2}$ davanti alle parentesi quadre, che non permette d'identificare l'equazione esatta di (2.2). Possiamo immaginare, visto il valore di tale coefficiente, che se avessimo scelto d'utilizzare uno schema di tipo Crank-Nicolson, avremmo guadagnato un ordine di precisione in tempo.

Per comprendere più in profondità il comportamento dello schema, richiamiamo la nozione d'**equazione equivalente**, introdotta da [5]: essa consta dell'equazione originale alla quale si aggiunge la parte principale dell'errore di troncatura dello schema numerico, cercando di esprimerla in funzione delle sole derivate in spazio (chiameremo E_t il termine dominante dell'errore di troncatura di (2.8)) :

$$E_t = \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left[\partial_t \phi(t, x) + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi(t, x)) \right] - \frac{\epsilon \Delta x^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \phi(t, x) = \frac{\epsilon \Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(t, x) - \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \phi(t, x)$$

Per continuare, utilizziamo nuovamente l'equazione (2.2), ottenendo:

$$E_t = \frac{\epsilon \Delta t}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\epsilon \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(t, x) - \frac{1}{\epsilon} f'(\phi(t, x)) \right] - \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \mu(t, x) = \left(\frac{\epsilon^2 \Delta t}{2} - \frac{\Delta x^2}{12} \right) \frac{\partial^4}{\partial x^4} \phi(t, x)$$

al quale è associata l'equazione equivalente, che se venisse discretizzata alla stessa maniera che qui sopra, permetterebbe di ottenere un ordine di consistenza $O(\Delta t^2)$ in tempo e $O(\Delta x^4)$ in spazio:

$$\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial t}(t, x) - \epsilon \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\phi}(t, x) + \frac{1}{\epsilon} f'(\tilde{\phi}(t, x)) + \left(\frac{\epsilon^2 \Delta t}{2} - \frac{\Delta x^2}{12} \right) \frac{\partial^4}{\partial x^4} \tilde{\phi}(t, x) = 0 \quad \text{per } (t, x) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega$$

Non avendo altro che derivate d'ordine pari nella variabile spaziale, abbiamo mostrato che lo schema implementato è di natura **diffusiva** o dissipativa (vedesi [5] per approfondire tale nozione), il che significa che ha la tendenza a allargare artificialmente il supporto nel corso del tempo. Il termine «dissipativo» è tanto più corretto se osserviamo che gli schemi completamente impliciti producono una dissipazione d'energia supplementare, rispetto a uno schema di Crank-Nicolson, ove l'energia non è né prodotta né dissipata dallo schema, rispetto a uno schema esplicito, dove l'approssimazione genera dell'energia.

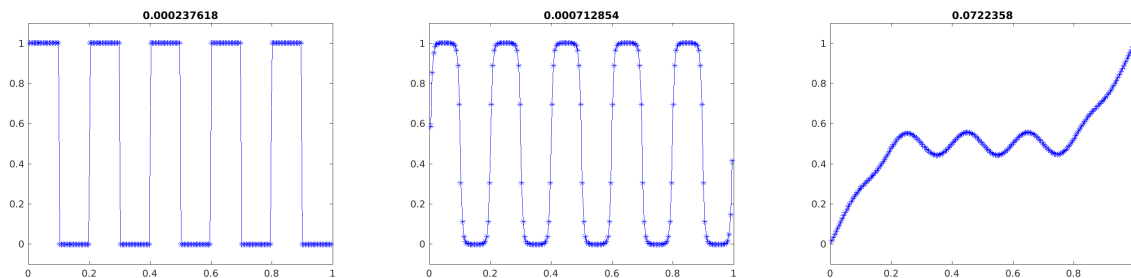


Figura 2.2: L'assenza di dispersività dello schema (2.8), messa in evidenza da un dato iniziale discontinuo.

In effetti, l'**assenza di carattere dispersivo** (derivate d'ordine dispari in spazio dominanti nell'errore di troncatura), che genererebbe delle oscillazioni (rapide) artificiali analoghe al fenomeno di Gibbs, in presenza di una soluzione iniziale discontinua, può osservarsi numericamente, come mostra la figura 2.2 (simulazione fatta con `../scripts/S014.m`).

2.5.3 Verifica dell'ordine di convergenza

Verifichiamo l'ordine di **precisione** in spazio dello schema ottenuto qui sopra, basandoci sulla conoscenza della soluzione stazionaria dell'equazione (2.2) su tutto \mathbb{R} (sezione 2.4). Partiamo dal dato iniziale:

$$\phi(t = 0, x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(\frac{x - 1/2}{10\epsilon} \right)$$

Sappiamo che la soluzione stazionaria dell'equazione (2.2) è della forma:

$$\phi_\infty(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{x-1/2}{\sqrt{2}\epsilon}\right)$$

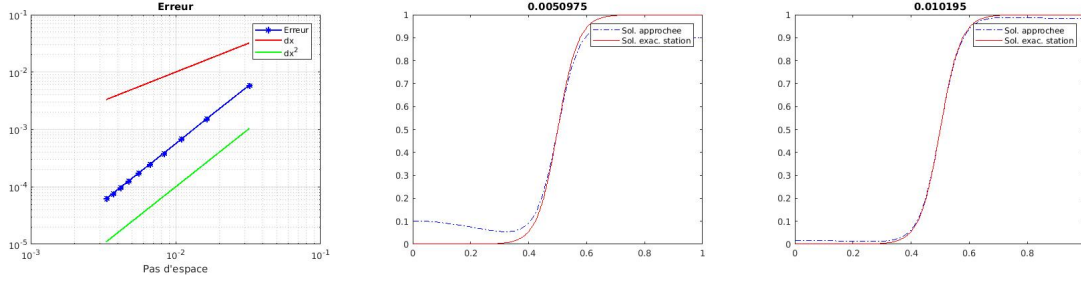


Figura 2.3: Verifica sperimentale della precisione dello schema (2.8)

Come previsto, un test numerico implementato nel codice `./scripts/S016.m` ponendo $\epsilon = 0.05$, $a_x = 0$, $b_x = 1$, $T = 10$, $\Delta t = \frac{0.48\Delta x^2}{\epsilon}$, mostra una convergenza d'**ordine quadratico** in Δx verso la soluzione ϕ_∞ , come mostra la figura 2.3 (abbiamo utilizzato la norma $\|\cdot\|_\infty$ per i vettori² e considerato che all'istante finale la soluzione approssimata possa essere considerata stazionaria).

2.5.4 Simulazione del caso 2D con splitting e condizioni di Dirichlet

Il metodo di **splitting** consiste nel calcolare in primo luogo la soluzione senza conservazione della massa, per imporla in seguito aggiungendo un moltiplicatore di Lagrange calcolato opportunamente (per più informazioni, consultare [30]).

Mostreremo, a titolo di esempio, nonostante si sia trattato anche il caso di condizioni al bordo di Neumann (si veda lo script `./scripts/S013.m`) il caso con condizioni di **Dirichlet omogenee**, che supporremo valere $\alpha \in [0, 1]$ sul bordo inferiore (il cui legame con le tensioni superficiali del problema (1.1) è stato ampiamente trattato in 2.4) e $\beta \in [0, 1]$ sul bordo superiore e zero sulle pareti laterali. Sotto queste condizioni, lo schema (2.8) può mettersi sotto una forma che ben si presta a essere utilizzata nel **metodo di Newton**, necessario vista la non linearità:

$$F_{\phi_n}(\phi^{n+1}) = M\phi^{n+1} - \phi^n - C_y V_b + \frac{\Delta t}{\epsilon} df(\phi^n, \phi^{n+1}) = 0 \quad (2.23)$$

ove M è una matrice triangolare per blocchi, costruita alla seguente maniera (prenderemo $C_x = \frac{\epsilon\Delta t}{\Delta x^2}$ et $C_y = \frac{\epsilon\Delta t}{\Delta y^2}$)

$$D = \begin{pmatrix} 1 + 2(C_x + C_y) & -C_y & 0 & \cdots & 0 \\ -C_y & 1 + 2(C_x + C_y) & -C_y & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & 1 + 2(C_x + C_y) & -C_y \\ 0 & \cdots & 0 & -C_y & 1 + 2(C_x + C_y) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{J \times J}$$

$$\text{e } E = -C_x \mathbb{I}_{J \times J} \quad \text{quindi} \quad M = \begin{pmatrix} D & E & 0 & \cdots & 0 \\ E & D & E & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & D & E \\ 0 & \cdots & 0 & E & D \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{IJ \times IJ}$$

²in tale contesto tutte le norme sono equivalenti.

con

$$V_b = \underbrace{(\alpha, 0, \dots, 0, \beta)}_{\in \mathbb{R}^J}, \alpha, 0, \dots, 0, \beta, \dots, \dots, \alpha, 0, \dots, 0, \beta) \in \mathbb{R}^{IJ} \quad (2.24)$$

che prende in conto le condizioni al bordo imposte.

L'idea alla base dell'algoritmo di Newton consiste nel linearizzare la funzione F_{ϕ^n} grazie alla sua jacobiana $\mathcal{J}F_{\phi^n}(\phi^{n+1}) \in \mathbb{R}^{IJ \times IJ}$. Il procedimento di risoluzione approssimata si scrive dunque come nell'Algoritmo 1:

```

V_0 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \phi_{i,j}^1;
for n=1:N-1 do
    tmp = \phi^n;
    err = 2*toll; // Permette di entrare nel ciclo
    while err > toll do
        diff = -\mathcal{J}F_{\phi^n}(tmp) \setminus F_{\phi^n}(tmp);
        err = \|diff\|;
        tmp = tmp + diff;
    end
    \phi^{n+1} = tmp;
    \lambda = \frac{1}{IJ} \left( V_0 - \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \phi_{i,j}^{n+1} \right);
    \phi^{n+1} = \phi^{n+1} + \lambda;
end

```

Algorithm 1: Algoritmo di Newton con splitting

Risultati numerici

Implementiamo l'Algoritmo 1 con la funzione (2.23) nello script `./scripts/S001.m` prendendo come parametri $I = 199$, $J = 99$, $a_x = 0 = a_y$, $b_x = 1$, $b_y = 0.5$, $\beta = 0$, $\epsilon = 0.01$, $T = 8$ e $N = 100$, variando α in maniera da osservare le differenti influenze del substrato:

- $\alpha = 0.2$ in figura 2.4, dove possiamo osservare un **comportamento idrofobo** del substrato, poiché l'angolo di Young è ottuso. In effetti, la relazione (2.7) prevede un angolo di contatto statico di $\theta \approx 140$ gradi;
- $\alpha = 0.5$ in figura 2.5, dove il **substrato è neutro** rispetto al liquido, essendo l'angolo al punto triplo retto (o quasi): teoricamente otteniamo esattamente $\theta = \frac{\pi}{2}$;
- $\alpha = 0.8$ in figura 2.6, dove osserviamo un **comportamento idrofilo** del substrato, poiché l'angolo di Young è acuto: la formula (2.7) dà $\theta \approx 38$ gradi.

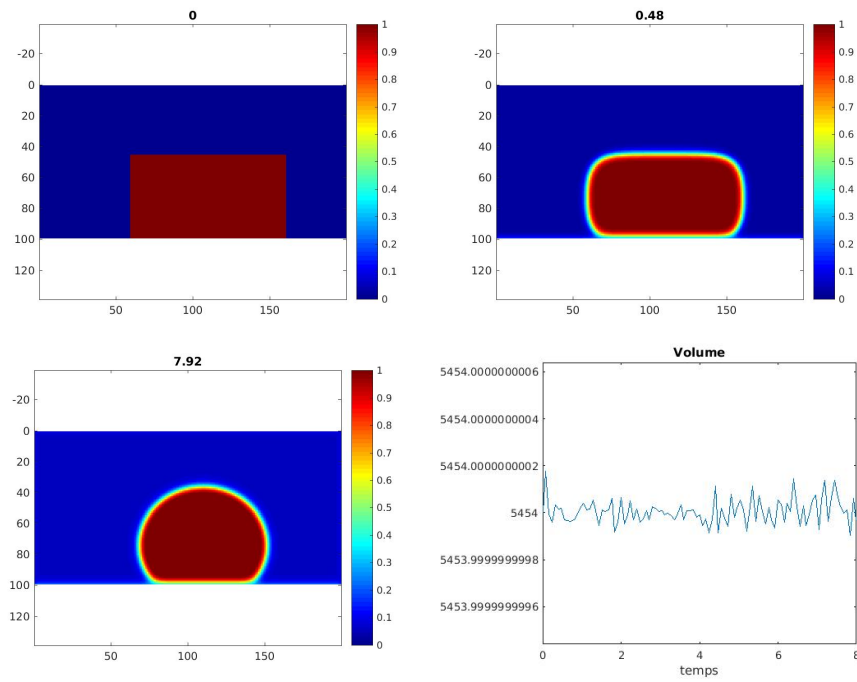


Figura 2.4: $\alpha = 0.2$. Evoluzione temporale della goccia

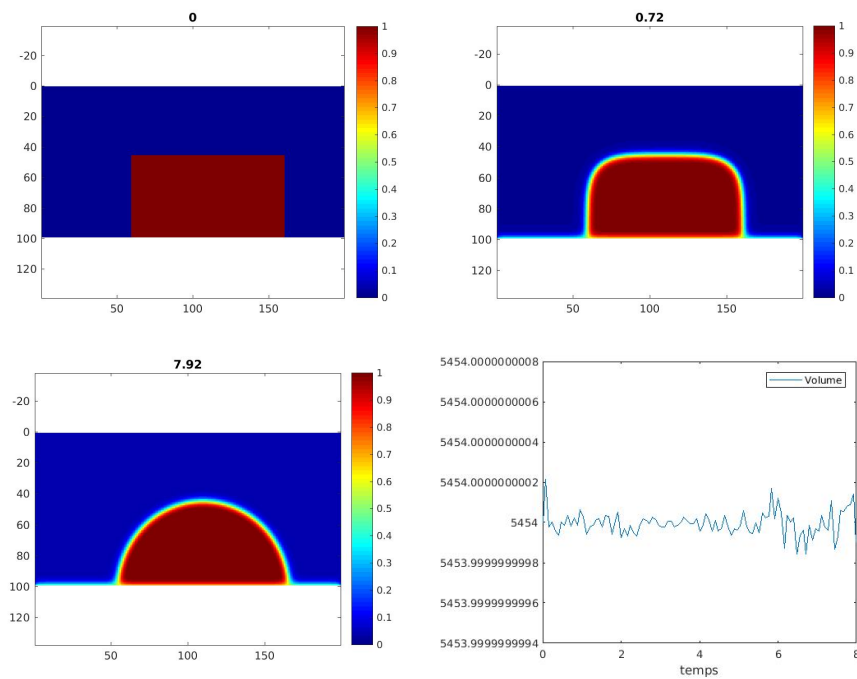


Figura 2.5: $\alpha = 0.5$. Evoluzione temporale della goccia

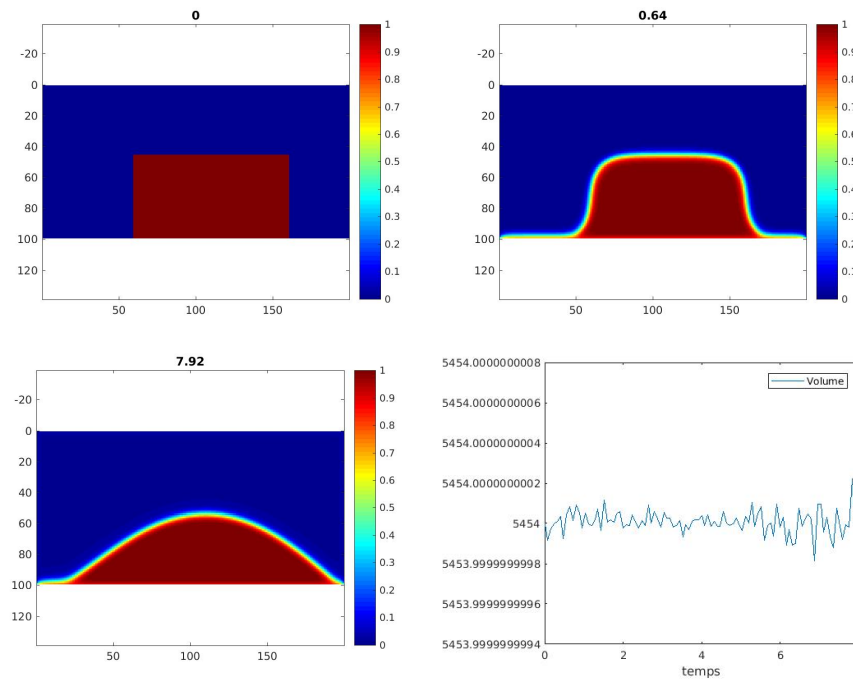


Figura 2.6: $\alpha = 0.8$. Evoluzione temporale della goccia

Inoltre questa simulazione offre due spunti di riflessione:

1. la **massa** del sistema è conservata correttamente grazie al moltiplicatore introdotto (osservare i diagrammi denominati «volume»);
2. per contro, osserviamo un fenomeno di **dispersione della massa** (soprattutto alle figura 2.4 et 2.5) nella fase gassosa ($\phi \simeq 0$ in blu scuro), il che significa che un moltiplicatore di Lagrange costante su tutto lo spazio costituisce una soluzione piuttosto grezza al problema della conservazione della massa: cercheremo di migliorare ciò nella sezione 2.6.5.

Osserviamo infine che gli angoli di contatto statico presentati nelle immagini qui sopra sono in **eccellente accordo** con la teoria, segno della bontà del procedimento sviluppato in 2.4.

2.6 Presa in conto d'un substrato a creste e della forza di gravità.

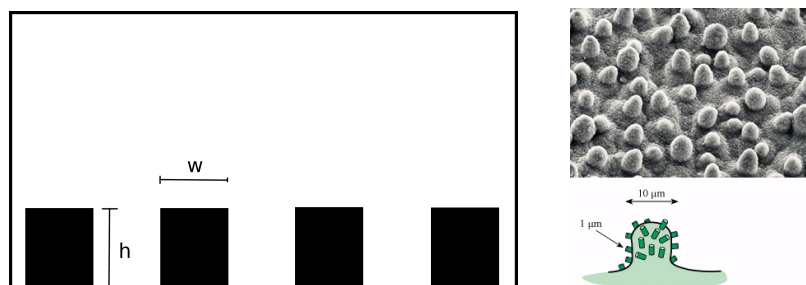


Figura 2.7: Il substrato a creste (a sinistra) e la superficie di una foglia di loto (immagine di destra)

L'obiettivo di questa parte del lavoro è di modellare la presenza di un substrato rugoso a creste (dove imporre una condizione di Dirichlet omogenea a α), il quale rappresenta in maniera semplificata la **microstruttura della foglia di loto** (vedesi figura 2.7). Prenderemo inoltre in conto gli effetti della **forza di**

gravità, di costante $\eta > 0$, considerando che il substrato sia inclinato di un angolo $\theta_p \in [0, \frac{\pi}{2}]$. A tale scopo, aggiungiamo alcuni termini all'energia $E(\phi)$ allo scopo, da una parte, di **penalizzare** i valori del parametro d'ordine differenti da α sul substrato³, e d'altra parte, di prendere in conto l'energia potenziale⁴ legata a η .

Sottolineiamo fin da subito che la presa in conto degli effetti della gravità sarà grossolana e intrinsecamente inesatta, poiché gli effetti della gravità si manifestano sulle **equazioni della dinamica del fluido** (equazioni di Navier-Stokes) e non sull'equazione che rende conto della miscela bi-fasica (equazione di Allen-Cahn). Di conseguenza, per rappresentare correttamente il fenomeno, occorre simulare il sistema accoppiato Allen-Cahn (o Cahn-Hilliard)/Navier-Stokes, come presentato, a titolo di esempio, nei lavori [32] e [8], che superano ampiamente gli scopi del presente lavoro.

Scriviamo quindi:

$$\begin{aligned}\tilde{E}(\phi) &= E(\phi) + \frac{1}{2\delta} \int_T (\phi - \alpha)^2 dx + \eta \int_{\Omega} \phi (y \cos \theta_p + x \sin \theta_p) dx \\ &= E(\phi) + \frac{1}{2\delta} \int_{\Omega} (\phi - \alpha)^2 \mathbb{I}_T dx + \eta \int_{\Omega} \phi (y \cos \theta_p + x \sin \theta_p) dx\end{aligned}\quad (2.25)$$

ove $0 < \delta \ll 1$ è un parametro di penalizzazione e $T \subset \Omega$ (da non confondere con il tempo $T > 0$) è il sottoinsieme aperto di Ω contenente il substrato.

Differenziando \tilde{E} secondo Gâteaux e inserendo nell'equazione del flusso di gradiente (1.5), una volta passati ad una formulazione classica, otteniamo una nuova equazione di Allen-Cahn:

$$\partial_t \phi(t, x) = \epsilon \Delta \phi(t, x) - \frac{1}{\epsilon} f'(\phi(t, x)) - \frac{1}{\delta} (\phi(t, x) - \alpha) \mathbb{I}_T(x) - \eta (y \cos \theta_p + x \sin \theta_p) \quad \text{per } (t, x) \in]0, T[\times \Omega \quad (2.26)$$

Imporremo le stesse condizioni al bordo della sezione 2.5.4. Per simulare questo nuovo sistema, adattiamo naturalmente lo schema numerico (2.23) aggiungendovi un termine della forma:

$$\dots + \frac{\Delta t}{\delta} (\phi^{n+1} - \alpha) \mathbb{I}_T(i\Delta x, j\Delta y) + \eta \Delta t (j\Delta y \cos \theta_p + i\Delta x \sin \theta_p)$$

il che è facile a realizzarsi e quindi ne ometteremo i dettagli.

Operiamo lo stesso splitting dell'Algoritmo 1, mentre la risoluzione del sistema lineare si farà grazie al comando `bicg` di MATLAB (consultare [3]), che effettua una risoluzione iterativa attraverso il metodo del gradiente bi-coniugato, che permette di velocizzare notevolmente i calcoli senza grandi perdite di precisione.

2.6.1 Risultati numerici

Il metodo numerico di cui sopra è implementato dal codice `../scripts/S002.m`, simulando con $a_x = 0$, $b_x = 1$, $a_y = 0$, $b_y = 0.5$, $\beta = 0$, $\eta = 0$, $T = 8$, $N = 300$, $I = 199$, $J = 99$, $w = 1/40$, $h = 0.05$, $\epsilon = 0.01$ e $\delta = 3 \cdot 10^{-16}$, utilizzando gli stessi valori di α della sezione 2.5.4, allo scopo di comparare i risultati.

Osserviamo che per delle ragioni legate alla **stabilità** dello schema, siamo stati obbligati a ridurre il passo di tempo, pensiamo a causa del metodo di splitting e dell'algoritmo di Newton. Questo è ad ogni modo compatibile con l'analisi di stabilità per argomento di energia fatta alla sezione 2.5.1, poiché essa suppone che la risoluzione del sistema non lineare si faccia esattamente e non prende in conto né la forza di gravità, né la penalizzazione. Abbiamo quindi:

- $\alpha = 0.2$ nella figura 2.8, dove osserviamo che le cavità **non sono umide**, il che significa che ci troviamo in uno stato chiamato di **Cassie-Baxter** in letteratura (si veda [1]);
- $\alpha = 0.5$ nella figura 2.9, dove al contrario le cavità sono **riempite**, trovandosi dunque nello stato di **Wenzel** (vedesi [2]);
- $\alpha = 0.8$ nella figura 2.10, dove il sistema è nello stato di **Wenzel**.

³il che verrà fatto grazie ad un termine quadratico, che è facilmente differenziabile;

⁴la cui espressione è un risultato della fisica classica;

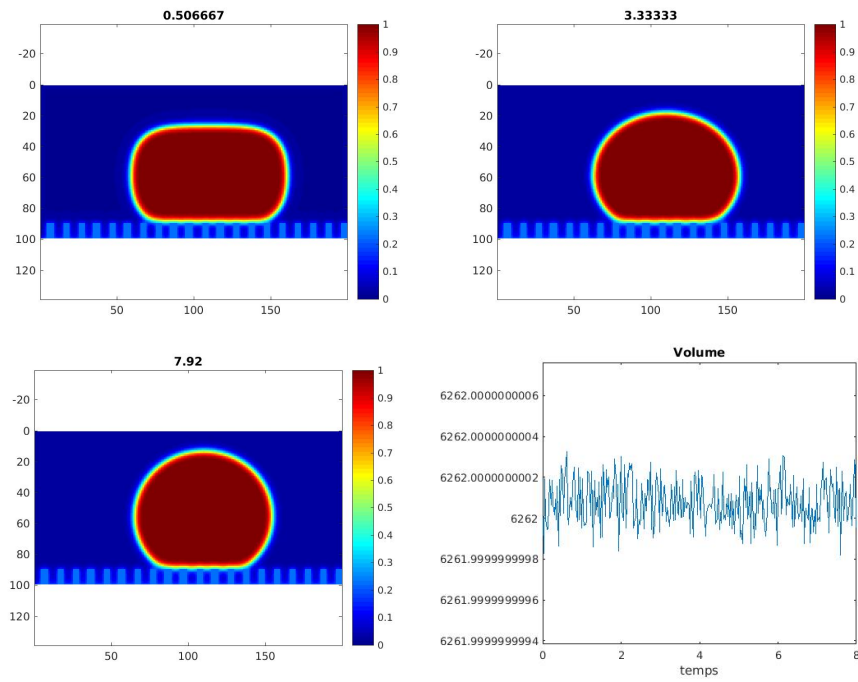


Figura 2.8: $\alpha = 0.2$. Le cavità del substrato sono vuote, quindi ci troviamo nello stato di Cassie-Baxter.

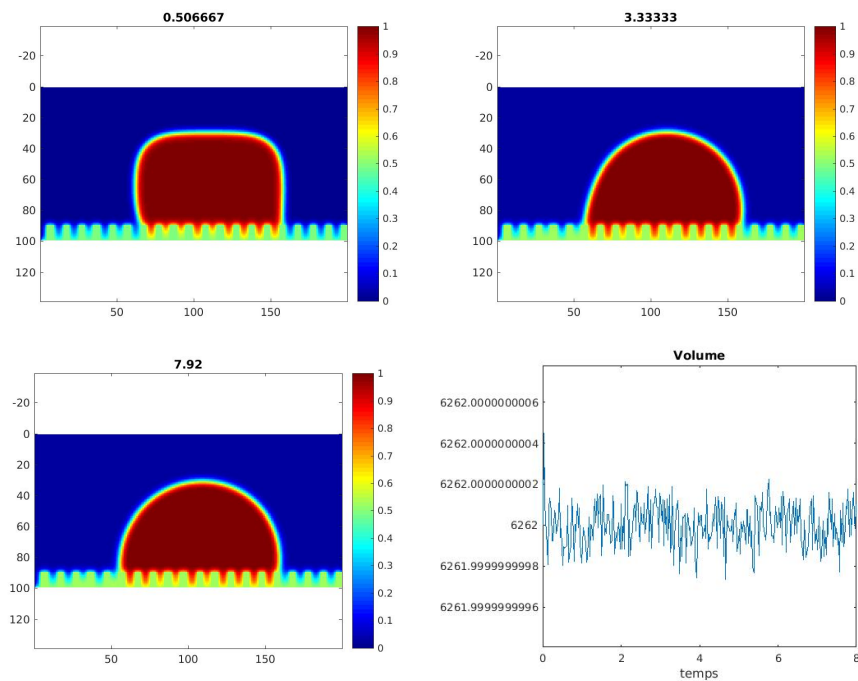


Figura 2.9: $\alpha = 0.5$. Le cavità del substrato sono umide, trovandoci quindi nello stato di Wenzel.

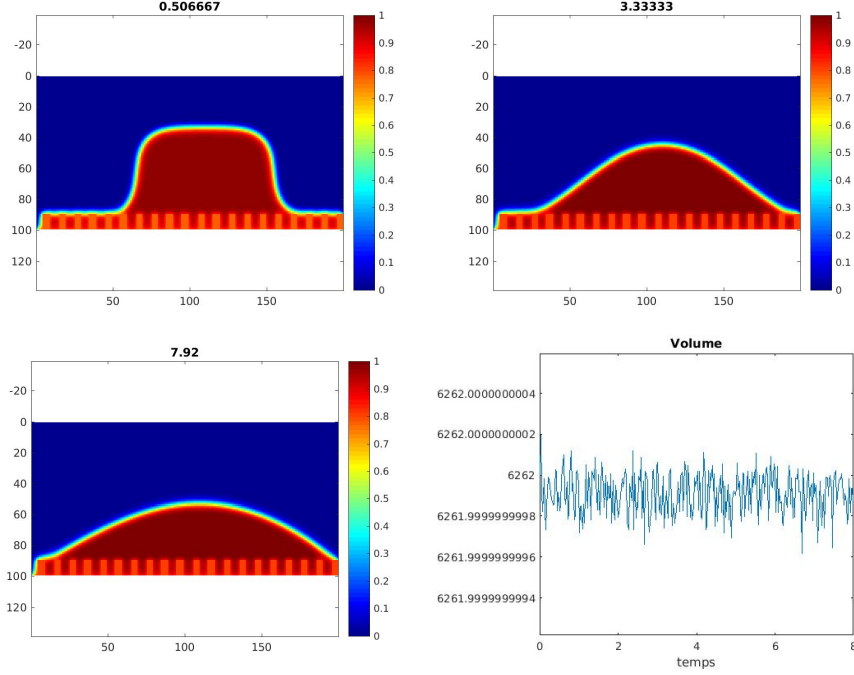


Figura 2.10: $\alpha = 0.8$. Le cavità del substrato sono umide, ci troviamo quindi nello stato di Wenzel.

Comparando le figure 2.4, 2.5 e 2.6, osserviamo che con queste proporzioni delle creste, **l'effetto del substrato è limitato**. Ciononostante, prestando maggiore attenzione, osserviamo una tendenza a un **aumento di idrofilia nel caso dello stato di Wenzel** (figura 2.9 e 2.10), il che è perfettamente compreso dalla teoria (si veda [2]). Al contrario, rimarchiamo una **idrofobia accentuata nel caso dello stato di Cassie-Baxter** (figura 2.8) (si veda [1]). D'altra parte, soprattutto nei casi intermedi ($\alpha \simeq 0.5$), la nostra maniera di conservare la massa tende a rendere meno precisa la procedura di penalizzazione: in effetti non vi è alcuna ragione di dover aggiungere/togliere della massa all'interno di T .

Di conseguenza, un miglioramento (sezione 2.6.4) possibile sarà non considerare le creste nel calcolo di λ e di non modificarvi il valore del parametro d'ordine.

2.6.2 Un risultato di convergenza della soluzione penalizzata

Cerchiamo di giustificare, in un contesto semplificato rispetto al problema della sezione precedente (condizioni ai limiti e stazionarietà), la **pertinenza del metodo di penalizzazione**. In particolare, sia $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio limitato e regolare e $T \subsetneq \Omega$ un sotto-insieme regolare. Poniamo:

$$(\mathcal{P}) : \begin{cases} -\Delta\phi = -\frac{1}{\epsilon^2}f'(\phi) = F(\phi) & \text{in } \Omega \setminus \overline{T} \\ \phi = 0 & \text{su } \partial\Omega \\ \phi = \alpha \in [0, 1] & \text{in } T \end{cases} \quad (\mathcal{P}_\delta) : \begin{cases} -\Delta\phi_\delta + \frac{1}{\epsilon\delta}(\phi_\delta - \alpha)\mathbb{I}_T = F(\phi_\delta) & \text{in } \Omega \\ \phi_\delta = 0 & \text{su } \partial\Omega \end{cases}$$

Mostriamo che da $(\phi_\delta)_\delta$ possiamo estrarre una sottosuccessione convergente in $L^2(\Omega)$ verso una funzione $\hat{\phi} \in H_0^1(\Omega)$ tale che essa sia soluzione del problema (\mathcal{P}) nel senso di L^2 , cioè quasi ovunque.

Dimostrazione dell'esistenza di una soluzione di (\mathcal{P}_δ) e stime a priori attraverso il teorema di Schauder

Fissiamo $w \in L^2(\Omega)$ e introduciamo il problema lineare in ϕ_δ :

$$(\tilde{\mathcal{P}}_\delta) : \begin{cases} -\Delta\phi_\delta + \frac{1}{\epsilon\delta}(\phi_\delta - \alpha)\mathbb{I}_T = F(w) & \text{in } \Omega \\ \phi_\delta = 0 & \text{su } \partial\Omega \end{cases}$$

Cerchiamo la sua soluzione, come è naturale che sia, in $H_0^1(\Omega)$, introducendo la formulazione variazionale associata a $(\tilde{\mathcal{P}}_\delta)$, per applicazione formale della formula di Green:

$$\text{Trovare } \phi_\delta \in H_0^1(\Omega) : \underbrace{\int_\Omega \nabla \phi_\delta \cdot \nabla v dx + \frac{1}{\epsilon\delta} \int_T \phi_\delta v dx}_{=a(\phi_\delta, v)} = \underbrace{\int_\Omega F(w) v dx + \frac{\alpha}{\epsilon\delta} \int_T v dx}_{=l(v)} \quad \forall v \in H_0^1(\Omega)$$

Mostriamo che tale formulazione variazionale rispetta le ipotesi del teorema di Lax-Milgram:

- $H_0^1(\Omega)$ dotato del prodotto scalare $(u, v)_{H_0^1(\Omega)} = \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v dx$ è uno spazio di Hilbert;
- $l(v)$ è una forma lineare definita su $H_0^1(\Omega)$, grazie alla linearità dell'interale di Lebesgue;
- $l(v)$ è continua su $H_0^1(\Omega)$, infatti

$$|l(v)| = \left| \int_\Omega F(w) v dx + \frac{\alpha}{\epsilon\delta} \int_T v dx \right| \leq C_p(\Omega) \left(\frac{C_1}{\epsilon^2} + \frac{\alpha}{\epsilon\delta} \right) \mathbf{m}_d(\Omega)^{\frac{1}{2}} \|v\|_{H_0^1(\Omega)} = C_2 \|v\|_{H_0^1(\Omega)}$$

grazie alla disuguaglianza di Cauchy-Schwarz, alla disuguaglianza di Poincaré e alle proprietà di f ;

- $a(u, v)$ è una forma bilineare definita su $H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega)$ per la linearità dell'operatore gradiente e dell'integrale di Lebesgue;
- $a(u, v)$ è continua su $H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega)$:

$$\begin{aligned} |a(u, v)| &= \left| \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v dx + \frac{1}{\epsilon\delta} \int_T uv dx \right| \leq \\ &\leq \left(1 + \frac{C_p(\Omega)^2}{\epsilon\delta} \right) \|u\|_{H_0^1(\Omega)} \|v\|_{H_0^1(\Omega)} = C_3 \|u\|_{H_0^1(\Omega)} \|v\|_{H_0^1(\Omega)} \end{aligned}$$

- $a(u, v)$ è coerciva su $H_0^1(\Omega)$:

$$a(u, u) = \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla u dx + \underbrace{\frac{1}{\epsilon\delta} \int_T u^2 dx}_{\geq 0} \geq \|u\|_{H_0^1(\Omega)}^2$$

Applicando il teorema di Lax-Milgram deduciamo che:

$$\begin{aligned} \exists! \phi_\delta \in H_0^1(\Omega) \quad \text{soluzione del problema variazione di cui sopra e} \\ \exists C_4 > 0 : \|\phi_\delta\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C_4 \|F(w)\|_{L^2(\Omega)} \leq C_5 > 0 \end{aligned} \quad (2.27)$$

Di conseguenza, possiamo definire la mappa Θ come segue:

$$\begin{aligned} \Theta: L^2(\Omega) &\rightarrow L^2(\Omega) \\ w &\mapsto \phi_\delta = \Theta(w) \end{aligned}$$

ove ϕ_δ è soluzione di (\mathcal{P}_δ) . Introduciamo il **teorema di Schauder** nella forma seguente (si veda [39] o [15] per forme analoghe):

Teorema 8 (di Schauder). *Sia X uno spazio di Banach e:*

1. $A \subset X$ chiuso e convesso;
2. $\Theta: A \rightarrow A$ un operatore continuo;
3. $\overline{\Theta(A)}$ è compatto in X ;

allora Θ ammette punto fisso in A .

Verifichiamo che il nostro caso rientra pienamente nella ipotesi di tale teorema, il che permette di concludere sull'esistenza di almeno una soluzione del problema (\mathcal{P}_δ) . Consideriamo $X = A = L^2(\Omega)$, dunque:

- A è chiuso come conseguenza diretta del fatto che è uno spazio di Hilbert. Inoltre X è evidentemente uno spazio di Banach;
- A è convesso⁵, infatti siano $u, v \in A$ e $\tau \in [0, 1]$, allora

$$\begin{aligned} \|\tau u + (1 - \tau)v\|_A^2 &= \int_{\Omega} |\tau u + (1 - \tau)v|^2 dx \leq \tau^2 \|u\|_A^2 + (1 - \tau)^2 \|v\|_A^2 + 2\tau(1 - \tau) \int_{\Omega} |u||v| dx \leq \\ &\leq \tau^2 \|u\|_A^2 + (1 - \tau)^2 \|v\|_A^2 + 2\tau(1 - \tau) \|u\|_A \|v\|_A < +\infty \end{aligned}$$

- Θ è continuo su A , infatti, si $(w_n)_{n \in \mathbb{N}} \in A^{\mathbb{N}} : w_n \rightarrow w$ in A . Definiamo la funzione $\pi = \Theta(w_n) - \Theta(w) \in H_0^1(\Omega)$ tale che:

$$-\Delta \pi + \frac{1}{\epsilon \delta} (\pi - \alpha) \mathbb{I}_T = F(w_n) - F(w) \quad \text{in } \Omega$$

Per il teorema del valore medio (o dell'incremento finito, in oltralpe), sappiamo che $\exists \tilde{w} \in]w, w_n[$ tale che, grazie anche alle ipotesi su f :

$$F(w_n) - F(w) = F'(\tilde{w})(w_n - w) \leq M(w_n - w) \quad \text{con } M > 0$$

Utilizzando la stima (2.27), deduciamo finalmente che:

$$0 \leq \|\Theta(w_n) - \Theta(w)\|_A \leq MC_5 \|w_n - w\|_A \rightarrow 0$$

- $\overline{\Theta(A)}$ è compatto in X poiché $\Theta(A)$ è a chiusura compatta grazie alla stima (2.27).

Dunque il teorema di Schauder garantisce l'esistenza di una soluzione $\phi_\delta \in H_0^1(\Omega)$ di (\mathcal{P}_δ) che verifica la stima (2.27).

Dimostrazione dell'esistenza di una soluzione di (\mathcal{P}_δ) e stime a priori attraverso il metodo diretto del Calcolo delle Variazioni

Poniamo $\eta = 0$ e consideriamo il funzionale di energia $\tilde{E}(\phi)$. Poiché tale funzionale abbia senso, è necessario che $\phi \in H^1(\Omega) \cap L^4(\Omega)$ ma il Teorema 5 stabilisce che se $d < 4$, cioè in particolare per $d = 2, 3$ l'iniezione $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^4(\Omega)$ è continua e compatta, dunque prenderemo semplicemente $\phi \in H^1(\Omega)$.

In effetti, la soluzione del problema (\mathcal{P}_δ) non è altro che il minimizzatore del funzionale \tilde{E} sullo spazio $H_0^1(\Omega)$, dunque riscriviamo il problema sotto la forma:

$$\phi_\delta = \arg \inf_{\phi \in H_0^1(\Omega)} \tilde{E}(\phi)$$

Procediamo secondo il **Metodo diretto del Calcolo delle Variazioni**:

1. mostriamo che \tilde{E} è limitato inferiormente: sia $\phi \in H_0^1(\Omega)$, allora:

$$\tilde{E}(\phi) = \underbrace{\frac{\epsilon}{2} \int_{\Omega} |\nabla \phi|^2 dx}_{\geq 0} + \underbrace{\frac{1}{\epsilon} \int_{\Omega} f(\phi) dx}_{\geq 0} + \underbrace{\frac{1}{2\delta} \int_T (\phi - \alpha)^2 dx}_{\geq 0} \geq 0$$

Ne deduciamo che esiste $m = \inf_{\phi \in H_0^1(\Omega)} \tilde{E}(\phi)$;

⁵inoltre ogni spazio di Hilbert è uniformemente convesso.

2. sia $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}} \in (H_0^1(\Omega))^{\mathbb{N}}$ una successione minimizzante per \tilde{E} , il che significa che $\lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{E}(\phi_n) = m$. Mostriamo che se $(\tilde{E}(\phi_n))_{n \in \mathbb{N}}$ è limitata per la topologia dei numeri reali, allora $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ è limitata per la topologia di $H_0^1(\Omega)$.

In effetti, per il Lemma 2, se $\tilde{E}(\phi_n) < +\infty$, segue che:

$$|\nabla \phi_n| < +\infty \quad |\phi_n| < +\infty \quad \text{quasi ovunque in } \Omega$$

il che implica:

$$\|\phi_n\|_{H_0^1(\Omega)}^2 < +\infty$$

Dunque $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ è limitata per la topologia di $H_0^1(\Omega)$.

Il **teorema di immersione di Sobolev** (Teorema 5) permette di concludere che esiste una sottosuccessione estratta, che chiameremo $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ tale che:

$$\phi_n \rightarrow \tilde{\phi} \quad \text{in } L^4(\Omega) \quad (2.28)$$

$$\phi_n \rightharpoonup \tilde{\phi} \quad \text{in } H_0^1(\Omega) \quad (2.29)$$

Il fatto che il limite sia lo stesso (nel senso di L^2) per entrambe le topologie è diretta conseguenza del **teorema di rappresentazione di Riesz** (Teorema 2): osserviamo in via preliminare che essendo Ω limitato, si ha che $L^4(\Omega) \subset L^2(\Omega)$, dunque la convergenza forte ha luogo anche in quest'ultimo, che è anche uno spazio di Hilbert. Supponiamo infatti che la prima convergenza sia verso un limite $\tilde{\phi}_1$ e che la seconda sia verso $\tilde{\phi}_2$ a priori differenti. Consideriamo $\xi \in L^2(\Omega)$ e definiamo l'applicazione:

$$l_\xi(v) = \int_{\Omega} \xi v dx \quad \text{con } v \in H_0^1(\Omega)$$

lineare e continua, poiché, per la diguaglianza di Poincaré (Teorema 3) e la diguaglianza di Cauchy-Schwarz:

$$|l_\xi(v)| \leq C_p \|\xi\|_{L^2(\Omega)} \|v\|_{H_0^1(\Omega)}$$

Quindi per il teorema di rappresentazione di Riesz (Teorema 2) $\exists! \zeta \in H_0^1(\Omega)$ tale che:

$$l_\xi(v) = (v, \zeta)_{H_0^1(\Omega)} \quad \forall v \in H_0^1(\Omega)$$

Possiamo dunque dedurre che:

$$l_\xi(\phi_n) = (\phi_n, \zeta)_{H_0^1(\Omega)} \rightarrow (\tilde{\phi}_1, \zeta)_{H_0^1(\Omega)} = l_\xi(\tilde{\phi}_1)$$

$$l_\xi(\phi_n) = (\phi_n, \zeta)_{L^2(\Omega)} \rightarrow (\tilde{\phi}_2, \zeta)_{L^2(\Omega)} = l_\xi(\tilde{\phi}_2)$$

e sottraendo, per linearità, si ottiene:

$$l_\xi(\tilde{\phi}_1 - \tilde{\phi}_2) = 0 = \int_{\Omega} \xi(\tilde{\phi}_1 - \tilde{\phi}_2) dx \quad \forall \xi \in L^2(\Omega)$$

Prendendo $\xi = \tilde{\phi}_1 - \tilde{\phi}_2$ si arriva all'uguaglianza $\tilde{\phi}_1 = \tilde{\phi}_2$ quasi ovunque in Ω .

3. mostriamo che $\tilde{\phi}$ realizza il minimo m :

- Per la convergenza debole di (2.28) deduciamo che

$$\|\tilde{\phi}\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \liminf_{n \rightarrow +\infty} \|\phi_n\|_{H_0^1(\Omega)}$$

- per la convergenza forte di (2.28), otteniamo

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \int_{\Omega} \underbrace{\phi_n^2 (1 - \phi_n)^2}_{=f(\phi_n)} \cdot \underbrace{1}_{\in L^4(\Omega)} dx = \int_{\Omega} f(\tilde{\phi}) dx$$

- poiché Ω è limitato, $L^4(\Omega) \subset L^2(\Omega)$, indi la convergenza forte di (2.28) ha luogo anche in $L^2(\Omega)$, ragion per la quale:

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \int_T (\phi_n - \alpha)^2 dx = \int_T (\tilde{\phi} - \alpha)^2 dx$$

Tutte queste osservazioni implicano che:

$$\tilde{E}(\tilde{\phi}) \leq \liminf_{n \rightarrow +\infty} \tilde{E}(\phi_n) = m$$

La prova dell'esistenza di un minimizzatore e quindi d'una soluzione di (\mathcal{P}_δ) è quindi completa.

Dimostrazione delle proprietà di convergenza

Consideriamo ora la formulazione variazionale associata al problema (\mathcal{P}_δ) , analoga a quella di $(\tilde{\mathcal{P}}_\delta)$, che si mette sotto la forma:

$$\text{Trovare } \phi_\delta \in H_0^1(\Omega) : \int_\Omega \nabla \phi_\delta \cdot \nabla v dx + \frac{1}{\epsilon \delta} \int_T (\phi_\delta - \alpha) v dx = \int_\Omega F(\phi_\delta) v dx \quad \forall v \in H_0^1(\Omega)$$

Dal momento che la funzione $\phi_\delta - \alpha \in H_0^1(\Omega)$, poniamo $v = \phi_\delta - \alpha$, ottenendo:

$$\frac{1}{\delta} \|\phi_\delta - \alpha\|_{L^2(T)}^2 = -\epsilon \|\phi_\delta\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \epsilon \int_\Omega F(\phi_\delta - \alpha) \phi_\delta dx - \alpha \epsilon \int_\Omega F(\phi_\delta - \alpha) dx \leq \quad (2.30)$$

$$\leq \left(\frac{C_p(\Omega) C_1 C_4}{\epsilon} + \alpha \epsilon C_6 \right) \mathbf{m}_d(\Omega)^{\frac{1}{2}} = C_7 > 0 \quad (2.31)$$

Poichè vale la stima (2.27), possiamo estrarre da ϕ_δ una sottosuccessione convergente debolmente in $H_0^1(\Omega)$, dalla quale a sua volta, per applicazione del **teorema di Rellich** (Teorema 4), possiamo estrarre una sottosuccessione (che indicheremo alla stessa maniera per semplificare la notazione), che converge fortemente in $L^2(\Omega)$:

$$\begin{aligned} \phi_\delta &\rightharpoonup \tilde{\phi} && \text{in } L^2(\Omega) \\ \phi_\delta &\rightarrow \tilde{\phi} && \text{in } H_0^1(\Omega) \end{aligned}$$

Grazie alla stima (2.30), deduciamo che:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \|\phi_\delta - \alpha\|_{L^2(T)}^2 = 0 = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[\|\phi_\delta\|_{L^2(T)}^2 + \|\alpha\|_{L^2(T)}^2 - 2(\phi_\delta, \alpha)_{L^2(T)} \right] = \|\tilde{\phi} - \alpha\|_{L^2(T)}^2$$

Finalmente concludiamo che:

$$\tilde{\phi} = \alpha \quad \text{quasi ovunque in } T \quad (2.32)$$

Passiamo ora a dimostrare la validità di alcune proprietà su $\Omega \setminus \bar{T}$, che è un aperto regolare. In effetti, se ϕ_δ è soluzione del problema (\mathcal{P}_δ) , è evidente che valgano:

$$\begin{cases} -\Delta \phi_\delta = F(\phi_\delta) & \text{in } \Omega \setminus \bar{T} \\ \phi_\delta = 0 & \text{su } \partial\Omega \end{cases}$$

Osserviamo che poiché $\phi_\delta \rightarrow \tilde{\phi}$ in $L^2(\Omega)$ e abbiamo appena mostrato che $\phi_\delta \rightarrow \tilde{\phi} = \alpha$ in $L^2(T)$, segue che $\phi_\delta \rightarrow \tilde{\phi}$ in $L^2(\Omega \setminus \bar{T})$. Di conseguenza, considerando una funzione regolare $v \in C_c^\infty(\Omega \setminus \bar{T})$ possiamo scrivere (osservando che la sua derivata normale su $\partial(\Omega \setminus \bar{T})$ è nulla):

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega \setminus \bar{T}} \nabla \tilde{\phi} \cdot \nabla v dx &= - \int_{\Omega \setminus \bar{T}} \tilde{\phi} \Delta v dx + \int_{\partial(\Omega \setminus \bar{T})} \frac{\partial v}{\partial n} \tilde{\phi} dS = - \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\Omega \setminus \bar{T}} \phi_\delta \Delta v dx = \\
&= \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\Omega \setminus \bar{T}} \nabla \phi_\delta \cdot \nabla v dx = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[- \int_{\Omega \setminus \bar{T}} \Delta \phi_\delta v dx + \int_{\partial(\Omega \setminus \bar{T})} \frac{\partial \phi_\delta}{\partial n} v dS \right] = \\
&= \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\Omega \setminus \bar{T}} F(\phi_\delta) v dx = \int_{\Omega \setminus \bar{T}} F(\tilde{\phi}) v dx = \int_{\Omega \setminus \bar{T}} \Delta \tilde{\phi} v dx
\end{aligned}$$

Se supponiamo che $\tilde{\phi} \in H^2(\Omega)$, possiamo dedurre che:

$$-\Delta \tilde{\phi} = F(\tilde{\phi}) \quad \text{quasi ovunque in } \Omega \setminus \bar{T} \quad (2.33)$$

Abbiamo dunque mostrato, grazie alle proprietà (2.32) e (2.33), che possiamo estrarre una sottosuccessione convergente nel senso di $L^2(\Omega)$ verso un limite che è soluzione di (\mathcal{P}) .

Facciamo due osservazioni importanti su quanto appena visto:

- vista la non-linearità del problema, l'esistenza e (soprattutto) l'unicità non sono scontate, tanto che abbiamo provato solo l'esistenza della soluzione ;
- alla stessa maniera, è difficile mostrare delle stime di velocità di convergenza del problema penalizzato, poiché tali stime si reggono spesso sulla proprietà di coercività di una forma bilineare. Nel nostro caso non abbiamo a che fare né con una forma bilineare, né con una forma coerciva (almeno in generale). Per completezza, segnaliamo che normalmente in tali casi la stima fornisce una convergenza $O(\delta^{\frac{1}{2}})$ in norma $H_0^1(\Omega)$ (si veda per esempio [6]).

2.6.3 Sulla velocità di convergenza della soluzione penalizzata

Nella sezione precedente abbiamo sottolineato la difficoltà nell'ottenere delle stime della velocità di convergenza della soluzione penalizzata verso la soluzione esatta. Per tale motivo cerchiamo ora di trovare una possibile risposta al problema attraverso una verifica numerica.

Calcoliamo la differenza in norma quadratica su T tra la soluzione esatta e quella approssimata, cioè:

$$\|\phi_\delta - \alpha\|_{L^2(T)} = \sqrt{\int_T |\phi_\delta - \alpha|^2 dx} \simeq \sqrt{\sum_{i,j} \Delta x \Delta y |\phi_{i,j} - \alpha|^2 \mathbb{1}_T(x_i, y_j)} \quad (2.34)$$

Utilizzando la stessa discretizzazione di 2.6.1 e facendo variare il parametro δ per calcolare l'errore (2.34) sulla soluzione giunta in regime stazionario, otteniamo la seguente curva log-log della figura 2.11 (ottenuta grazie al codice `./scripts/S017.m`).

Sembrirebbe molto difficile trovare una relazione semplice, per esempio polinomiale, tra l'errore in norma quadratica e il parametro di penalizzazione δ , il che potrebbe essere la conferma dell'impossibilità - o quanto meno della grande difficoltà - nel trovare una stima teorica della velocità di convergenza.

Nonostante ciò, si tratta di un risultato molto interessante, che ci segnala il fatto che la precisione di tale approssimazione tende a saturare, nel nostro caso verso $\delta \approx 10^{-4}$, cioè che a partire di tale soglia, ridurre il parametro di penalizzazione non consente di guadagnare precisione.

2.6.4 Un miglioramento in termini di conservazione della massa

Come sottolineato poco fa, possiamo evitare di considerare il substrato rugoso nel bilancio della massa, poiché esso è mantenuto fisso. Di conseguenza modifichiamo l'Algoritmo 1 ottenendo 2, ove $N_T \in \mathbb{N}$ indica il numero di punti discretizzati che si trovano all'interno di substrato T .

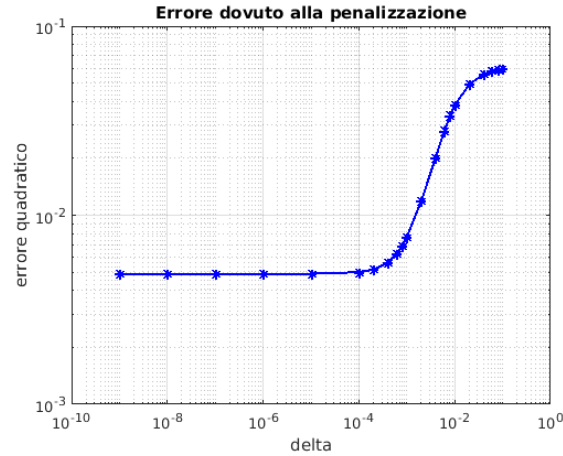


Figura 2.11: Verifica sperimentale dell'ordine di convergenza della soluzione penalizzata.

```

V0 = ∑Ω∖T φi,j1;
for n=1:N-1 do
    tmp = φn;
    err = 2·toll; // Per entrare nel ciclo
    while err > toll do
        diff = -JFφn(tmp)\Fφn(tmp);
        err = ||diff||;
        tmp = tmp + diff;
    end
    φn+1 = tmp;
    λ =  $\frac{1}{IJ-N_T} (V_0 - \sum_{\Omega \setminus T} \phi_{i,j}^{n+1})$ ;
    φn+1 = φn+1 + λIΩ∖T;
end

```

Algorithm 2: Algoritmo di Newton con splitting e conservazione della massa migliorata.

Risultati numerici

Implementiamo il nuovo algoritmo 2 attraverso il codice `../scripts/S003.m`, con gli stessi parametri di 2.6.1, soltanto nel caso di $\alpha = 0.5$, che ci pare essere la casistica nella quale il problema è più grave.

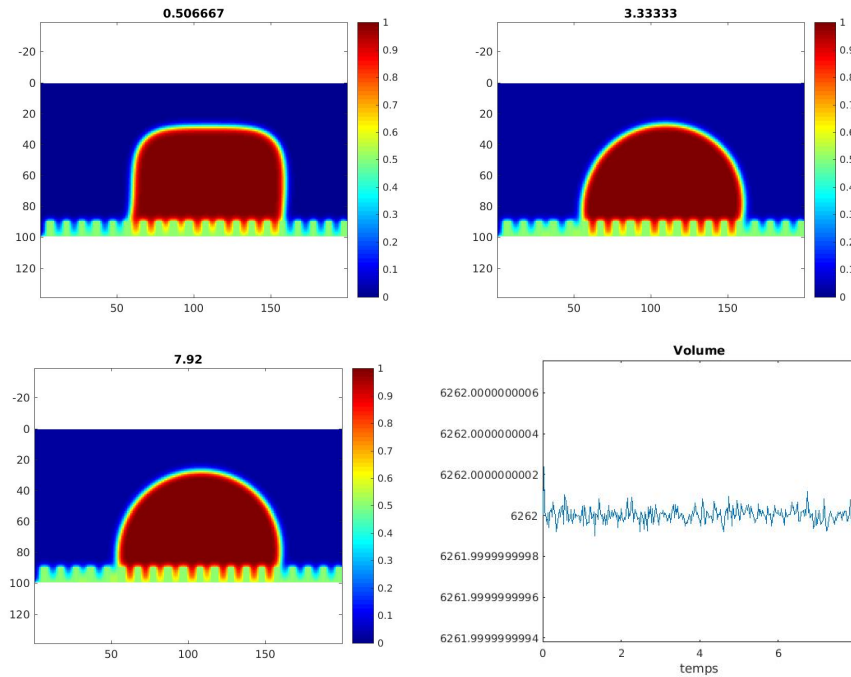


Figura 2.12: Goccia nel caso $\alpha = 0.5$, simulata grazie all'algoritmo 2

In tutta onestà, il miglioramento apportato è piuttosto deludente, dal momento che non vi è differenza netta tra la figura 2.9 e la figura 2.12, segno che il problema più importante in termini di conservazione della massa attraverso l'uso d'un moltiplicatore di Lagrange è legato al **carattere globale** di λ , che in effetti è calcolato come una somma.

Inoltre, la precisione nella rappresentazione del substrato è intrinsecamente limitata dall'approccio per penalizzazione, il quale, benché semplice, è ben lontano dall'essere la soluzione migliore.

2.6.5 Un'altra miglioria nella conservazione della massa: un moltiplicatore locale-globale

Poco fa abbiamo sottolineato i limiti di un moltiplicatore di Lagrange come quello dell'equazione (2.3), che possono essere superati attraverso una forma **locale-globale** di moltiplicatore λ come quella presentata in [9], riscrivendo quindi l'equazione di Allen-Cahn sotto la forma:

$$\begin{aligned} \partial_t \phi(t, x) &= \epsilon \Delta \phi(t, x) - \frac{1}{\epsilon} f'(\phi(t, x)) + \chi(t) \sqrt{f(\phi(t, x))} - \frac{1}{\delta} (\phi(t, x) - \alpha) \mathbb{I}_T(x) - \eta (y \cos \theta_p + x \sin \theta_p) \\ &\text{per } (t, x) \in]0, T[\times \Omega \end{aligned} \tag{2.35}$$

con $\chi(t) = \frac{\int_{\Omega} f'(\phi) dx}{\epsilon \int_{\Omega} \sqrt{f(\phi)} dx}$ parte globale del moltiplicatore e che indicheremo come $\tilde{\lambda}$. Per semplicità, porremo $\sqrt{f(\phi)} = g(\phi) = \phi(1 - \phi)$, grazie al fatto che $\phi \in [0, 1]$. Come si può osservare guardando la forma del termine locale, le fasi pure non saranno toccate in quanto annullano il termine g , mentre la transizione della miscela verso quest'ultime sarà ulteriormente favorita.

Continueremo ad adoperare lo splitting suggerito da [30], il che significa che il metodo di Newton non farà altro che approssimare l'equazione (2.26) (dove la massa non si conserva). Più precisamente, a livello formale:

$$\partial_t \phi(n \Delta t, i \Delta x, j \Delta y) \approx \frac{\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{\phi_{i,j}^{n+1} - \tilde{\phi}_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} + \frac{\tilde{\phi}_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n}{\Delta t}$$

dunque:

- $\tilde{\phi}^{n+1}$ sarà soluzione del problema $F_{\phi^n}(\tilde{\phi}^{n+1}) = 0$ ove F_{ϕ^n} è la stessa della sezione 2.6.4 per il metodo di Newton;
- ϕ^{n+1} tale che $\phi_{i,j}^{n+1} = \tilde{\phi}_{i,j}^{n+1} + \Delta t \tilde{\lambda} g(\tilde{\phi}_{i,j}^{n+1})$, con $\tilde{\lambda}$ calcolato per avere la conservazione della massa (senza includere il substrato):

$$\tilde{\lambda} = \frac{\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J [(\phi_{i,j}^1 - \tilde{\phi}_{i,j}^{n+1})(1 - \mathbb{I}_T(x_i, y_j))]}{\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J [g(\tilde{\phi}_{i,j}^{n+1})(1 - \mathbb{I}_T(x_i, y_j))]}$$

Finalmente, l'Algoritmo 3 dà la soluzione:

```

for  $n=1:N-1$  do
  tmp =  $\phi^n$ ;
  err = 2*toll; // Per entrare nel ciclo
  while  $err > toll$  do
    diff =  $-\mathcal{J}F_{\phi^n}(\text{tmp}) \setminus F_{\phi^n}(\text{tmp})$ ;
    err =  $\|\text{diff}\|$ ;
    tmp = tmp + diff;
  end
   $\phi^{n+1} = \text{tmp}$ ;
   $\tilde{\lambda} = \frac{\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J [(\phi_{i,j}^1 - \tilde{\phi}_{i,j}^{n+1})(1 - \mathbb{I}_T(x_i, y_j))]}{\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J [g(\tilde{\phi}_{i,j}^{n+1})(1 - \mathbb{I}_T(x_i, y_j))]}$ ;
   $\phi^{n+1} = \phi^{n+1} + \Delta t \tilde{\lambda} g(\phi^{n+1}) \mathbb{I}_{\Omega \setminus T}$ ;
end

```

Algorithm 3: Algoritmo di Newton con splitting e moltiplicatore locale-globale.

Risultati numerici

Come alla sezione 2.6.4, ci limitiamo a trattare il caso $\alpha = 0.5$ con gli stessi parametri, in maniera da studiare un eventuale miglioramento. L'algoritmo è implemetato in `./scripts/S004.m` dà il risultato della figura 2.13. La differenza evidente rispetto alla figura 2.12 è la seguente: la fase gassosa resta veramente a $\phi = 0$, segno che il carattere locale del moltiplicatore aiuta a ritoccare la massa dove serve. Inoltre questo spiega il fatto che la goccia sia più grande, in quanto non abbiamo dispersione di massa nello spazio.

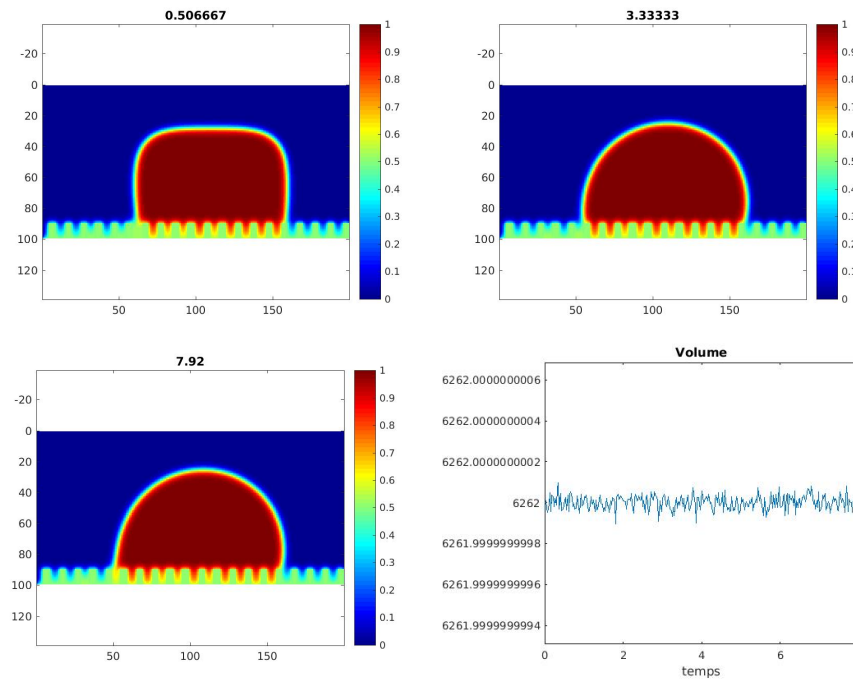


Figura 2.13: Simulazione della goccia con $\alpha = 0.5$ e moltiplicatore di Lagrange locale-globale di [9].

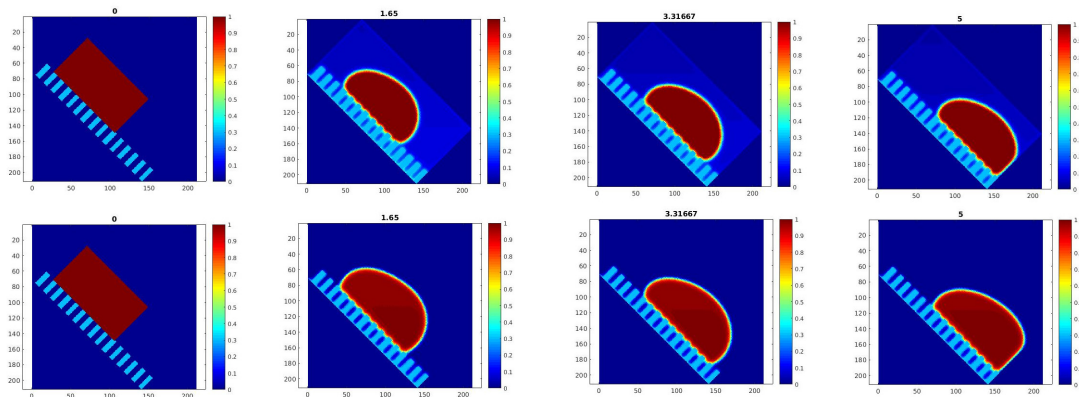


Figura 2.14: Test comparativo tra l'Algorithm 2 (in alto) e 3 (in basso) con substrato idrofobo.

La differenza diventa ancora più marcata in seguito all'introduzione della forza di gravità e dell'inclinazione del substrato: senza dettagliare le condizioni della simulazione, questo può osservarsi alla figura 2.14, dove compariamo una simulazione fatta con l'algorithm 2 con quella ottenuta grazie a 3.

In ultima analisi, osserviamo una goccia dalla **dinamica molto «rigida»** (se fosse umana la definiremmo «dinocolata»), contrariamente a quanto osserviamo in natura. Questo è conseguenza diretta della postilla di 2.6: per osservare una dinamica realistica, occorrerebbe simulare il **sistema accoppiato Allen-Cahn/Navier-Stokes**.

2.6.6 Ruolo dei parametri di forma del substrato e della gravità

Ora che l'algorithm numerico della sezione 2.6.5 sembra sufficientemente performante⁶, passiamo a uno studio sistematico dell'**influenza dei differenti parametri fisici e geometrici** del sistema sul comportamento

⁶nonostante restino dei problemi di stabilità;

della goccia di liquido.

Gravità

Se simulassimo⁷ con gli stessi dati della sezione 2.5.4, i tre casi $\alpha = 0.2, 0.5, 0.8$, prendendo in conto la gravità, imponendo $\eta = 10$, vedremmo che il suo effetto consiste nel cambiare la forma della goccia, in particolare a **schiacciarla** contro il substrato.

D'altra parte la gravità permette di effettuare una transizione tra lo **stato di Cassie-Baxter** e lo **stato di Wenzel**: per osservare ciò è necessario porsi ad una condizione limite tra i due, poiché il nostro schema non è stabile quando η diventa troppo grande, ragion per la quale deve essere sufficiente una gravità debole per fare la transizione. Mettiamoci nello stesso contesto della sezione 2.5.4, ma con $\alpha = 0.4$, che si rivela adatto alla luce del criterio descritto qui sopra. Simuliamo con `../scripts/S004.m`, ottenendo:

- $\eta = 0$, in figura 2.15, dove osserviamo che le cavità sono a secco, quindi ci troviamo nello **stato di Cassie-Baxter** ;
- $\eta = 10$, in figura 2.16, dove dopo un certo tempo, le cavità sono bagnate, quindi siamo passati allo **stato di Wenzel**.

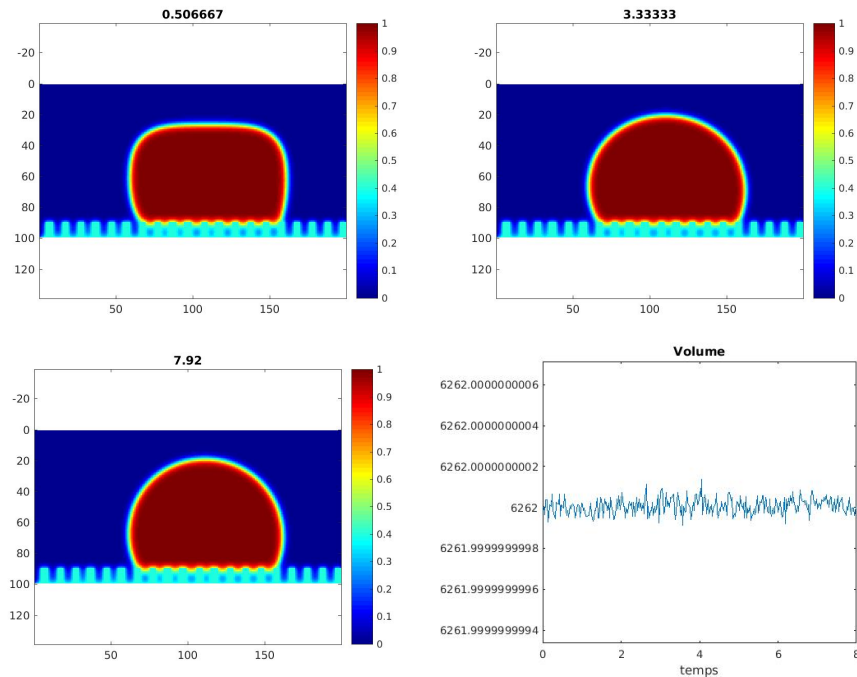


Figura 2.15: $\alpha = 0.4$ e $\eta = 0$. Osserviamo uno stato di Cassie-Baxter.

⁷ciò è stato fatto ma non è dettagliato in questa tesi;

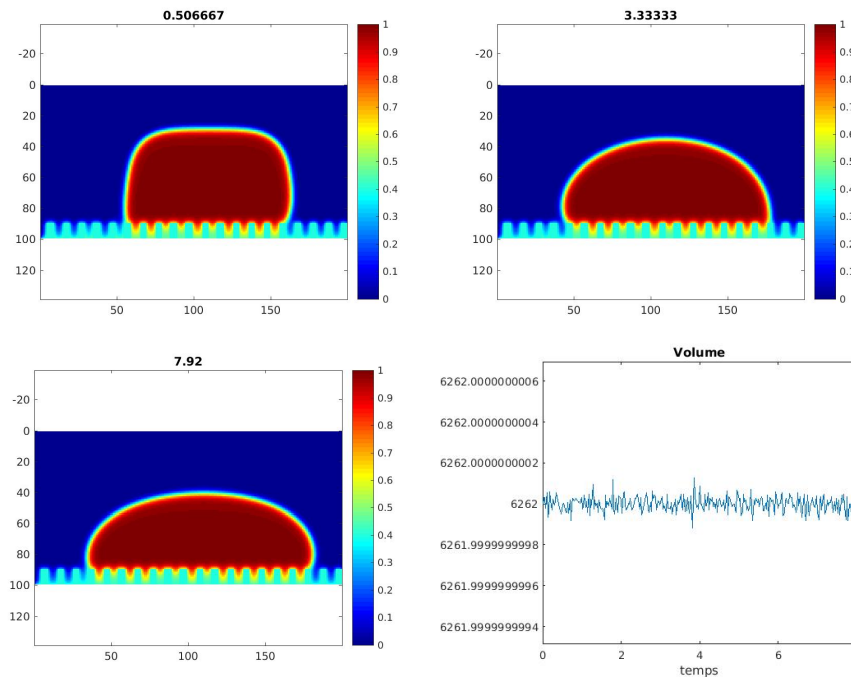


Figura 2.16: $\alpha = 0.4$ e $\eta = 10$. Osserviamo uno stato di Wenzel.

Siamo quindi riusciti a passare da uno stato all'altro, ricordando inoltre che, secondo intuizione, la gravità schiaccia la goccia che perde la forma di sfera tagliata, che possedeva in assenza di gravità (si veda il Teorema 1).

Profondità del substrato

Vista la difficoltà nel misurare l'**angolo di Young** su un risultato numerico calcolato con MATLAB, ci concentriamo su un'analisi più folcloristica dell'**influenza della profondità** del substrato rugoso sul comportamento della goccia d'acqua: cerchiamo una relazione tra la profondità delle creste (a larghezza fissa) e il tempo che la goccia impiega per arrivare a toccare un punto a valle della discesa.

Più precisamente, consideriamo che la goccia abbia toccato un punto quando $\phi \geq 0.8$ e prendiamo come luogo di arrivo un punto in fondo alla discesa, in maniera da lasciare al sistema il tempo di evolvere sotto l'effetto dell'equazione di Allen-Cahn.

Per delle questioni di stabilità, abbiamo dovuto fare una scelta tra un algoritmo più realistico, cioè quello della sezione 2.6.5, e uno schema più stabile in presenza della gravità, quello della sezione 2.6.4. La nostra scelta è caduta sul secondo, per ridurre i tempi di simulazione, dal momento che siamo obbligati a imporre una forza parametrizzata da η piccolo.

Tutto ciò è implementato dal codice `../scripts/S005.m` con $\theta_p = \pi/4$, $a_x = 0$, $b_x = 1$, $a_y = 0$, $b_y = 0.5$, $\alpha = 0.4$, $\eta = 10$, $T = 5$, $N = 300$, $I = 149$, $J = 79$, $w = 1/50$, $\epsilon = 0.01$ e $\delta = 3 \cdot 10^{-16}$ e 10 campioni, ottenuti facendo variare linearmente h tra 0.01 e 0.15.

Otteniamo:

- $\alpha = 0.28$. Un test di regressione lineare dà come risultato:

```
Regression Model Linear
R^2 0,960660491967879
Standard Error 0,035840828653643

Slope 3,54644958551768
Intercept 2,52627403315859
```

- $\alpha = 0.4$ ugualmente

```
Regression Model Linear
R^2 0,997099369207833
Standard Error 0,017408365200827

Slope 6,46288203041208
```

Intercept 2,06795943756703

- $\alpha = 0.6$ cambiando l'angolo ($\theta_p = \frac{\pi}{3}$), ugualmente:

Regression Model Linear

R² 0,926525201310516

Standard Error 0,066588379578936

Slope 4,73481601395307

Intercept 1,18289471888375

Abbiamo quindi una relazione che possiamo supporre **lineare** tra la profondità ed il tempo di discesa.

Una spiegazione valida soprattutto nel caso dello stato di Wenzel consiste nel dire che l'umidificazione delle cavità toglie velocità (e massa) al fronte della colata, facendo in modo che la goccia impieghi più tempo per discendere lungo il piano. Nel caso di stato di Cassie-Baxter (per esempio con $\alpha = 0.28$) non vi è una spiegazione ugualmente intuitiva, nonostante sia il caso che mostra con più evidenza⁸ una relazione lineare.

Larghezza delle cavità del substrato

Lo studio della relazione tra il comportamento della goccia e la **larghezza delle cavità del substrato** è stato portato avanti attraverso un esperimento analogo a quello della sezione 2.6.6, modificando progressivamente la larghezza delle creste che compongono il substrato.

In tal caso, i risultati ottenuti non mostrano alcuna correlazione semplice da interpretare, poiché il tempo di caduta sembra a volte rimanere costante, talvolta aumenta o diminuisce in funzione di α .

Non possiamo perciò trarre alcuna conclusione a riguardo, ritenendo che tale analisi vada effettuata con strumenti più fini, come il trattamento di immagini di MATLAB, che permetterebbe di calcolare precisamente l'angolo di contatto statico.

⁸perlomeno statistica.

Capitolo 3

Equazione di Cahn-Hilliard

L'**equazione di Cahn-Hilliard**, nella sua forma (3.2), corregge il difetto principale dell'equazione di Allen-Cahn, cioè impone automaticamente la **conservazione della massa**, senza dover aggiungere un moltiplicatore di Lagrange. In contropartita, si tratta di un'equazione più complessa, in quanto facente intervenire delle derivate di quart'ordine nella variabile spaziale (o bi-laplaciano).

3.1 Derivazione

Diversamente dall'equazione di Allen-Cahn, l'**equazione di Cahn-Hilliard** è definita come flusso di gradiente di E per gli spazi $V = \dot{C}_c^\infty(\Omega)$ e $H = H_{\#}^{-1}(\Omega)$ (il sottospazio a media nulla del duale di $H^1(\Omega)$). Più precisamente:

$$H_{\#}^{-1} = \left\{ \phi \in H^1(\Omega)^* : \int_{\Omega} \phi dx = 0 \right\}$$

che possiamo verificare essere uno spazio di Hilbert¹ se dotato del prodotto scalare:

$$(u^*, v^*)_{H_{\#}^{-1}(\Omega)} = (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} \quad (3.1)$$

Si può mostrare (si veda [14]), che $V \hookrightarrow H$ con densità. Consideriamo allora ϕ sufficientemente regolare e tale che $\frac{\partial \phi}{\partial n} = \frac{\partial(\Delta \phi)}{\partial n} = 0$ su $\partial\Omega$ e $v^* \in V$. Un calcolo analogo a (2.1) permette di ottenere il seguente crochet:

$$\begin{aligned} \langle E'(\phi), v^* \rangle_{V^*, V} &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{E(\phi + tv^*) - E(\phi)}{t} = \int_{\Omega} \epsilon \nabla \phi \cdot \nabla v^* + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi) v^* dx = \\ &= \int_{\Omega} \left[-\epsilon \Delta \phi v^* + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi) v^* \right] dx = - \int_{\Omega} \left[-\epsilon \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi) \right] \Delta v dx = \\ &= \int_{\Omega} \nabla \left[-\epsilon \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi) \right] \cdot \nabla v dx = \left(\nabla \left[-\epsilon \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi) \right], \nabla v \right)_H = \\ &= \left(-\operatorname{div} \left(\nabla \left[-\epsilon \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi) \right] \right), -\operatorname{div}(\nabla v) \right)_{L^2(\Omega)} = \left(\Delta \left[-\epsilon \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi) \right], v^* \right)_H \end{aligned}$$

dove abbiamo utilizzato a più riprese la formula di Green, con opportune semplificazioni grazie alle ipotesi su ϕ , insieme ad una proprietà che discende direttamente dalla definizione del prodotto scalare (3.1): sia $w \in H$, allora

$$\begin{cases} -\Delta w = w^* & \text{in } \Omega \\ \frac{\partial w}{\partial n} = 0 & \text{su } \partial\Omega \end{cases}$$

Utilizzando la definizione (1.5) di flusso di gradiente e passando alla formulazione classica otteniamo l'equazione di Cahn-Hilliard:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(t, x) = \Delta \left(-\epsilon \Delta \phi(t, x) + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi(t, x)) \right) \quad \text{per } (t, x) \in]0, T[\times \Omega \quad (3.2)$$

¹lo sarebbe comunque a titolo di sottospazio chiuso di uno spazio di Hilbert ($H^1(\Omega)^*$), essendo controimmagine di una applicazione lineare continua del chiuso $\{0\}$.

Procedendo alla sua risoluzione numerica, si avvera fruttuoso introdurre una nuova funzione, detta **potenziale chimico** e indicata μ , in maniera da riscrivere l'equazione (3.2) sotto la forma:

$$\begin{cases} \partial_t \phi(t, x) = \Delta \mu(t, x) & \text{per } (t, x) \in]0, T[\times \Omega \\ \mu(t, x) = -\epsilon \Delta \phi(t, x) + \frac{1}{\epsilon} f'(\phi(t, x)) & \text{per } (t, x) \in]0, T[\times \Omega \end{cases} \quad (3.3)$$

Generalmente, per imporre la conservazione della massa all'interno del sistema, il potenziale chimico sarà dotato di una condizione ai limiti di Neumann, del tipo $\frac{\partial \mu}{\partial n} = \nabla \mu \cdot n = 0$ su $\partial \Omega$, mentre la condizione per ϕ varierà secondo i bisogni.

3.2 Esistenza ed unicità della soluzione

Viste le ipotesi sul potenziale f introdotto precedentemente, esistono diversi risultati di **esistenza, unicità e regolarità** delle soluzioni classiche e non dell'equazione di Cahn-Hilliard. Ne troviamo per esempio nei lavori [20] e [33], tra i quali citiamo il seguente teorema:

Teorema 9. *Introduciamo lo spazio*

$$H_N^2(\Omega) = \left\{ \phi \in H^2(\Omega) : \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \text{ su } \partial \Omega \right\}$$

Sia $\Omega \in \mathbb{R}^d$ con $d \geq 2$ un dominio limitato e regolare e $T > 0$. Sia $\phi(t=0, \cdot) = \phi_0 \in H_N^2(\Omega)$ la soluzione iniziale. Allora la soluzione di (3.2) con le condizioni $\frac{\partial \phi}{\partial n} = \frac{\partial(\Delta \phi)}{\partial n} = 0$ su $\partial \Omega$ esiste unica ed è inclusa in $H^{4,1}(0, T; \Omega)$.

3.3 Conservazione della massa e bilancio d'energia

Dal punto di vista della **conservazione della massa**, essa è automaticamente verificata qualunque sia la condizione al bordo su ϕ . In effetti, per semplice applicazione della formula di Green, otteniamo:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} dx = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \phi dx = \int_{\Omega} \Delta \mu dx = - \int_{\partial \Omega} \frac{\partial \mu}{\partial n} ds = 0$$

Con l'obiettivo di fare un **bilancio d'energia**, consideriamo delle condizioni di Neumann omogenee a zero su ϕ . Moltiplichiamo la prima equazione di (3.3) per μ e integriamo in spazio. In virtù della formula di Green, viene:

$$\int_{\Omega} \partial_t \phi \mu dx = \int_{\Omega} \Delta \mu \mu dx = - \int_{\Omega} |\nabla \mu|^2 dx + \int_{\partial \Omega} \frac{\partial \mu}{\partial n} \mu dS = - \int_{\Omega} |\nabla \mu|^2 dx$$

Moltiplichiamo la seconda equazione di (3.3) per $\partial_t \phi$ ed integriamo:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \partial_t \phi \mu dx &= -\epsilon \int_{\Omega} \Delta \phi \partial_t \phi dx + \frac{1}{\epsilon} \int_{\Omega} f'(\phi) \partial_t \phi dx = \epsilon \int_{\Omega} \partial_t (\nabla \phi) \cdot \nabla \phi dx + \frac{1}{\epsilon} \int_{\Omega} \frac{df(\phi)}{dt} dx = \\ &= \frac{\epsilon}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\nabla \phi|^2 dx + \frac{1}{\epsilon} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} f(\phi) dx = \frac{dE}{dt}(t) = -\|\mu\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \leq 0 \end{aligned}$$

Di conseguenza l'energia di un sistema che evolve sotto l'effetto dell'equazione (3.2) **non aumenta**. Inoltre, le stesse considerazioni della sezione 2.3 sulla funzione f ci permettono di concludere, grazie al Lemma 2, che:

$$|\nabla \phi| < +\infty \quad \text{et} \quad |\phi| < +\infty \quad \text{quasi ovunque in } \Omega$$

3.4 Discretizzazione dell'equazione 1D con le differenze finite

Discretizziamo l'equazione (3.3) nella sua forma unidimensionale, con condizioni ai limiti di Neumann omogenee a zero, tramite uno schema implicito, utilizzando lo stesso df dell'equazione (2.17) per approssimare la funzione $f'(\phi)$.

Nonostante il caso 1D non sia di grande interesse fisico, esso permette di studiare più facilmente **la consistenza, la stabilità e la convergenza** del metodo numerico.

Lo schema si scrive (con le convenzioni abituali, vedesi la sezione 2.5):

$$\begin{cases} \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} = -\frac{-\mu_{j-1}^{n+1} + 2\mu_j^{n+1} - \mu_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} & 1 \leq j \leq J \\ \mu_j^{n+1} = \epsilon \frac{-\phi_{j-1}^{n+1} + 2\phi_j^{n+1} - \phi_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{1}{\epsilon} df(\phi_j^n, \phi_j^{n+1}) & 1 \leq j \leq J \end{cases} \quad (3.4)$$

insieme con le condizioni al bordo:

$$\frac{\phi_1^{n+1} - \phi_0^{n+1}}{\Delta x} = \frac{\phi_{J+1}^{n+1} - \phi_J^{n+1}}{\Delta x} = \frac{\mu_1^{n+1} - \mu_0^{n+1}}{\Delta x} = \frac{\mu_{J+1}^{n+1} - \phi_J^{n+1}}{\Delta x} = 0 \quad (3.5)$$

Per approssimare questo sistema non lineare col metodo di Newton introduciamo il vettore:

$$u^n = (\phi_1^n, \dots, \phi_J^n, \mu_1^n, \dots, \mu_J^n) \in \mathbb{R}^{2J}$$

in maniera che il problema si scriva:

$$F_{u^n}(u^{n+1}) = 0 = Mu^{n+1} - L_1 u^n - L_2 \frac{1}{\epsilon} df(u^n, u^{n+1})$$

ove

$$M = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2J \times 2J} \quad L_1 = \begin{bmatrix} D & E \\ E & E \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2J \times 2J} \quad L_2 = \begin{bmatrix} E & E \\ D & E \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2J \times 2J}$$

con

$$E = 0_{J \times J} \quad A = D = \mathbb{I}_{J \times J} \quad B = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad C = -\frac{\epsilon}{\Delta t} B$$

Dopo aver calcolato $\mathcal{J}F_{u^n}(u^{n+1})$, la matrice jacobiana di F_{u^n} , il problema consiste nell'iterare con il metodo di Newton², attraverso l'Algoritmo 4.

for $n=1:N-1$ **do**

```

    tmp =  $u^n$ ;
    err = 2*toll; // Solamente per entrare nel ciclo.
    while  $err > toll$  do
        | diff =  $-\mathcal{J}F_{u^n}(tmp) \setminus F_{u^n}(tmp)$ ;
        | err =  $\|diff\|$ ;
        | tmp = tmp + diff;
    end
     $u^{n+1} = tmp$ ;

```

end

Algorithm 4: Algoritmo di Newton standard

²rimarchiamo che non è più necessario imporre la conservazione della massa.

3.4.1 Decrescita dell'energia discreta dello schema

Mostriamo che l'**energia discreta** (o discretizzata) della soluzione approssimata da (3.4) decresce, facendo appello alle formule (2.12), che forniscono un analogo della formula d'integrazione per parti nel caso discreto.

Riscriviamo lo schema (3.4), per $1 \leq j \leq J$, sulla forma:

$$\begin{cases} \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\mu_{j-1}^{n+1} - 2\mu_j^{n+1} + \mu_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{\mu_{j-1}^n - 2\mu_j^n + \mu_{j+1}^n}{\Delta x^2} \right) + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\mu_{j-1}^{n+1} - 2\mu_j^{n+1} + \mu_{j+1}^{n+1}}{\Delta t \Delta x^2} - \frac{\mu_{j-1}^n - 2\mu_j^n + \mu_{j+1}^n}{\Delta t \Delta x^2} \right) \\ \mu_j^{n+1} = -\frac{\epsilon}{2} \left(\frac{\phi_{j-1}^{n+1} - 2\phi_j^{n+1} + \phi_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{\phi_{j-1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j+1}^n}{\Delta x^2} \right) - \frac{\epsilon \Delta t}{2} \left(\frac{\phi_{j-1}^{n+1} - 2\phi_j^{n+1} + \phi_{j+1}^{n+1}}{\Delta t \Delta x^2} - \frac{\phi_{j-1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j+1}^n}{\Delta t \Delta x^2} \right) + \\ + \frac{1}{\epsilon} df(\phi^n, \phi^{n+1}) \end{cases} \quad (3.6)$$

Moltiplichiamo la prima equazione di (3.6) per $\mu_j^{n+1} \Delta x$ e sommiamo su j , in maniera da fare un'«integrazione discreta». Applicando la formula (2.12) otteniamo:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^J \Delta x \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} \mu_j^{n+1} &= - \sum_{j=1}^J \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\mu_{j+1}^{n+1} - \mu_j^{n+1}}{\Delta x} + \frac{\mu_{j+1}^n - \mu_j^n}{\Delta x} \right) \frac{\mu_{j+1}^{n+1} - \mu_j^{n+1}}{\Delta x} + \\ &\quad - \sum_{j=1}^J \frac{\Delta t \Delta x}{2} \left(\frac{\mu_{j+1}^{n+1} - \mu_j^{n+1}}{\Delta t \Delta x} - \frac{\mu_{j+1}^n - \mu_j^n}{\Delta t \Delta x} \right) \frac{\mu_{j+1}^{n+1} - \mu_j^{n+1}}{\Delta x} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Moltiplichiamo la seconda equazione del sistema (3.6) per $\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} \Delta x$ e sommiamo su j . Otteniamo, per applicazione di (2.12) :

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^J \Delta x \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} \mu_j^{n+1} &= \epsilon \sum_{j=1}^J \frac{\Delta x}{2 \Delta t} \left[\left(\frac{\phi_{j+1}^{n+1} - \phi_j^{n+1}}{\Delta x} \right)^2 - \left(\frac{\phi_{j+1}^n - \phi_j^n}{\Delta x} \right)^2 \right] + \\ &\quad + \frac{\epsilon \Delta t}{2} \sum_{j=1}^J \Delta x \left| \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\phi_{j+1}^{n+1} - \phi_j^{n+1}}{\Delta x} - \frac{\phi_{j+1}^n - \phi_j^n}{\Delta x} \right) \right|^2 + \\ &\quad + \frac{1}{\epsilon} \sum_{j=1}^J \Delta x \frac{f(\phi_j^{n+1}) - f(\phi_j^n)}{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n} \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Unendo (3.7) e (3.8), possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} \epsilon \sum_{j=1}^J \frac{\Delta x}{2 \Delta t} \left[\left(\frac{\phi_{j+1}^{n+1} - \phi_j^{n+1}}{\Delta x} \right)^2 - \left(\frac{\phi_{j+1}^n - \phi_j^n}{\Delta x} \right)^2 \right] &+ \frac{\epsilon \Delta t}{2} \sum_{j=1}^J \Delta x \left| \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\phi_{j+1}^{n+1} - \phi_j^{n+1}}{\Delta x} - \frac{\phi_{j+1}^n - \phi_j^n}{\Delta x} \right) \right|^2 + \\ &+ \frac{1}{\epsilon} \sum_{j=1}^J \Delta x \frac{f(\phi_j^{n+1}) - f(\phi_j^n)}{\Delta t} = - \sum_{j=1}^J \Delta x \left| \frac{\mu_{j+1}^{n+1} - \mu_j^{n+1}}{\Delta x} \right|^2 \end{aligned}$$

Infine, la variazione nel tempo dell'energia del sistema è data da:

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{n+1} &= \frac{\epsilon}{2} \sum_{j=1}^J \Delta x \frac{\left(\frac{\phi_{j+1}^{n+1} - \phi_j^{n+1}}{\Delta x} \right)^2 - \left(\frac{\phi_{j+1}^n - \phi_j^n}{\Delta x} \right)^2}{\Delta t} + \frac{1}{\epsilon} \sum_{j=1}^J \Delta x \frac{f(\phi_j^{n+1}) - f(\phi_j^n)}{\Delta t} \\ &= -\frac{\epsilon \Delta t}{2} \sum_{j=1}^J \Delta x \left| \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\phi_{j+1}^{n+1} - \phi_j^{n+1}}{\Delta x} - \frac{\phi_{j+1}^n - \phi_j^n}{\Delta x} \right) \right|^2 - \sum_{j=1}^J \Delta x \left| \frac{\mu_{j+1}^{n+1} - \mu_j^{n+1}}{\Delta x} \right|^2 \leq 0 \end{aligned}$$

Il che mostra che l'**energia discretizzata non cresce**, dal momento che la soluzione numerica è calcolata attraverso lo schema implicito (3.4). Tale proprietà è molto positiva, in quanto garantisce stabilità

incondizionata dello schema (previa ricerca di un limite inferiore per l'energia, assai facile a trovare: 0 per esempio), ammesso di poter evitare la risoluzione approssimata attraverso un metodo iterativo, che introduce dell'instabilità e senza considerare che il problema possa essere difficile da risolvere, a causa del fatto che le matrici di discretizzazione dell'equazione di Cahn-Hilliard sono in generale mal-condizionate (come sottolineato da [17] e [16]), il che significa che la convergenza del metodo di Newton sarà assai lenta a causa dell'influenza importante delle perturbazioni.

3.4.2 Consistenza dello schema e precisione

In questa sezione, verificheremo che lo schema (3.4) presentato qui sopra è **consistente** rispetto all'equazione da risolvere (equazione (3.3)) e **preciso** all'ordine uno in tempo e all'ordine due in spazio. Inoltre, questo ci permetterà di discutere l'accuratezza legata all'utilizzo di uno schema di Crank-Nicolson, cioè un θ -metodo di parametro $\frac{1}{2}$.

Il procedimento sarà formale, supponendo che ϕ e μ siano derivabili secondo necessità per scrivere degli sviluppi di Taylor. Inseriamo la soluzione esatte di (3.3) nello schema (3.4), indicando t l'istante discreto n e come $t + \Delta t$ l'istante $n + 1$. Stesso discorso per la variabile spaziale. Otteniamo:

$$\frac{\phi(t + \Delta t, x) - \phi(t, x)}{\Delta t} - \frac{\mu(t + \Delta t, x - \Delta x) - 2\mu(t + \Delta t, x) + \mu(t + \Delta t, x + \Delta x)}{\Delta x^2} \quad (3.9)$$

$$= \partial_t \phi(t, x) + \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt} \phi(t, x) + O(\Delta t^2) - \partial_{xx} \mu(t + \Delta t, x) + O(\Delta x^2) \quad (3.10)$$

$$= \partial_t \phi(t, x) + \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt} \phi(t, x) - \partial_{xx} \mu(t, x) - \Delta t \partial_{txx} \mu(t, x) + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2) \quad (3.11)$$

$$= \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{2} \partial_t \phi(t, x) - \partial_{xx} \mu(t, x) \right] + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2) = O(\Delta t) + O(\Delta x^2) \quad (3.12)$$

In accordo con tale equazione, la precisione è $O(\Delta t)$ in tempo e $O(\Delta x^2)$ in spazio. Di conseguenza la domanda che ci poniamo riguarda l'ottenimento dell'ordine quadratico in tempo: ciò è impedito dal coefficiente $\frac{1}{2}$ tra parentesi, che non permette d'identificare l'equazione esatta di (3.3). Possiamo immaginare, visto il valore di tale coefficiente, che se avessimo scelto d'utilizzare uno schema di tipo Crank-Nicolson, avremmo guadagnato un ordine di precisione rispetto alla variabile temporale.

Facendo lo stesso con seconda equazione dello schema implicito (3.4), otteniamo:

$$\begin{aligned} \mu(t + \Delta t, x) + \epsilon \frac{\phi(t + \Delta t, x - \Delta x) - 2\phi(t + \Delta t, x) + \phi(t + \Delta t, x + \Delta x)}{\Delta x^2} - \frac{1}{\epsilon} \frac{f(\phi(t + \Delta t, x)) - f(\phi(t, x))}{\phi(t + \Delta t, x) - \phi(t, x)} \\ = \mu(t, x) + \Delta t \partial_t \mu(t, x) + O(\Delta t^2) + \epsilon \partial_{xx} \phi(t + \Delta t, x) + O(\Delta x^2) + \\ - \frac{1}{\epsilon} \left[f'(\phi(t, x)) + \frac{1}{2} f''(\phi(t, x)) (\phi(t + \Delta t, x) - \phi(t, x)) + O((\phi(t + \Delta t, x) - \phi(t, x))^2) \right] \\ = \Delta t \partial_t \mu(t, x) + \epsilon \Delta t \partial_{txx} \phi(t, x) - \frac{\Delta t}{2\epsilon} \frac{d}{dt} f'(\phi(t, x)) + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2) \\ = \Delta t \frac{d}{dt} \left[\mu(t, x) + \epsilon \partial_{xx} \phi(t, x) - \frac{1}{2\epsilon} f'(\phi(t, x)) \right] + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2) = O(\Delta t) + O(\Delta x^2) \end{aligned}$$

dove vi è lo stesso problema dell'equazione precedente.

Come precedentemente, utilizziamo la nozione d'**equazione equivalente**: aggiungiamo la parte principale dell'errore di troncatura all'equazione di partenza (annoteremo E_t^1 il termine dominante dell'errore di troncatura della prima equazione dello schema (3.4)):

$$E_t^1 = \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{2} \partial_t \phi(t, x) - \partial_{xx} \mu \right] - \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \mu(t + \Delta t, x) = -\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\partial_t \mu(t, x)) - \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \mu(t, x) + \dots$$

per continuare, deriviamo la seconda equazione del sistema (3.3) rispetto al tempo e inserendovi la prima, otteniamo

$$\partial_t \mu(t, x) = -\epsilon \frac{\partial^4}{\partial x^4} \mu(t, x)$$

finalmente si ha

$$E_t^1 = -\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[-\epsilon \frac{\partial^4}{\partial x^4} \mu(t, x) \right] - \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \mu(t, x) = \Delta t \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial^6}{\partial x^6} \mu(t, x) - \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \mu(t, x)$$

Non avendo altro che derivate d'ordine pari, abbiamo mostrato che lo schema implementato è di natura **diffusiva** o dissipativa (vedesi [5] per approfondire tale nozione), così come accadeva per la discretizzazione dell'equazione di Allen-Cahn. Tutte le interpretazioni del termine «dissipativo» presentate in precedenza restano valide.

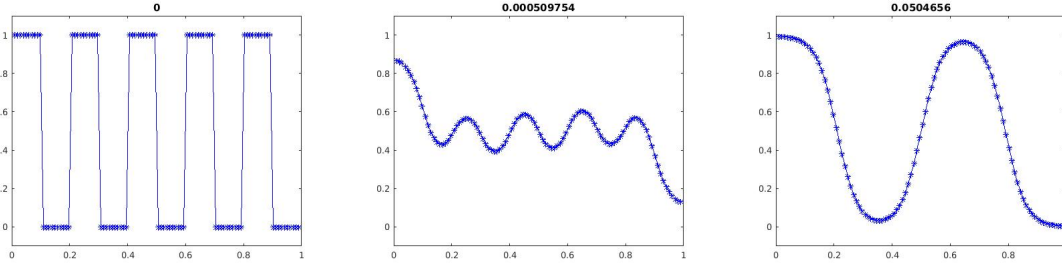


Figura 3.1: L'assenza di dispersività dello schema (3.4), messa in evidenza da un dato iniziale discontinuo.

In effetti, l'**assenza di carattere dispersivo** (derivate d'ordine dispari dominanti nell'errore di troncatura), che genererebbe delle oscillazioni (rapide) artificiali analoghe al fenomeno di Gibbs in presenza di una soluzione iniziale discontinua, può osservarsi alla figura 3.1 (simulazione fatta con `../scripts/S008.m`).

3.4.3 Verifica dell'ordine di convergenza

Al fine di **verificare i risultati sulla precisione** in spazio dello schema (vedesi (3.9)), ci basiamo sulla conoscenza della soluzione stazionaria dell'equazione (3.2) con condizioni di Neumann omogenee a zero, quando la soluzione iniziale si presenta sotto la forma:

$$\phi(t=0, x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{x-1/2}{10\epsilon}\right)$$

In tal caso, la soluzione stazionaria dell'equazione (3.2) si scrive (si veda per esempio [34] per una dimostrazione di questo fatto):

$$\phi_\infty(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{x-1/2}{\sqrt{2}\epsilon}\right)$$

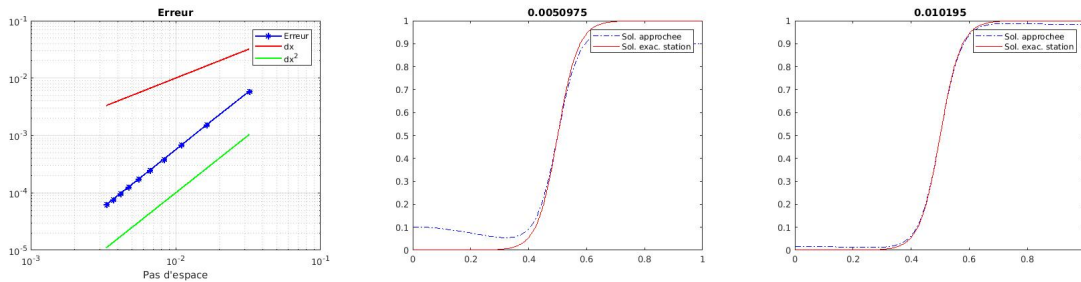


Figura 3.2: Verifica sperimentale della precisione dello schema (3.4)

Come previsto, un test numerico implementato nel codice `../scripts/S007.m` ponendo $\epsilon = 0.05$, $a_x = 0$, $b_x = 1$, $\Delta t = 5.0975 \cdot 10^{-04}$, $N = 100$, che implementa l'Algoritmo 4, mostra una convergenza d'**ordine quadratico** in Δx verso la soluzione ϕ_∞ , come mostra la figura 3.2 (abbiamo utilizzato la norma $\|\cdot\|_\infty$ per i vettori, anche se in tale contesto tutte le norme sono equivalenti e supposto che all'istante finale la soluzione approssimata possa essere considerata stazionaria).

3.5 Discretizzazione dell'equazione in 2D con condizioni ai limiti di Neumann

Il tipo di dominio e la discretizzazione sono analoghi a quelli della sezione 2.5, quindi eviteremo di rievocarli. Per contro, imponiamo delle condizioni ai limiti di Neumann omogenee a zero sulla funzione ϕ e porremo

$$u^n = (\phi^n, \mu^n) \in \mathbb{R}^{2IJ}$$

ove ϕ^n e μ^n sono strutturati secondo le stesse convenzioni di 2.5.

Ciò detto, lo schema implicito che utilizzeremo si scrive:

$$\begin{cases} \frac{\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n}{\Delta t} = -\frac{-\mu_{i-1,j}^{n+1} + 2\mu_{i,j}^{n+1} - \mu_{i+1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} - \frac{-\mu_{i,j-1}^{n+1} + 2\mu_{i,j}^{n+1} - \mu_{i,j+1}^{n+1}}{\Delta y^2} \\ \mu_{i,j}^{n+1} = \epsilon \frac{-\phi_{i-1,j}^{n+1} + 2\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i+1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \epsilon \frac{-\phi_{i,j-1}^{n+1} + 2\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j+1}^{n+1}}{\Delta y^2} + \frac{1}{\epsilon} df(\phi_{i,j}^n, \phi_{i,j}^{n+1}) \end{cases} \quad (3.13)$$

per $i \in \{1, \dots, I\}$, $j \in \{1, \dots, J\}$ e $n \in \{1, \dots, N\}$, piÙ le condizioni al bordo:

$$\frac{\phi_{1,j}^{n+1} - \phi_{0,j}^{n+1}}{\Delta x} = \frac{\phi_{I+1,j}^{n+1} - \phi_{I,j}^{n+1}}{\Delta x} = \frac{\mu_{1,j}^{n+1} - \mu_{0,j}^{n+1}}{\Delta x} = \frac{\mu_{I+1,j}^{n+1} - \phi_{I,j}^{n+1}}{\Delta x} = 0 \quad \forall j \in \{1, \dots, J\} \quad (3.14)$$

$$\frac{\phi_{i,1}^{n+1} - \phi_{i,0}^{n+1}}{\Delta y} = \frac{\phi_{i,J+1}^{n+1} - \phi_{i,J}^{n+1}}{\Delta y} = \frac{\mu_{i,1}^{n+1} - \mu_{i,0}^{n+1}}{\Delta y} = \frac{\mu_{i,J+1}^{n+1} - \phi_{i,J}^{n+1}}{\Delta y} = 0 \quad \forall i \in \{1, \dots, I\} \quad (3.15)$$

Possiamo quindi riscrivere lo schema di (3.13), (3.14) e (3.15) sotto una forma utile per applicare il metodo di Newton (si veda l'Algoritmo 4) :

$$F_{u^n}(u^{n+1}) = 0 = Mu^{n+1} + L_1 u^n + \frac{1}{\epsilon} L_2 df(u^n, u^{n+1})$$

introducendo $c_x = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$, $c_y = \frac{\Delta t}{\Delta y^2}$, $k_x = \frac{\epsilon}{\Delta x^2}$ e $k_y = \frac{\epsilon}{\Delta y^2}$, ove

$$M = - \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2IJ \times 2IJ} \quad L_1 = \begin{bmatrix} D & S \\ S & S \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2IJ \times 2IJ} \quad L_2 = \begin{bmatrix} S & S \\ D & S \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2IJ \times 2IJ}$$

$$B = \begin{pmatrix} D_1 & E & 0 & \cdots & 0 \\ E & D_2 & E & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & D_2 & E \\ 0 & \cdots & 0 & E & D_1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{IJ \times IJ} \quad C = \begin{pmatrix} F_1 & G & 0 & \cdots & 0 \\ G & F_2 & G & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & F_2 & G \\ 0 & \cdots & 0 & G & F_1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{IJ \times IJ}$$

dove i blocchi sono dati da:

$$D_1 = \begin{pmatrix} c_x + c_y & -c_y & 0 & \cdots & 0 \\ -c_y & c_x + 2c_y & -c_y & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & c_x + 2c_y & -c_y \\ 0 & \cdots & 0 & -c_y & c_x + c_y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{J \times J}$$

$$D_2 = \begin{pmatrix} 2c_x + c_y & -c_y & 0 & \cdots & 0 \\ -c_y & 2(c_x + c_y) & -c_y & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & 2(c_x + c_y) & -c_y \\ 0 & \cdots & 0 & -c_y & 2c_x + c_y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{J \times J}$$

$$E = -c_x \mathbb{I}_{J \times J} \quad G = k_x \mathbb{I}_{J \times J} \quad F_1 = - \begin{pmatrix} k_x + k_y & -k_y & 0 & \cdots & 0 \\ -k_y & k_x + 2k_y & -k_y & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & k_x + 2k_y & -k_y \\ 0 & \cdots & 0 & -k_y & k_x + k_y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{J \times J}$$

$$F_2 = - \begin{pmatrix} 2k_x + k_y & -k_y & 0 & \cdots & 0 \\ -k_y & 2(k_x + k_y) & -k_y & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & 2(k_x + k_y) & -k_y \\ 0 & \cdots & 0 & -k_y & 2k_x + k_y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{J \times J}$$

3.5.1 Risultati numerici

Dato iniziale debolmente perturbato: decomposizione spinodale

Testiamo lo schema (3.13) con una soluzione iniziale lievemente perturbata attorno a 0.5 (± 0.01), in maniera da vedere innanzitutto la **decomposizione spinodale** (come dettagliato alla pagina 29 di [32]; si vedano anche [21] e [10]), che consiste nella formazione di piccole gocce di fase pura, per passare in seguito alla separazione in fasi distinte ma di taglia più grande.

È quindi necessario fare particolare attenzione alla scelta di un passo di spazio sufficientemente piccolo per prendere in conto lo spessore dell'interfaccia ϵ e un passo di tempo che permetta di osservare la decomposizione iniziale, che ha luogo su una scala di tempo piuttosto breve.

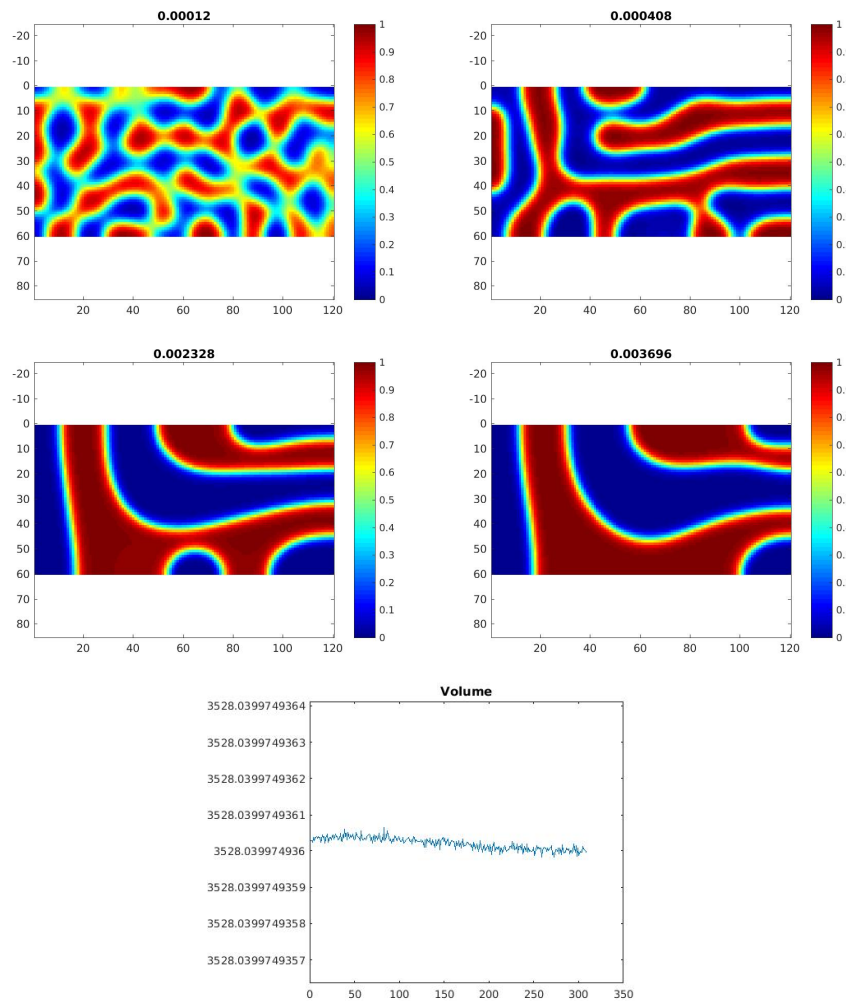


Figura 3.3: Soluzione iniziale debolmente perturbata: osserviamo in primo luogo la decomposizione spinodale e in seguito la formazione di aggregati di fase pura più grandi.

Simuliamo ponendo $a_x = 0$, $b_x = 1$, $a_y = 0$, $b_y = 0.5$, $\Delta t = 0.12 \cdot 10^{-4}$, $I = 120$, $J = 60$, $\epsilon = 0.015$, attraverso il programma `./scripts/S009.m`. L'immagine 3.3 mostra bene la presenza della **decomposizione spinodale** iniziale, seguita da un'evoluzione più lenta del diagramma di fase. La condizione di Neumann omogenea è rispettata, poiché le curve di livello toccano il bordo restandovi perpendicolari. Sottolineiamo che il volume del sistema è conservato dall'equazione di Cahn-Hilliard.

Goccia di liquido su un substrato solido

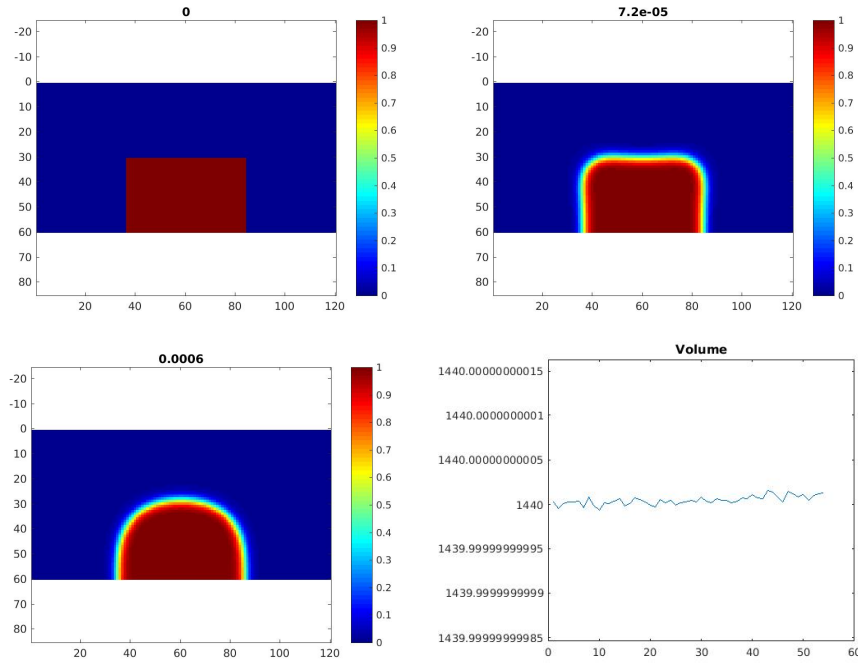


Figura 3.4: Goccia sotto l'effetto dell'equazione di Cahn-Hilliard con condizioni di Neumann omogenee a zero.

Simuliamo, impiegando lo stesso programma e gli stessi parametri della sezione 3.5.1, l'evoluzione a partire da una goccia rettangolare. Il risultato si trova alla figura 3.4: tutto va come previsto, con la conservazione del volume e le condizioni di Neumann che vengono rispettate.

3.6 Discretizzazione dell'equazione in 2D con condizioni di Dirichlet

A differenza della sezione precedente, imponiamo su ϕ delle condizioni di Dirichlet omogenee, analoghe a quelle della sezione 2.5.4, utilizzando lo stesso schema della parte 3.5, adattato tramite l'introduzione di un vettore dello stesso tipo di (2.24). Inoltre, è necessario cambiare le matrici della parte lineare dello schema, che si semplificano (consideriamo le stesse notazioni della sezione 3.5).

Di conseguenza abbiamo:

$$F_1 = F_2 = - \begin{pmatrix} 2(k_x + k_y) & -k_y & 0 & \dots & 0 \\ -k_y & 2(k_x + k_y) & -k_y & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & 2(k_x + k_y) & -k_y \\ 0 & \dots & 0 & -k_y & 2(k_x + k_y) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{J \times J}$$

mentre tutto il resto della schema rimane com'era, così come l'Algoritmo 4 di Newton.

3.6.1 Risultati numerici

Il metodo numerico presentato brevemente poco fa è implementato nel codice `../scripts/S010.m` ed eseguito ponendo $a_x = 0$, $b_x = 1$, $a_y = 0$, $b_y = 0.5$, $\Delta t = 1.2 \cdot 10^{-4}$, $I = 120$, $J = 60$, $\epsilon = 0.01$, nei casi:

- $\alpha = 0.2$ e $\beta = 0.7$, ove la superficie superiore è **fortemente idrofila** rispetto a quella in basso (idrofoba), in maniera che essa arrivi a **strappare la fase liquida dal substrato inferiore** (si veda la figura 3.5).
- $\alpha = 0.4$ e $\beta = 0.6$, caso nel quale la differenza di comportamento tra le superfici **non sembra sufficiente** per farne prevalere una: un **equilibrio** a goccia condivisa si stabilisce. Possiamo comunque sottolineare i **differenti angoli di Young** (si veda l'immagine 3.6).
- $\alpha = 0.998$ e $\beta = 0.999$ dove, dal momento che la goccia condivisa tra i due piani è sufficientemente fine, osserviamo che le due superfici, essendo **estremamente idrofile**, riescono a **separare la goccia** in due (si veda la figura 3.7).

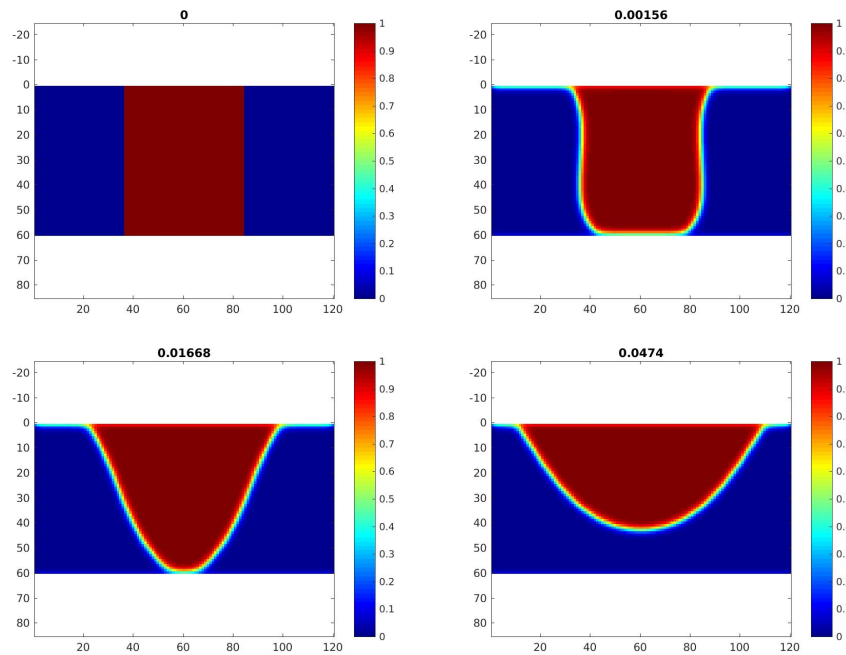


Figura 3.5: $\alpha = 0.2$ e $\beta = 0.7$, il substrato superiore strappa la goccia al substrato inferiore.

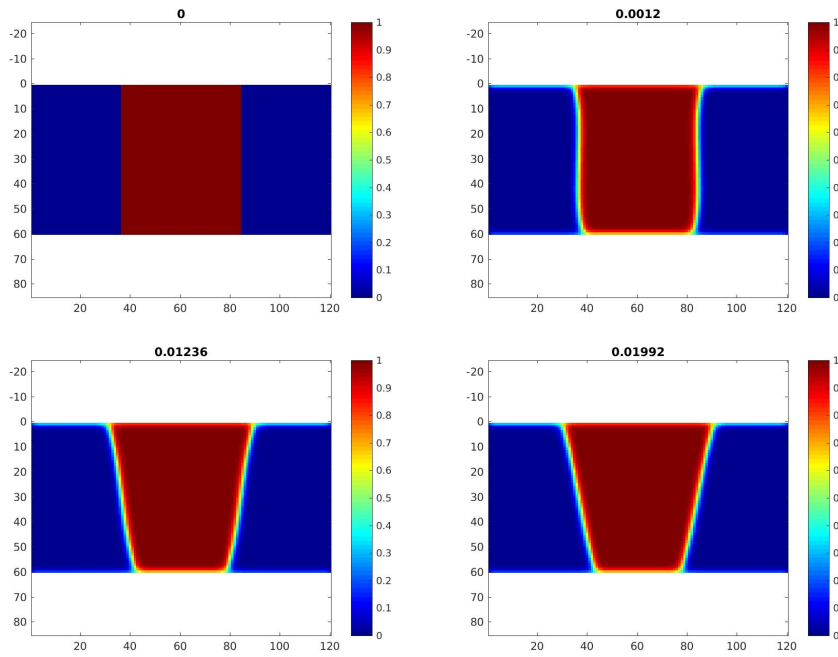


Figura 3.6: $\alpha = 0.4$ e $\beta = 0.6$, un equilibrio si stabilisce, dove la goccia è condivisa tra i due piani.

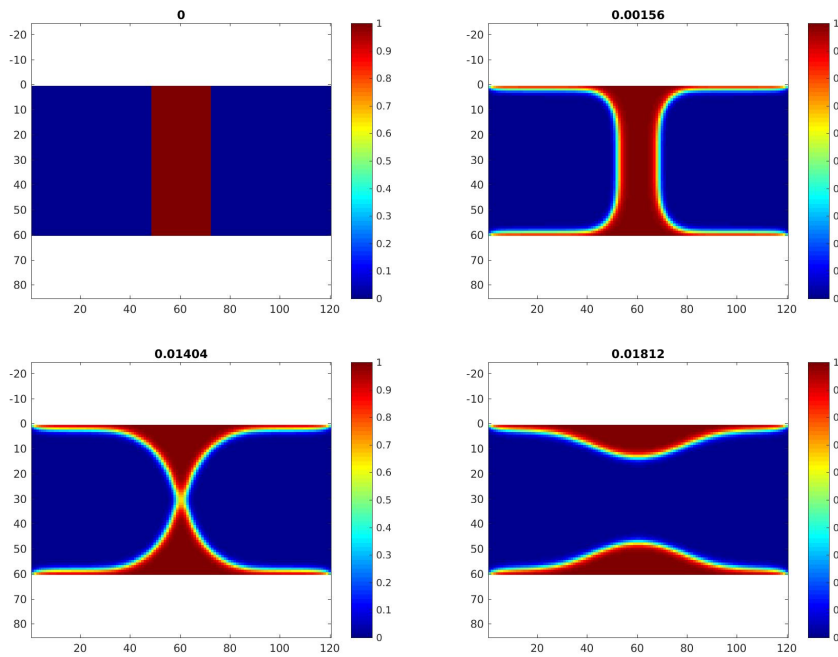


Figura 3.7: $\alpha = 0.998$ e $\beta = 0.999$, assistiamo alla divisione della goccia in due pezzi.

Capitolo 4

L'equazione di Cahn-Hilliard con condizioni ai limiti dinamiche

Nel caso dell'equazione di Cahn-Hilliard risulta impossibile introdurre lo stesso legame tra una condizione di Dirichlet sul bordo e un particolare comportamento di un substrato in termini di tensioni superficiali. Per questo motivo, dato che nel mondo reale osserviamo che la superficie della goccia non sempre è perpendicolare al substrato, il che corrisponde a condizioni di Neumann omogenee a zero, si introducono le cosiddette **condizioni ai limiti dinamiche**, cioè delle condizioni tempo-varianti di tipo Neumann non omogeneo e non lineare.

Esse vengono ad esempio introdotte in [32], [29] e [22], sfruttando l'introduzione di un nuovo **potenziale densità dell'energia libera di superficie**, che indicheremo come f_b e che va a modificare E . Più precisamente, considereremo:

$$\hat{E}(\phi) = \int_{\Omega} \left[\frac{3}{4} \epsilon \sigma_{LV} |\nabla \phi|^2 + \frac{12 \sigma_{LV}}{\epsilon} f(\phi) \right] dx + \underbrace{\int_{\partial \Omega} f_b(\phi) dS}_{=F_b(\phi)} \quad (4.1)$$

A seconda dei contesti, il potenziale di superficie sarà:

$$f_b(\phi) = 6 \sigma_{LV} f(\phi) \quad (4.2)$$

oppure (proposto ad esempio in [8])

$$f_b(\phi) = \begin{cases} (\sigma_{SV} - \sigma_{SL}) \phi^3 (3\phi - 4) + \sigma_{SV} & \text{se } \sigma_{SV} \geq \sigma_{SL} \\ (\sigma_{SV} - \sigma_{SL}) (3\phi + 1)(1 - \phi)^3 + \sigma_{SL} & \text{se } \sigma_{SV} < \sigma_{SL} \end{cases} \quad (4.3)$$

Specificheremo di volta in volta a quale di questi faremo riferimento e spiegheremo in particolare il significato la forma della funzione definita da (4.3).

Una volta calcolato il differenziale di (4.1) in un opportuno spazio di Hilbert e imponendo una minimizzazione di questa energia, otteniamo le equazioni di Cahn-Hilliard con condizioni ai limiti dinamiche su ϕ che presenteremo tra poco. Il fatto che ve ne siano più forme diverse è conseguenza dei diversi contesti d'utilizzo delle equazioni, motivo per il quale i coefficienti moltiplicativi vengono adattati per rispondere alle esigenze del modello.

4.1 Il problema della goccia

Nel caso del problema della goccia su un piano (1.1), il sistema di equazioni prende la forma:

$$\begin{cases} \partial_t \phi = M \Delta \mu & \text{per } (t, x) \in]0, T[\times \Omega \\ \mu = -\frac{3}{2} \epsilon \sigma_{LV} \Delta \phi + \frac{12 \sigma_{LV}}{\epsilon} f'(\phi) & \text{per } (t, x) \in]0, T[\times \Omega \\ \frac{\partial \mu}{\partial n} = 0 & \text{su } (t, x) \in]0, T[\times \partial \Omega \\ \frac{3}{2} \Gamma \epsilon \sigma_{LV} \partial_t \phi = -f'_b(\phi) - \frac{3}{2} \epsilon \sigma_{LV} \frac{\partial \phi}{\partial n} & \text{su } (t, x) \in]0, T[\times \partial \Omega \end{cases} \quad (4.4)$$

dove Γ è un coefficiente di rilassamento, M un parametro di trasporto e la funzione f_b è quella dell'equazione (4.3).

In effetti tale scelta di f_b si rivela appropriata per modellizzare il sistema oggetto del nostro studio. L'introduzione di una nuova contribuzione all'energia del sistema si basa sull'ipotesi che le forze interattive tra le due fasi e con il substrato siano a corto raggio. La funzione f_b ha come punti critici i valori $\phi = 0$ e $\phi = 1$, che non a caso corrispondono alle fasi pure e considera che quando $\sigma_{SV} \geq \sigma_{SL}$ vi sia maggiore affinità del substrato con il gas (angolo di contatto ottuso) e quando $\sigma_{SV} < \sigma_{SL}$ avvenga il contrario (angolo di contatto acuto).

Memori della relazione (1.3), che stabilisce il legame tra angolo di contatto statico (quindi valido solo dopo che il sistema è in stato stazionario), possiamo riscrivere (4.3) come:

$$f_b(\phi) = \begin{cases} \sigma_{LV} \cos \theta \phi^3 (3\phi - 4) + \sigma_{SV} & \text{se } \theta \in [\frac{\pi}{2}, \pi] \\ \sigma_{LV} \cos \theta (3\phi + 1)(1 - \phi)^3 + \sigma_{SL} & \text{se } \theta \in [0, \frac{\pi}{2}] \end{cases}$$

4.1.1 Disuguaglianza di energia

È possibile dimostrare una proprietà di **decrescenza dell'energia del sistema**, utilizzando come già fatto la formula di Green. Moltiplichiamo la prima equazione di (4.4) per μ e integriamo sul dominio Ω :

$$\int_{\Omega} \partial_t \phi \mu dx = M \int_{\Omega} \Delta \mu \mu dx = -M \int_{\Omega} |\nabla \mu|^2 dx + M \int_{\partial \Omega} \frac{\partial \mu}{\partial n} \mu dS = -M \|\mu\|_{H_0^1(\Omega)}^2$$

Allo stesso modo, moltiplichiamo per $\partial_t \phi$ e integriamo su Ω la seconda equazione di (4.4). Otteniamo:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \partial_t \phi \mu dx &= -\frac{3}{2} \epsilon \sigma_{LV} \int_{\Omega} \Delta \phi \partial_t \phi dx + \frac{12 \sigma_{LV}}{\epsilon} \int_{\Omega} f'(\phi) \partial_t \phi dx = \\ &= \frac{3}{2} \epsilon \sigma_{LV} \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \partial_t (\nabla \phi) dx - \frac{3}{2} \epsilon \sigma_{LV} \int_{\partial \Omega} \frac{\partial \phi}{\partial n} \partial_t \phi dS + \frac{12 \sigma_{LV}}{\epsilon} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} f(\phi) dx = \\ &= \frac{3 \epsilon \sigma_{LV}}{4} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\nabla \phi|^2 dx + \frac{12 \sigma_{LV}}{\epsilon} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} f(\phi) dx + \int_{\partial \Omega} \left(\frac{3}{2} \Gamma \epsilon \sigma_{LV} |\partial_t \phi|^2 + f'_b(\phi) \partial_t \phi \right) dS \end{aligned}$$

Ciò implica che:

$$\frac{d\hat{E}}{dt}(t) = -M \|\mu\|_{H_0^1(\Omega)}^2 - \frac{3}{2} \Gamma \epsilon \sigma_{LV} \|\partial_t \phi\|_{L^2(\partial \Omega)}^2 \leq 0 \quad (4.5)$$

La ricerca di un limite inferiore per l'energia è altrettanto semplice (si veda per esempio la figura 4.1), infatti:

$$C = \inf_{\phi \in [0,1]} f_b(\phi) = \begin{cases} \sigma_{SV} & \text{se } \sigma_{SV} \geq \sigma_{SL} \\ -1 + \sigma_{SL} & \text{se } \sigma_{SV} < \sigma_{SL} \end{cases} \quad \text{e} \quad \inf_{\phi \in [0,1]} f'_b(\phi) = 0$$

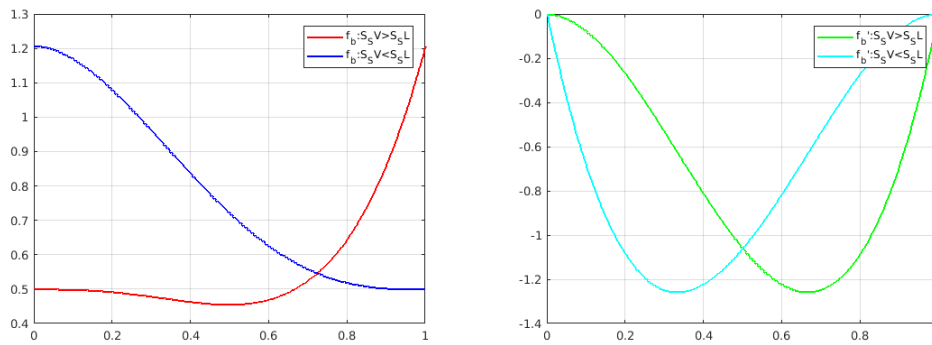


Figura 4.1: Grafico della funzione f_b (sinistra) e di f'_b (destra) qui considerate (una volta posto $\sigma_{SV} = \sigma_{SL} = 0.5$).

di conseguenza

$$\hat{E}(\phi) = \int_{\Omega} \left[\frac{3}{4} \epsilon \sigma_{LV} |\nabla \phi|^2 + \frac{12 \sigma_{LV}}{\epsilon} f(\phi) \right] dx + \int_{\partial \Omega} f_b(\phi) dS \geq C \mathbf{m}_{d-1}(\partial \Omega) > -\infty$$

con

$$0 \leq \mathbf{m}_{d-1}(\partial \Omega) < +\infty$$

La conseguenza che se ne può trarre è che se partiamo con una soluzione iniziale a energia limitata, la soluzione sarà a **energia limitata e minore o uguale all'energia iniziale** a ogni istante successivo.

4.1.2 Esistenza e unicità della soluzione

L'equazione di Cahn-Hilliard con condizioni al bordo dinamiche, di tipologia uguale o simile a (4.4), è stata ampiamente studiata dal punto di vista teorico: possiamo ad esempio citare i seguenti articoli: [38], [45], [36] e [23]. Più in particolare, un importante risultato di **esistenza e unicità** della soluzione di un'equazione molto simile alla nostra è fornito da [38] (con anche l'aggiunta dell'operatore di Laplace-Beltrami alla condizione dinamica, che ometteremo). Esso afferma:

Teorema 10. *Consideriamo un dominio regolare limitato $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ con $d = 2, 3$ e $T > 0$. Sia ϕ soluzione del sistema:*

$$\begin{cases} \partial_t \phi = \Delta \mu & \text{in }]0, T[\times \Omega \\ \mu = -\Delta \phi - \phi + \phi^3 & \text{in }]0, T[\times \Omega \\ \frac{\partial \mu}{\partial n} & \text{su } \partial \Omega \\ \frac{1}{\Gamma_s} \partial_t \phi = -\frac{\partial \phi}{\partial n} - h_s - g_s \phi & \text{su } \partial \Omega \end{cases} \quad (4.6)$$

ove Γ_s , h_s e g_s sono delle costanti reali.

Sia $\phi(t=0, \cdot) = \phi_0 \in H^3(\Omega)$ e tale che $\gamma_{\Omega}(\phi_0) \in H^1(\partial \Omega)$. Allora esiste ed è unica la soluzione globale ϕ del sistema (4.6):

$$\begin{aligned} \phi &\in C^0(0, T; H^1(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^3(\Omega)) \\ \partial_t \phi &\in L^2(0, T; V) \\ \Delta \phi &\in L^2(0, T; H^3(\Omega)) \\ \mu &\in L^2(0, T; H^3(\Omega)) \end{aligned}$$

Ove lo spazio V è definito come il completamento di $C^1(\bar{\Omega})$ per la norma indotta dal prodotto scalare:

$$(u, v)_V = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dx + g_s \int_{\partial \Omega} u v dS$$

4.1.3 Implementazione di uno schema alle differenze finite

Il tipo di dominio e la discretizzazione sono analoghi a quelli della sezione 2.5. Per contro, imponiamo delle condizioni ai limiti di Neumann omogenee a zero sulla funzione ϕ su tutti i lati del quadrilatero, tranne su quello di sinistra¹, dove vi è la nuova condizione dinamica.

$$u^n = (\phi^n, \mu^n) \in \mathbb{R}^{(2I+1)J}$$

ove $\phi^n \in \mathbb{R}^{(I+1)J}$ e $\mu^n \in \mathbb{R}^{IJ}$ con la struttura usuale.

È stato necessario salvare anche il valore al bordo di ϕ , perché tale valore agli istanti precedenti interviene all'interno dello schema numerico.

¹che nelle immagini si troverà in basso, poiché abbiamo scelto la parete di sinistra solamente per semplificare la scrittura della matrici, vista le convenzioni sullo stoccaggio delle variabili.

In linea generale, il nuovo schema conserverà la stessa forma di (3.13), tranne, per esempio, la discretizzazione della condizione dinamica, per la quale si ha:

$$\frac{3}{2}\Gamma\epsilon\sigma_{LV}\frac{\phi_{0,j}^{n+1}-\phi_{0,j}^n}{\Delta t} = -f'_b(\phi_{0,j}^{n+1}) + \frac{3}{2}\epsilon\sigma_{LV}\frac{\phi_{1,j}^{n+1}-\phi_{0,j}^{n+1}}{\Delta x} \quad (4.7)$$

che può risciversi come:

$$\frac{3}{2}\epsilon\sigma_{LV}\left(\frac{\Gamma}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x}\right)\phi_{0,j}^{n+1} - \frac{3}{2}\frac{\epsilon\sigma_{LV}}{\Delta x}\phi_{1,j}^{n+1} - \frac{3}{2}\frac{\epsilon\sigma_{LV}\Gamma}{\Delta t}\phi_{0,j}^n + f'_b(\phi_{0,j}^{n+1}) = 0$$

In seguito, facendo molta attenzione, lo schema numerico può mettersi sotto la forma:

$$F_{u^n}(u^{n+1}) = 0 = Mu^{n+1} + L_1u^n + L_2df(u^n, u^{n+1}) + L_3f'_b(u^{n+1}) \quad (4.8)$$

Osserviamo che la discretizzazione di f' (indicata con df) è come sempre data dall'espressione semi-implicita (2.17), mentre f'_b sarà utilizzata direttamente attraverso la sua espressione analitica (approccio implicito).

Senza dettagliare la forma di ogni termine, data la complessità di alcune espressioni, ci limitiamo a analizzare la **struttura della matrice** M , in un caso a piccola taglia:

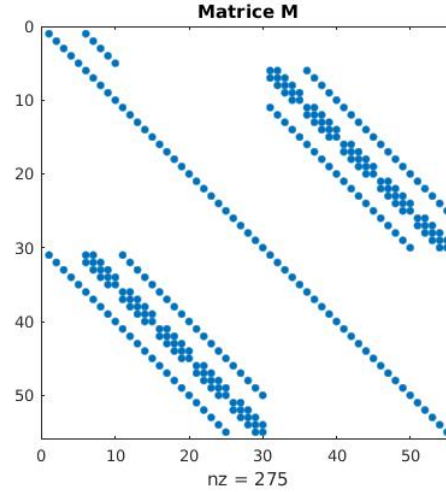


Figura 4.2: Struttura della matrice M dello schema (4.8)

Formuliamo le seguenti osservazioni, riferendoci alla figura 4.2:

- blocco di nord-ovest: i termine extra-diagonali rappresentano la **condizione al bordo dinamica**, che mette in relazione i valori al bordo (per $i = 0$) con i punti più prossimi all'interno del dominio, per $i = 1$;
- blocco di nord-est: la banda vuota in alto al blocco è diretta conseguenza del fatto che **i valori al bordo non sono salvati** per la variabile μ ;
- blocco di sud-ovest: la sotto-diagonale di taglia superiore alla diagonale rende conto della **condizione dinamica**, implementata considerando $i = 0$ come un qualunque altro punto;
- blocco di sud-est: nulla di nuovo.

4.1.4 Risultati numerici

Per verificare che il potenziale (4.3) permette di ottenere l'angolo di contatto statico desiderato, partiamo da una goccia semisferica a contorno netto (senza interfaccia di spessore ϵ) appoggiata sul bordo ove abbiamo

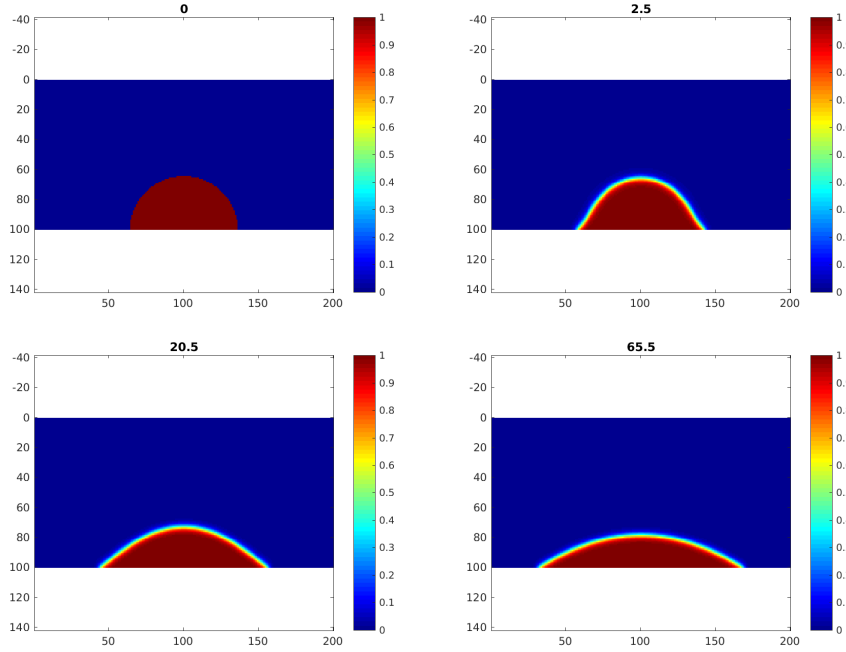


Figura 4.3: Angolo di contatto statico $\theta = \frac{\pi}{6}$

posto la condizione di Neumann non omogenea. Per semplicità, porremo $\Gamma = 0$, il che significa che la condizione non è più dinamica, il che dovrebbe permettere un'osservazione più rapida dell'angolo di Young, che la soluzione presenterà una volta raggiunta la fase stazionaria.

Siano $M = 1$, $\epsilon = 0.025$, $\sigma_{LV} = 0.07$, $I = 100$, $J = 200$ e $\Delta t = 0.5$ e sia θ variabile. Otteniamo:

- $\theta = \frac{\pi}{6}$ alla figura 4.3: l'angolo di Young è coerente con quanto imposto, il che significa che la superficie è **fortemente idrofila**;
- $\theta = \frac{7\pi}{18}$ alla figura 4.4: alla stessa maniera, l'angolo di contatto è coerente, cioè la superficie è **moderatamente idrofila**;
- $\theta = \frac{3\pi}{2}$ alla figura 4.5: l'angolo di contatto è coerente, cioè la superficie è **moderatamente idrofoba**.

4.2 Decomposizione spinodale

Una volta completata l'implementazione di uno schema numerico per la simulazione del sistema goccia-substrato governato dalle condizioni dinamiche, ci interessiamo alla dinamica del sistema in un contesto di dato iniziale lievemente perturbato intorno ad un valore medio.

Consideriamo l'equazione di Cahn-Hilliard modificata dotata delle condizioni dinamiche (forma presa da [32]):

$$\begin{cases} \partial_t \phi = M \Delta \mu & \text{per } (t, x) \in [0, T] \times \Omega \\ \mu = -\frac{3}{2} \epsilon \sigma_{LV} \Delta \phi + \frac{12 \sigma_{LV}}{\epsilon} f'(\phi) & \text{per } (t, x) \in [0, T] \times \Omega \\ \frac{\partial \mu}{\partial n} = 0 & \text{su } (t, x) \in [0, T] \times \partial \Omega \\ \frac{\epsilon^3 \Gamma}{64 M} \partial_t \phi = -f'_b(\phi) - \frac{3}{2} \epsilon \sigma_{LV} \frac{\partial \phi}{\partial n} & \text{su } (t, x) \in [0, T] \times \partial \Omega \end{cases} \quad (4.9)$$

ove i diversi coefficienti sono definiti alla sezione 4.1 e la funzione $f_b = 6 \sigma_{LV} f$.

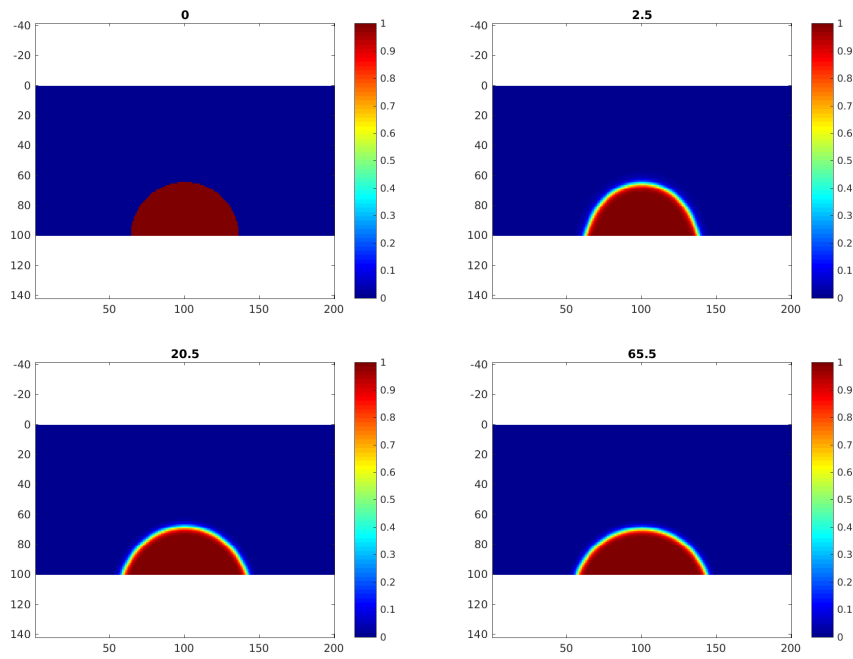


Figura 4.4: Angolo di contatto statico $\theta = \frac{7\pi}{18}$ (70 gradi)

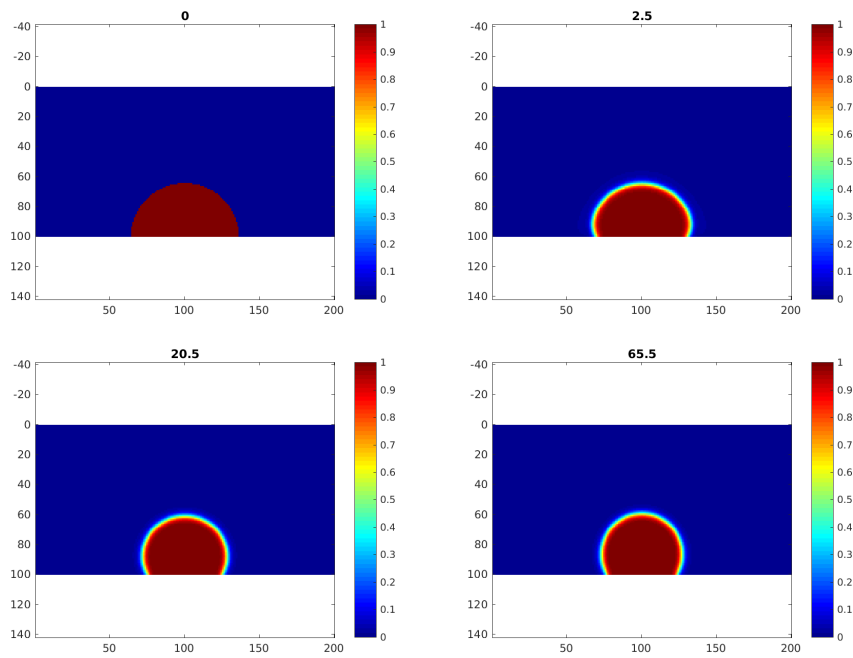


Figura 4.5: Angolo di contatto statico $\theta = \frac{3\pi}{2}$

4.2.1 Proprietà energetiche

Mostriamo una proprietà dell'energia \hat{E} del sistema che evolve secondo l'equazione (4.9): moltiplichiamo la prima equazione di (4.9) per μ e integriamo sul dominio Ω :

$$\int_{\Omega} \partial_t \phi \mu dx = M \int_{\Omega} \Delta \mu \mu dx = -M \int_{\Omega} |\nabla \mu|^2 dx + M \int_{\partial\Omega} \frac{\partial \mu}{\partial n} \mu dS = -M \|\mu\|_{H_0^1(\Omega)}^2$$

Allo stesso modo, moltiplichiamo per $\partial_t \phi$ e integriamo su Ω la seconda equazione di (4.9). Otteniamo:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \partial_t \phi \mu dx &= -\frac{3}{2} \epsilon \sigma_{LV} \int_{\Omega} \Delta \phi \partial_t \phi dx + \frac{12 \sigma_{LV}}{\epsilon} \int_{\Omega} f'(\phi) \partial_t \phi dx = \\ &= \frac{3}{2} \epsilon \sigma_{LV} \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \partial_t (\nabla \phi) dx - \frac{3}{2} \epsilon \sigma_{LV} \int_{\partial\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial n} \partial_t \phi dS + \frac{12 \sigma_{LV}}{\epsilon} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} f(\phi) dx = \\ &= \frac{3 \epsilon \sigma_{LV}}{4} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\nabla \phi|^2 dx + \frac{12 \sigma_{LV}}{\epsilon} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} f(\phi) dx + \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\epsilon^3 \Gamma}{64M} |\partial_t \phi|^2 + 6 \sigma_{LV} f'(\phi) \partial_t \phi \right) dS \end{aligned}$$

Finalmente:

$$\frac{d\hat{E}}{dt}(t) = -M \|\mu\|_{H_0^1(\Omega)}^2 - \frac{\epsilon^3 \Gamma}{64M} \|\partial_t \phi\|_{L^2(\partial\Omega)}^2 \leq 0 \quad (4.10)$$

Una minorazione per l'energia è diretta conseguenza della condizione sul potenziale di bordo $f_b = 6 \sigma_{LV} f$, infatti:

$$\hat{E}(\phi) = \int_{\Omega} \left[\frac{3}{4} \epsilon \sigma_{LV} |\nabla \phi|^2 + \frac{12 \sigma_{LV}}{\epsilon} f(\phi) \right] dx + 6 \sigma_{LV} \int_{\partial\Omega} f(\phi) dS \geq 0$$

Di conseguenza, se partiamo con una soluzione iniziale a energia limitata, la soluzione sarà a **energia limitata e minore o uguale all'energia iniziale** ad ogni istante successivo.

4.2.2 Esistenza e unicità della soluzione

Il sistema (4.9) condivide con (4.4) lo stesso teorema di esistenza, unicità e regolarità delle soluzioni, enunciato alla sezione 4.1.2.

4.2.3 Implementazione di uno schema alle differenze finite

Approssimiamo la soluzione dell'equazione (4.9) con condizioni di Neumann omogenee a zero sul parametro d'ordine su tutte le pareti tranne quella di sinistra², ove poniamo la condizione dinamica sopracitata. Utilizziamo le usuali convenzioni per ordinare le incognite, alle quali si aggiunge il valore al bordo di ϕ , in quanto il valore del parametro d'ordine sul bordo agli istanti precedenti dovrà essere adoperato.

La maggior parte delle volte, il nuovo schema conserverà la stessa forma di (3.13), salvo, per esempio, la discretizzazione della condizione dinamica, per la quale poniamo

$$\frac{\epsilon^3 \Gamma}{64M} \frac{\phi_{0,j}^{n+1} - \phi_{0,j}^n}{\Delta t} = -f'_b(\phi_{0,j}^{n+1}) + \frac{3}{2} \epsilon \sigma_{LV} \frac{\phi_{1,j}^{n+1} - \phi_{0,j}^{n+1}}{\Delta x} \quad (4.11)$$

Possiamo fare le stesse osservazioni della sezione 4.1.3 sulla struttura delle matrici e delle funzioni coinvolte nello schema numerico.

4.2.4 Risultati numerici

Simuliamo numericamente l'equazione (4.9) con un dato iniziale debolmente perturbato attorno a 0.5 ± 0.01 (in letteratura, 0.5 è chiamato «quencing value») e un potenziale di superficie $f_b = 6 \sigma_{LV} f$ ((4.2)) (si veda [32]).

Prima di presentare i risultati delle simulazioni, ricordiamo che il tempo:

²che nelle figure metteremo in basso poiché abbiamo scelto la parete di sinistra col solo scopo di semplificare le matrici, vista la maniera con la quale salviamo le incognite.

$$\tau = \frac{\epsilon^3}{96\sigma_{LV}M} \quad (4.12)$$

è il tempo caratteristico dopo il quale comincia la decomposizione spinodale del sistema, anche se nella tesi [32], l'origine di questa quantità è dettata da altre esigenze.

Simuliamo con i parametri $a_x = 0$, $b_x = 0.5$, $a_y = 0$, $b_y = 1$, $I = 100$, $J = 200$, $\epsilon = 0.025$, $\sigma_{LV} = 0.07$, $\Gamma = 0.1$, $M = 1.25$. Faremo invece variare il passo di tempo Δt :

- $\Delta t = 5 \cdot 10^{-6} \sim \tau$, si veda la figura 4.6;
- $\Delta t = 10^{-7} \ll \tau$, per quanto riguarda la figura 4.7;
- $\Delta t = 10^{-5} > \tau$, per la figura 4.8

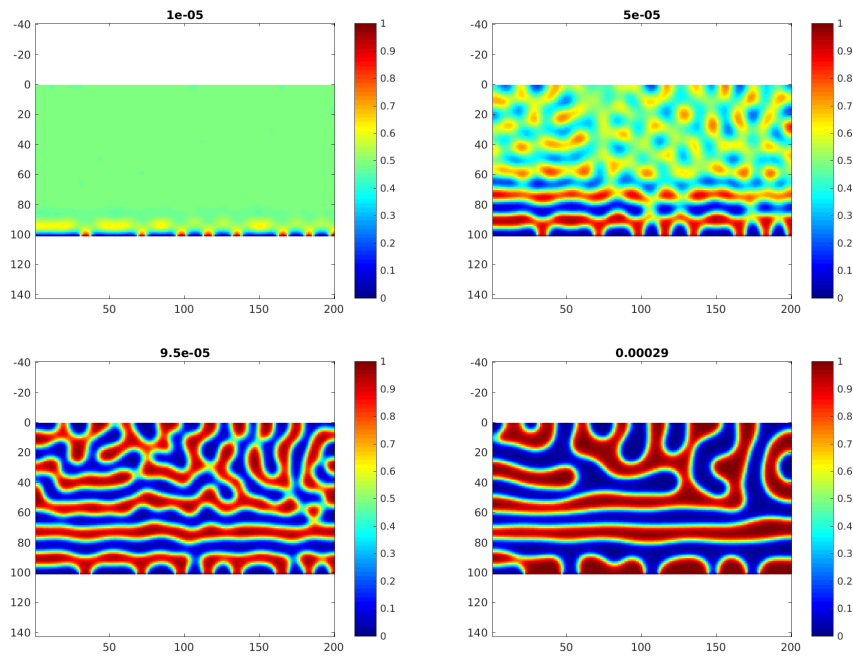


Figura 4.6: Evoluzione a partire da una soluzione iniziale debolmente perturbata: decomposizione spinodale. Caso $\Delta t \simeq \tau$

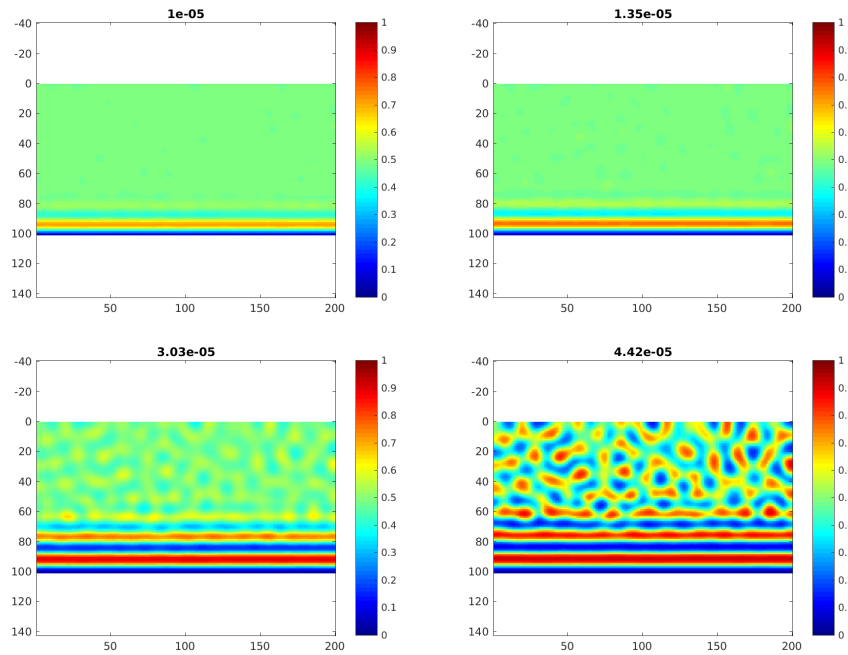


Figura 4.7: Evoluzione a partire da una soluzione iniziale debolmente perturbata: decomposizione spinodale. Caso $\Delta t \ll \tau$

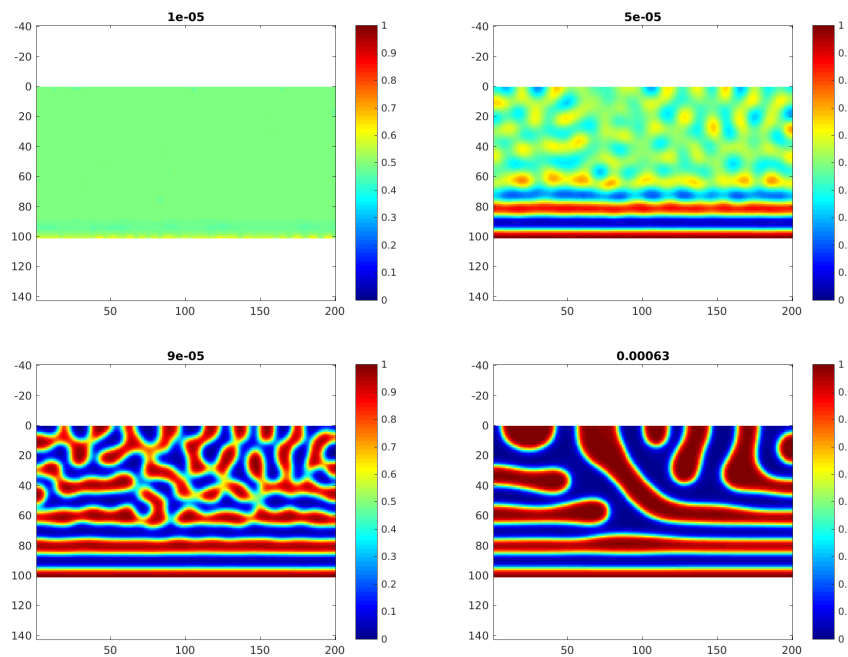


Figura 4.8: Evoluzione a partire da una soluzione iniziale debolmente perturbata: decomposizione spinodale. Caso $\Delta t > \tau$

Il fatto di far variare il passo di tempo, simulando sempre con lo stesso dato di partenza, è dettato dall'osservazione di una dipendenza dell'evoluzione del sistema dalla scelta del passo di discretizzazione. Tale fenomeno **merita di essere indagato in profondità**, anche se ad oggi non siamo riusciti ancora a spiegarlo, né dal punto di vista di un nostro errore, né dal punto di vista di un fenomeno degno di nota.

Ad ogni modo, si osserva ugualmente il fenomeno della **decomposizione spinodale**, che si propaga a partire del bordo sul quale è imposta la condizione dinamica. La forma delle **strutture parallele** alla parete inferiore è tipica di questo tipo di condizioni ai limiti (si veda [32]).

Capitolo 5

Conclusioni e sviluppi ulteriori

5.1 Conclusioni

Rispetto agli obiettivi che avevamo dettagliato all'inizio del lavoro, nella sezione 1.1, possiamo ritenerci **soddisfatti**. Infatti:

- la modellizzazione del problema della bagnatura attraverso l'equazione di Allen-Cahn dotata di condizioni di Dirichlet ha fornito dei **risultati promettenti** (si veda la sezione 2.5), in particolare in termini di angolo di Young, che è sempre coerente con i risultati teorici.

Indubbiamente, i punti deboli restano la **stabilità** degli schemi numerici utilizzati e soprattutto, il **tempo di calcolo** impiegato.

Ad ogni modo, riteniamo che tale modellizzazione del fenomeno, essendo in generale **più semplice** di quelle proposte in letteratura, possa essere proficuamente approfondita;

- l'introduzione di un metodo di penalizzazione rende conto dei risultati teorici in termini delle **modificazioni dell'angolo di contatto statico** per le soluzioni in stato di Cassie-Baxter e di Wenzel. Attualmente, volendo rimanere nel contesto dell'approssimazione per differenze finite, questo approccio ci sembra l'unico che possa portare con poco sforzo a dei risultati sull'**influenza di una texture geometrica** del substrato sul comportamento della goccia.

Un punto debole rimane il fatto di non riuscire, data la grande complessità computazionale degli algoritmi, a ridurre sufficientemente il passo di discretizzazione (e conseguentemente il parametro di penalizzazione), per rendere conto di un substrato a **trama realmente microscopica** rispetto alla dimensione della massa di fluido;

- la verifica dell'efficacia della modellizzazione (introdotta in altri lavori) della goccia attraverso l'equazione di Cahn-Hilliard, dotata di condizioni di Neumann omogenee o di condizioni dinamiche, ha dato **esito positivo**. Infatti gli angoli di contatto statico sono verificati dalla soluzione numerica e il fenomeno della decomposizione spinodale è osservabile.

Resta da comprendere il piccolo problema di dipendenza dalla discretizzazione temporale della sezione 4.2.4.

In generale, tale approccio resta il più comune in letteratura e possiamo quindi considerare che valga la pena proseguire con le ricerche in tale direzione.

5.2 Sviluppi ulteriori

Come già ricordato qui sopra, la sfida aperta su questo tipo di equazioni non lineari resta l'**efficienza degli algoritmi numerici**, che in questo lavoro è stata solo marginalmente affrontata.

I modelli continui sembrano, soprattutto per quanto riguarda l'accoppiamento Cahn-Hilliard/Navier-Stokes, in **eccellente accordo con la fisica del problema**, benché la loro risoluzione esatta sia impossibile.

Per tale ragione, riteniamo che la ricerca si debba orientare maggiormente verso lo **studio degli schemi numerici**, che potrebbero diventare più semplici grazie all'impiego del nostro nuovo approccio (una volta che si è risolta la questione della conservazione della massa) presentato nella sezione 2.4.

Bibliografia

- [1] Loi de Cassie - Wikipédia. https://fr.wikipedia.org/wiki/Loi_de_Cassie.
- [2] Loi de Wenzel - Wikipédia. https://fr.wikipedia.org/wiki/Loi_de_Wenzel.
- [3] MATLAB Documentation - Biconjugate gradients method. <https://fr.mathworks.com/help/matlab/ref/bicg.html>.
- [4] Helmut Abels. On a diffuse interface model for two-phase flows of viscous, incompressible fluids with matched densities. *Archive for rational mechanics and analysis*, 194(2):463–506, 2009.
- [5] Grégoire Allaire. *Approximation numérique et optimisation*, volume 1. École Polytechnique, 2016 edition, 2016.
- [6] Philippe Angot, Charles-Henri Bruneau, and Pierre Fabrie. A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. *Numerische Mathematik*, 81(4):497–520, 1999.
- [7] Franck Boyer. A theoretical and numerical model for the study of incompressible mixture flows. *Computers & fluids*, 31(1):41–68, 2002.
- [8] Franck Boyer and Flore Nabet. A ddfv method for a cahn-hilliard/stokes phase field model with dynamic boundary conditions. 2015.
- [9] M. Brassel and E. Bretin. A modified phase field approximation for mean curvature flow with conservation of the volume. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 34(10):1157–1180, 2011.
- [10] John W Cahn. On spinodal decomposition. *Acta metallurgica*, 9(9):795–801, 1961.
- [11] G.F. Carey and R. Krishnan. Penalty finite element method for the navier-stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 42(2):183 – 224, 1984.
- [12] Xinfu Chen. Allen-cahn dynamics and phase transitions. 2005.
- [13] Richard Courant. Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations. *Bulletin of the American mathematical Society*, 49(1):1–23, 1943.
- [14] Craig Cowan. The Cahn-Hilliard Equation as a Gradient Flow. *Simon Fraser University*, 2005.
- [15] Jane Cronin. *Fixed points and topological degree in nonlinear analysis*, volume 11. American Mathematical Soc., 1995.
- [16] Luis Cueto-Felgueroso and Jaume Peraire. A time-adaptive finite volume method for the cahn–hilliard and kuramoto–sivashinsky equations. *Journal of Computational Physics*, 227(24):9985 – 10017, 2008.
- [17] E. V. L. de Mello and Otton Teixeira da Silveira Filho. Numerical study of the cahn-hilliard equation in one, two and three dimensions. 2004.
- [18] Minh Do-Quang, Junichiro Shiomi, and Gustav Amberg. When and how surface structure determines the dynamics of partial wetting. *EPL (Europhysics Letters)*, 110(4):46002, 2015.
- [19] S Dong. On imposing dynamic contact-angle boundary conditions for wall-bounded liquid–gas flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 247:179–200, 2012.

- [20] Charles M. Elliott and Zheng Songmu. On the cahn-hilliard equation. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 96(4):339–357, Dec 1986.
- [21] EP Favvas and A Ch Mitropoulos. What is spinodal decomposition. *Journal of Engineering Science and Technology Review*, 1:25–27, 2008.
- [22] H. P. Fischer, P. Maass, and W. Dieterich. Diverging time and length scales of spinodal decomposition modes in thin films. *EPL (Europhysics Letters)*, 42(1):49, 1998.
- [23] Maurizio Grasselli, Hana Petzeltová, and Giulio Schimperna. Asymptotic behavior of a nonisothermal viscous cahn–hilliard equation with inertial term. *Journal of Differential Equations*, 239(1):38 – 60, 2007.
- [24] Andreas Hehl. The isoperimetric inequality.
- [25] J. C. Heinrich and C. A. Vionnet. The penalty method for the navier-stokes equations. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2(2):51–65, Jun 1995.
- [26] Zhengzheng Hu, Steven M Wise, Cheng Wang, and John S Lowengrub. Stable and efficient finite-difference nonlinear-multigrid schemes for the phase field crystal equation. *Journal of Computational Physics*, 228(15):5323–5339, 2009.
- [27] Jean Jacod. Theorie de l’integration. *Cours de licence (2001-2002)*, 1999.
- [28] David Jacqmin. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface. *Journal of Fluid Mechanics*, 402:57–88, 2000.
- [29] R Kenzler, F Eurich, Ph Maass, B Rinn, J Schropp, E Bohl, and W Dieterich. Phase separation in confined geometries: Solving the cahn–hilliard equation with generic boundary conditions. *Computer Physics Communications*, 133(2-3):139–157, 2001.
- [30] Junseok Kim, Seunggyu Lee, and Yongho Choi. A conservative allen-cahn equation with a space-time dependent lagrange multiplier. *International Journal of Engineering Science*, 84:11–17, 1 2014.
- [31] Ahmad Makki and Alain Miranville. Well-posedness for one-dimensional anisotropic cahn-hilliard and allen-cahn systems. *Electronic Journal of Differential Equations*, 2015(04):1–15, 2015.
- [32] Flore Nabet. *Finite-Volume schemes for multiphasic problems*. Theses, Aix Marseille université, December 2014.
- [33] Amy Novick-Cohen. The cahn–hilliard equation. *Handbook of differential equations: evolutionary equations*, 4:201–228, 2008.
- [34] Amy Novick-Cohen and Lee A Segel. Nonlinear aspects of the cahn-hilliard equation. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 10(3):277–298, 1984.
- [35] Frank Pacard. The role of minimal surfaces in the study of the allen-cahn equation. *Geometric analysis: partial differential equations and surfaces*, 570:137–163, 2012.
- [36] Jan Prüss, Reinhard Racke, and Songmu Zheng. Maximal regularity and asymptotic behavior of solutions for the cahn–hilliard equation with dynamic boundary conditions. *Annali di Matematica Pura ed Applicata*, 185(4):627–648, Oct 2006.
- [37] Nicola Pugno. Effetto loto. *Le Scienze*, pages 58–63, 2013.
- [38] Reinhard Racke, Songmu Zheng, et al. The cahn-hilliard equation with dynamic boundary conditions. *Advances in Differential Equations*, 8(1):83–110, 2003.
- [39] Sandro Salsa. *Dispense del corso di Equazioni a derivate parziali*, volume 1. 2011 edition, 2011.
- [40] Sandro Salsa. *Equazioni a derivate parziali: Metodi, modelli e applicazioni*, volume 98. Springer, 2016.

- [41] Kai Schneider. Immersed boundary methods for numerical simulation of confined fluid and plasma turbulence in complex geometries: a review. *Journal of Plasma Physics*, 81(6), 2015.
- [42] Jie Shen and Xiaofeng Yang. Numerical approximations of allen-cahn and cahn-hilliard equations. *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, 28(4):1669–1691, 2010.
- [43] Zheng Songmu. Asymptotic behavior of solution to the cahn-hilliard equation. *Applicable Analysis*, 23(3):165–184, 1986.
- [44] GH Tang, HH Xia, and Y Shi. Study of wetting and spontaneous motion of droplets on microstructured surfaces with the lattice boltzmann method. *Journal of Applied Physics*, 117(24):244902, 2015.
- [45] Hao Wu and Songmu Zheng. Convergence to equilibrium for the cahn–hilliard equation with dynamic boundary conditions. *Journal of differential equations*, 204(2):511–531, 2004.
- [46] Xiaofeng Yang. Error analysis of stabilized semi-implicit method of allen-cahn equation. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 11(4):1057–1070, 2009.
- [47] Thomas Young. An essay on the cohesion of fluids. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 95:65–87, 1805.
- [48] Jian Zhang and Qiang Du. Numerical studies of discrete approximations to the allen–cahn equation in the sharp interface limit. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 31(4):3042–3063, 2009.