Simulazione Numerica Diretta (DNS) del cambiamento di fase liquido-vapore

Contributo alla comprensione della crisi d'ebollizione

Gloria Faccanoni[1,2,3]

G. Allaire[1,2]
[1]École Polytechnique

S. Kokh[2]
[2]CEA

E. Toro[3]
[3]Università di Trento

7 luglio 2006
Università di Trento

Sommario

Il seminario porta sulla modellizzazione matematica e la simulazione numerica diretta (DNS) del cambiamento di fase liquido-vapore. Proporremo un quadro generale per la costruzione di leggi di stato che descrivono i fluidi soggetti a cambiamento di fase. Queste leggi sono particolarmente adatte ad un approccio di tipo rilassamento; mostreremo infatti che attraverso un rilassamento ritroviamo la legge di stato completa che descrive il miscuglio a saturazione. Questa costruzione è consistente da un lato con la descrizione termodinamica classica degli equilibri liquido-vapore e dall'altro con l'ottimizzazione di un funzionale convesso nello spazio degli stati. Un'analisi matematica di questa costruzione permette di dimostrare che il sistema di Eulero munito di tale legge di stato è strettamente iperbolico. Proporremo quindi uno schema d'approssimazione numerica consistente con questo approccio.

Progetto

CEA **C**ommissariat à l'**É**nergie **A**tomique

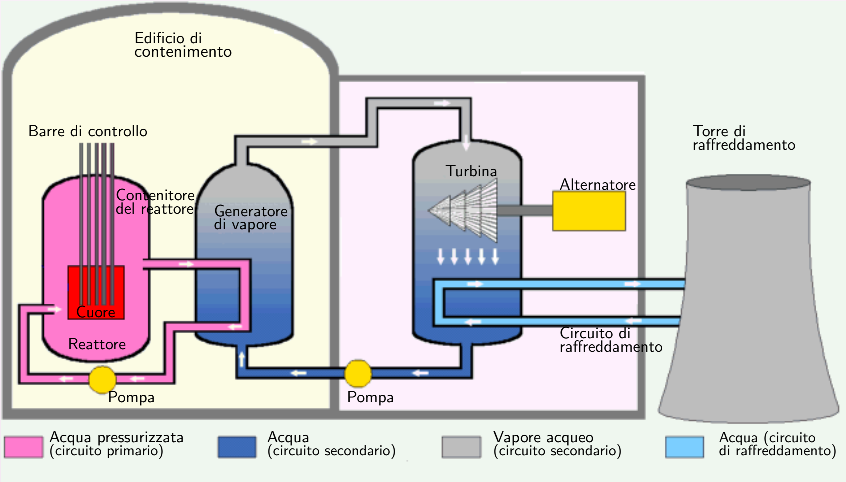
DEN **D**irection de l'**É**tude **N**ucléaire

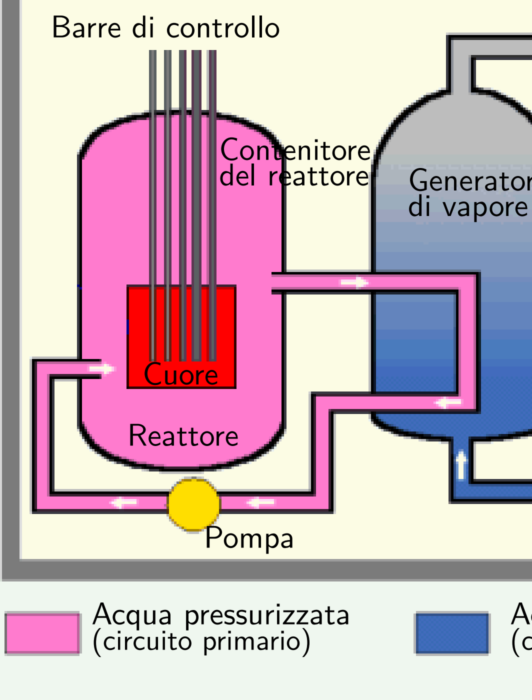
DM2S **D**épartement de **M**odélisation **S**ystèmes et **S**tructures

SFME **S**ervice **F**luides numériques, **M**odélisation et **É**tudes

LETR **L**aboratoire d'**É**tudes **T**ermiques des **R**éacteurs

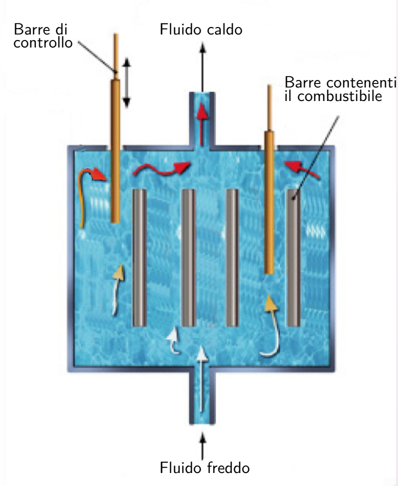
Schema di un PWR
Pressurized Water Reactor



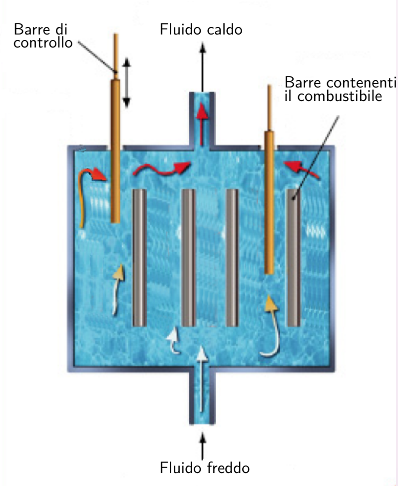


Barre di controllo
Contenitore
del reattore
Generator
di vapore
Cuore
Reattore
Pompa
Acqua pressurizzata
(circuito primario)
Ac
(c

Cuore di un PWR



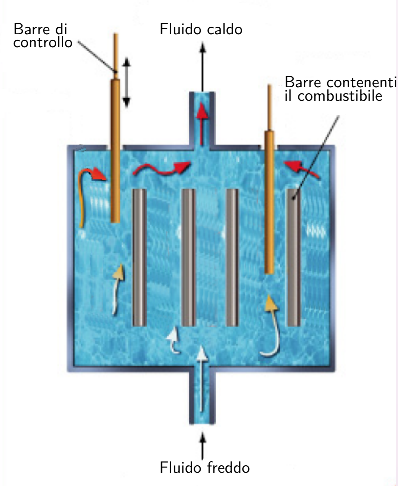
Cuore di un PWR



Qualche dato:

- barre contenenti il combustibile:
  $\varnothing \approx 1\,\mathrm{cm} \quad \times \quad 4\,\mathrm{m}$
- H_2O
  moderatore e
  trasporatore di calore
- fluido stato liquido:
  $T \approx 320\,^\circ\mathrm{C} \Rightarrow P \approx 155\,\mathrm{bar}$

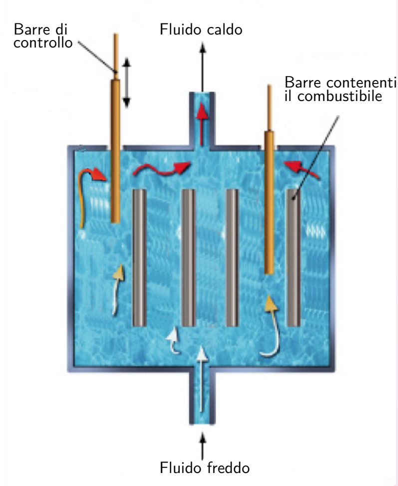
Cuore di un PWR



Qualche dato:

- barre contenenti il combustibile:
  $\varnothing \approx 1\,\text{cm} \quad \times \quad 4\,\text{m}$
- H_2O
  moderatore e trasporatore di calore
- fluido stato liquido:
  $T \approx 320\,°\text{C} \Rightarrow P \approx 155\,\text{bar}$

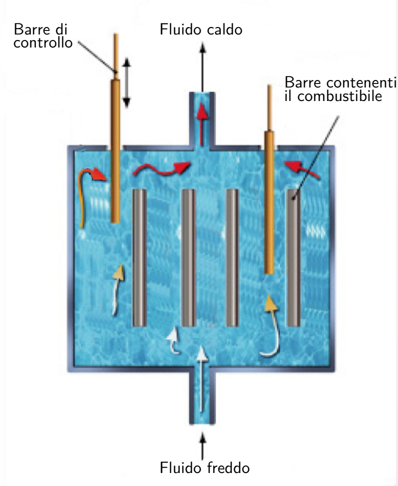
Cuore di un PWR



Qualche dato:

- barre contenenti il combustibile: $\varnothing \approx 1\,\text{cm} \quad \times \quad 4\,\text{m}$
- H_2O
  moderatore e
  trasporatore di calore
- fluido stato liquido: $T \approx 320\,^{\circ}\text{C} \Rightarrow P \approx 155\,\text{bar}$

Cuore di un PWR



- barre contenenti il combustibile: $\varnothing \approx 1\,\mathrm{cm} \quad \times \quad 4\,\mathrm{m}$
- H_2O
  moderatore e
  trasporatore di calore
- fluido stato liquido: $T \approx 320\,°\mathrm{C} \Rightarrow P \approx 155\,\mathrm{bar}$

⚠ Evitare la crisi d'ebollizione

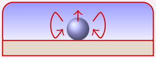
Trasmissione del calore in cambiamento di fase e crisi d'ebollizione

- **Interesse applicativo / industriale:**
  - coefficiente di scambio convettivo elevato
  - P costante $\Rightarrow$ T costante pur avendo q (flusso termico) elevato.

- **Configurazione:**
  trasmissione calore per ebollizione a contatto di una parete

Trasmissione del calore in cambiamento di fase e crisi d'ebollizione

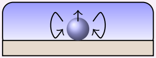
- **Interesse applicativo / industriale:**
  - coefficiente di scambio convettivo elevato
  - P costante $\Rightarrow$ T costante pur avendo q (flusso termico) elevato.



- **Configurazione:**
  trasmissione calore per ebollizione a contatto di una parete

Trasmissione del calore in cambiamento di fase e crisi d'ebollizione

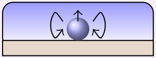
- **Interesse applicativo / industriale:**
  - coefficiente di scambio convettivo elevato
  - P costante $\Rightarrow$ T costante pur avendo q (flusso termico) elevato.



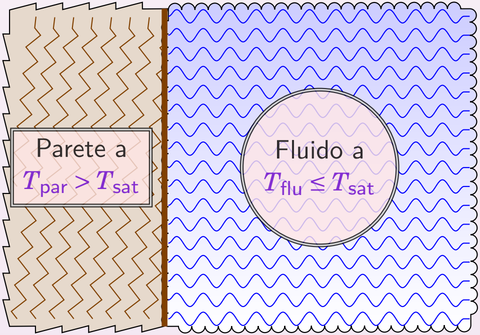
- **Configurazione:**
  trasmissione calore per ebollizione a contatto di una parete

Trasmissione del calore in cambiamento di fase e crisi d'ebollizione

- **Interesse applicativo / industriale:**
  - coefficiente di scambio convettivo elevato
  - P costante $\Rightarrow$ T costante pur avendo q (flusso termico) elevato.

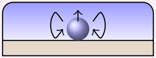


- **Configurazione:**
  trasmissione calore per ebollizione a contatto di una parete

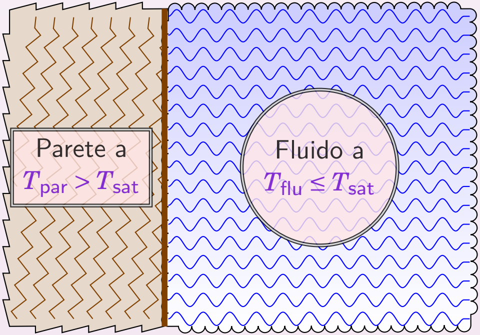


Trasmissione del calore in cambiamento di fase e crisi d'ebollizione

- **Interesse applicativo / industriale:**
  - coefficiente di scambio convettivo elevato
  - P costante $\Rightarrow$ T costante pur avendo q (flusso termico) elevato.

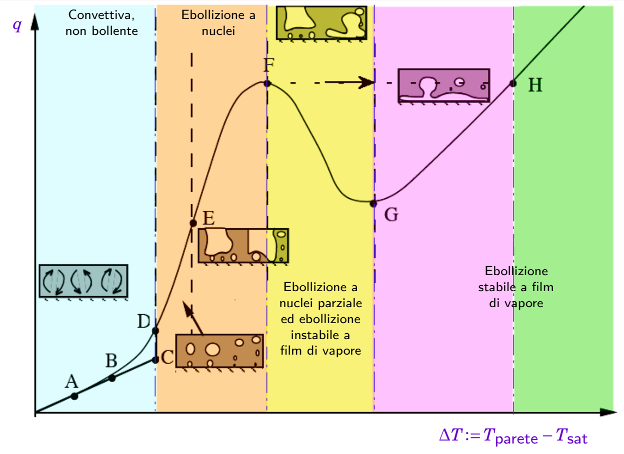


- **Configurazione:**
  trasmissione calore per ebollizione a contatto di una parete



$(T_{\text{parete}} - T_{\text{sat}}) \quad \longmapsto \quad q$
non è lineare
né monotona!

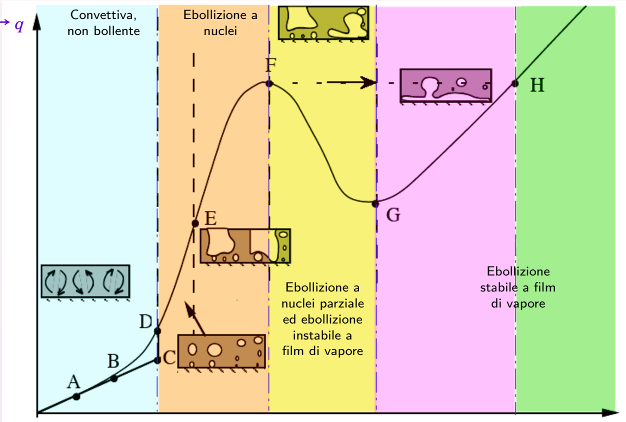
Diagramma di Nukiyama



Rappresentazione dei diversi regimi di ebollizione

Diagramma di Nukiyama

Flusso termico per unità di superficie della parete → q

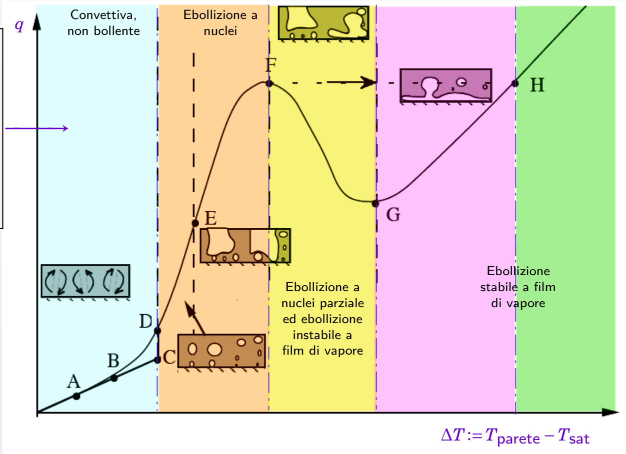


$\Delta T := T_{\text{parete}} - T_{\text{sat}}$

Rappresentazione dei diversi regimi di ebollizione

Diagramma di Nukiyama

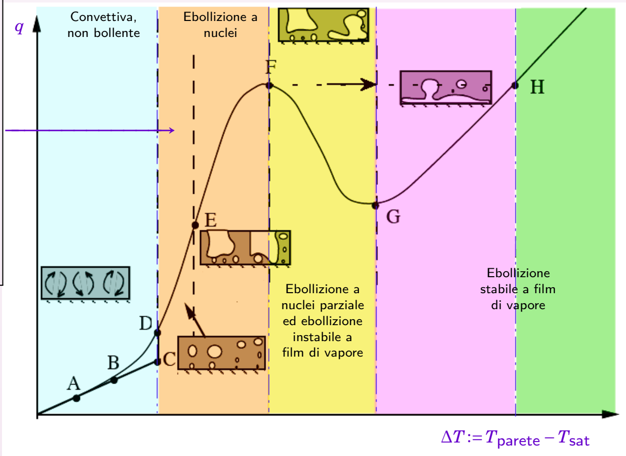
Moti convettivi lenti consentono lo smaltimento del calore senza formazione di bolle



Rappresentazione dei diversi regimi di ebollizione

Diagramma di Nukiyama

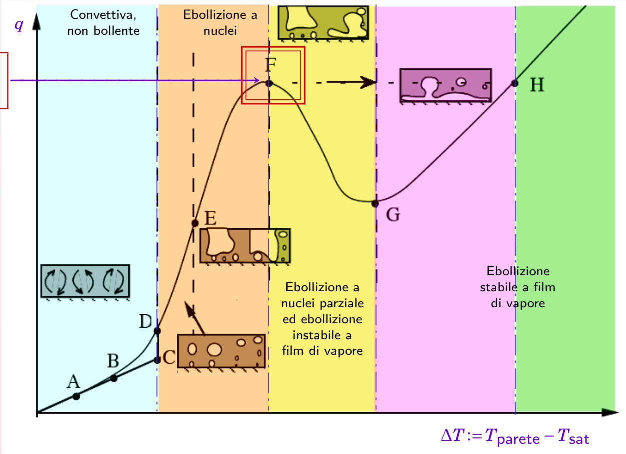
Cominciano a formarsi bolle dai centri di nucleazione (bolle sparse e colonne di vapore), l'agitazione è tumultuosa: con piccoli incrementi di T si riescono a smaltire elevati q



Rappresentazione dei diversi regimi di ebollizione

Diagramma di Nukiyama

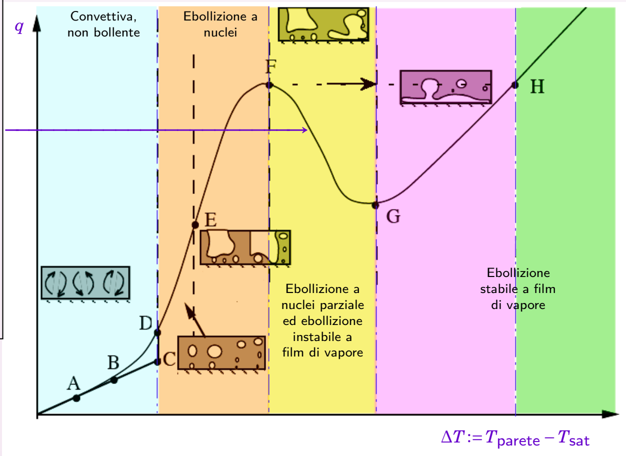
Flusso critico (CHF)



Rappresentazione dei diversi regimi di ebollizione

Diagramma di Nukiyama

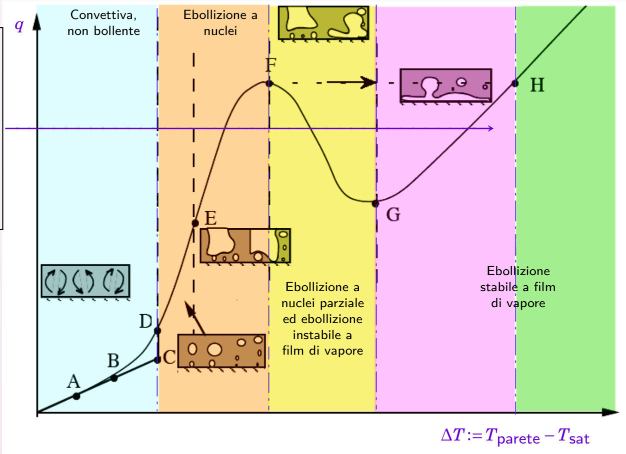
Innalzando ancora T si formano chiazze di vapore intorno alla parete che tendono a formare una pellicola isolante di vapore: q diminuisce anziché aumentare (il vapore è un pessimo conduttore di calore)



Rappresentazione dei diversi regimi di ebollizione

Diagramma di Nukiyama

q ricomincia a crescere: malgrado la pellicola con coefficiente di trasmisisone di calore elevato la ΔT_{sat} è >>

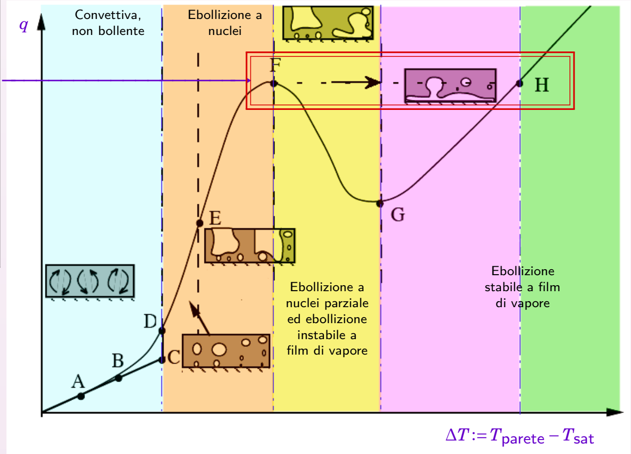


Rappresentazione dei diversi regimi di ebollizione

Crisi d'ebollizione per calefazione

Quando non si fissa ΔT_{sat} ma il flusso termico q, si "salta" direttamente da F a H: il vapore forma brutalmente una pellicola che isola termicamente la parete dal liquido

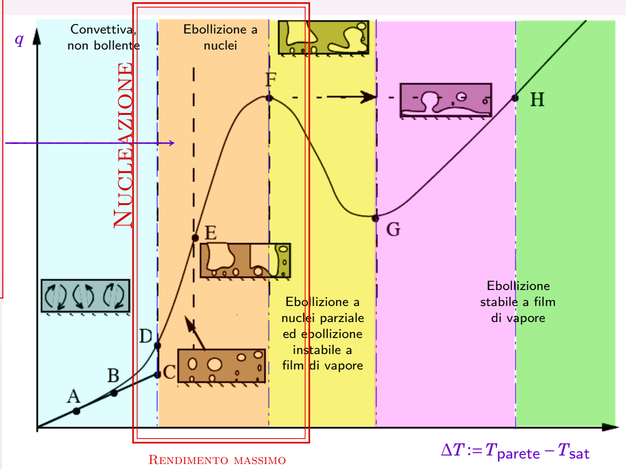
Diagramma di Nukiyama



Rappresentazione dei diversi regimi di ebollizione

Diagramma di Nukiyama

Cominciano a formarsi bolle dai centri di nucleazione (bolle sparse e colonne di vapore), l'agitazione è tumultuosa: con piccoli incrementi di T si riescono a smaltire elevati q



Rappresentazione dei diversi regimi di ebollizione

Bilancio

Caratteristiche fisiche del fenomeno

- "raffreddamento" di una parete calda: $T \approx 320\,°\mathrm{C} \Rightarrow P \approx 155\,\mathrm{bar}$,
- assenza reazioni chimiche, detonazioni, ...
- livello di dettaglio: "scala bolle" $\Rightarrow$ superficie di discontinuità, (~~LENS, RENS, omogeneizzazione ...~~)
- cinematica delle transizioni di fase liquido-vapore di un fluido semplice (acqua) vicino al CHF (Critical Heat Flux) a causa di un gradiente di temperature e/o di una depressurizzazione,
- tipo di fluidi: comprimibili entrambe le fasi.

Bilancio

Caratteristiche fisiche del fenomeno

- "raffreddamento" di una parete calda: $T \approx 320\,°\mathrm{C} \Rightarrow P \approx 155\,\mathrm{bar}$,
- assenza reazioni chimiche, detonazioni, ...
- livello di dettaglio: "scala bolle" $\Rightarrow$ superficie di discontinuità, (~~LENS, RENS, omogeneizzazione ...~~)
- cinematica delle transizioni di fase liquido-vapore di un fluido semplice (acqua) vicino al CHF (Critical Heat Flux) a causa di un gradiente di temperature e/o di una depressurizzazione,
- tipo di fluidi: comprimibili entrambe le fasi.

Bilancio

Caratteristiche fisiche del fenomeno

- "raffreddamento" di una parete calda: $T \approx 320\,°\mathrm{C} \Rightarrow P \approx 155\,\mathrm{bar}$,
- assenza reazioni chimiche, detonazioni, ...
- livello di dettaglio: "scala bolle" ⇒ superficie di discontinuità, (~~LENS, RENS, omogeneizzazione ...~~)
- cinematica delle transizioni di fase liquido-vapore di un fluido semplice (acqua) vicino al CHF (Critical Heat Flux) a causa di un gradiente di temperature e/o di una depressurizzazione,
- tipo di fluidi: comprimibili entrambe le fasi.

Bilancio

Caratteristiche fisiche del fenomeno

- "raffreddamento" di una parete calda: $T \approx 320\,°\mathrm{C} \Rightarrow P \approx 155\,\mathrm{bar}$,
- assenza reazioni chimiche, detonazioni, ...
- livello di dettaglio: "scala bolle" $\Rightarrow$ superficie di discontinuità, (~~LENS, RENS, omogeneizzazione ...~~)
- cinematica delle transizioni di fase liquido-vapore di un fluido semplice (acqua) vicino al CHF (Critical Heat Flux) a causa di un gradiente di temperature e/o di una depressurizzazione,
- tipo di fluidi: comprimibili entrambe le fasi.

Bilancio

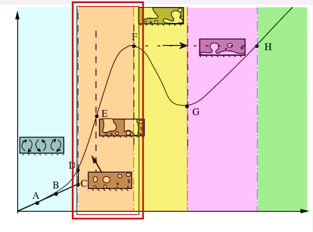
Caratteristiche fisiche del fenomeno

- "raffreddamento" di una parete calda: $T \approx 320\,^\circ\mathrm{C} \Rightarrow P \approx 155\,\mathrm{bar}$,
- assenza reazioni chimiche, detonazioni, ...
- livello di dettaglio: "scala bolle" $\Rightarrow$ superficie di discontinuità, (~~LENS, RENS, omogeneizzazione ...~~)
- cinematica delle transizioni di fase liquido-vapore di un fluido semplice (acqua) vicino al CHF (Critical Heat Flux) a causa di un gradiente di temperature e/o di una depressurizzazione,
- tipo di fluidi: comprimibili entrambe le fasi.

Bilancio

Obbiettivi della tesi: fornire un contributo alla comprensione della crisi d'ebollizione, in particolare sviluppare un modello che possa essere usato per la simulazione numerica delle:

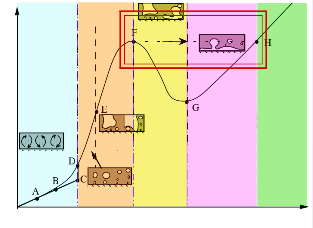
- **nucleazioni**: formazione di bolle di vapore a contatto della parete ed evoluzione vicino al CHF;



Bilancio

Obbiettivi della tesi: fornire un contributo alla comprensione della crisi d'ebollizione, in particolare sviluppare un modello che possa essere usato per la simulazione numerica delle:

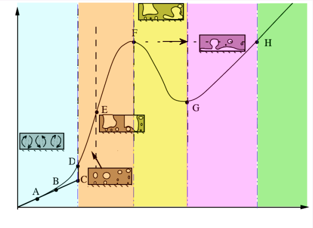
- **nucleazioni**: formazione di bolle di vapore a contatto della parete ed evoluzione vicino al CHF;
- **coalescenze**: fusione (disgregazione) bolle, creazione di una pellicola isolante.



Bilancio

Obbiettivi della tesi: fornire un contributo alla comprensione della crisi d'ebollizione, in particolare sviluppare un modello che possa essere usato per la simulazione numerica delle:

- **nucleazioni**: formazione di bolle di vapore a contatto della parete ed evoluzione vicino al CHF;
- **coalescenze**: fusione (disgregazione) bolle, creazione di una pellicola isolante.



Difficoltà principale:
gestire l'interfaccia, in particolare in cambiamento di fase.

1. Contesto ed obbiettivi
   - Pressurized Water Reactor
   - Crisi d'ebollizione
2. Modello DNS
   - Notazioni e relazioni costitutive
   - Transizioni di fase del 1°ordine
     - Ottimizzazione convessa
     - Piano bitangente ed inviluppo concavo
   - Cinematica del cambiamento di fase
3. Simulazione
   - Rilassamento
   - Schema numerico
   - Esempio di legge di stato
     - Test
4. Conclusioni & prospettive

Modellizzazione matematica dell'interfaccia liquido-vapore

In $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ a scala "bolle" l'interfaccia Γ è una superficie di discontinuità di posizione $(\mathbf{x}, t)$ sconosciuta

- Lagrange
- ALE
- Front-Tracking
- Level-Set
- Interfaccia Diffusa - Volumetric transition layer
  - Secondo Gradiente
  - Phase field

Modellizzazione matematica dell'interfaccia liquido-vapore

In $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ a scala "bolle" l'interfaccia Γ è una superficie di discontinuità di posizione $(\mathbf{x}, t)$ sconosciuta

- Lagrange
- ALE
- Front-Tracking
- Level-Set
- Interfaccia Diffusa - Volumetric transition layer
  - Secondo Gradiente
  - Phase field

Modellizzazione matematica dell'interfaccia liquido-vapore

In $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ a scala "bolle" l'interfaccia Γ è una superficie di discontinuità di posizione $(\mathbf{x}, t)$ sconosciuta

- Lagrange
- ALE
- Front-Tracking
- Level-Set
- Interfaccia Diffusa - Volumetric transition layer
  - Secondo Gradiente
  - Phase field

Modellizzazione matematica dell'interfaccia liquido-vapore

In $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ a scala "bolle" l'interfaccia Γ è una superficie di discontinuità di posizione $(\mathbf{x}, t)$ sconosciuta

- Lagrange
- ALE
- Front-Tracking
- Level-Set
- Interfaccia Diffusa - Volumetric transition layer
  - Secondo Gradiente
  - Phase field

Modellizzazione matematica dell'interfaccia liquido-vapore

In $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ a scala "bolle" l'interfaccia Γ è una superficie di discontinuità di posizione $(\mathbf{x}, t)$ sconosciuta

- Lagrange
- ALE
- Front-Tracking
- Level-Set
- Interfaccia Diffusa - Volumetric transition layer
  - Secondo Gradiente
  - Phase field

Modellizzazione matematica dell'interfaccia liquido-vapore

In $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ a scala "bolle" l'interfaccia Γ è una superficie di discontinuità di posizione $(\mathbf{x}, t)$ sconosciuta

- Front-Tracking
  - Lagrange
  - ALE
- Level-Set
- Interfaccia Diffusa - Volumetric transition layer
  - Secondo Gradiente
  - Phase field

Modellizzazione matematica dell'interfaccia liquido-vapore

In $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ a scala "bolle" l'interfaccia Γ è una superficie di discontinuità di posizione $(\mathbf{x}, t)$ sconosciuta

- Lagrange
- ALE
- Front-Tracking
- Level-Set
- Interfaccia Diffusa - Volumetric transition layer
  - Secondo Gradiente
  - Phase field

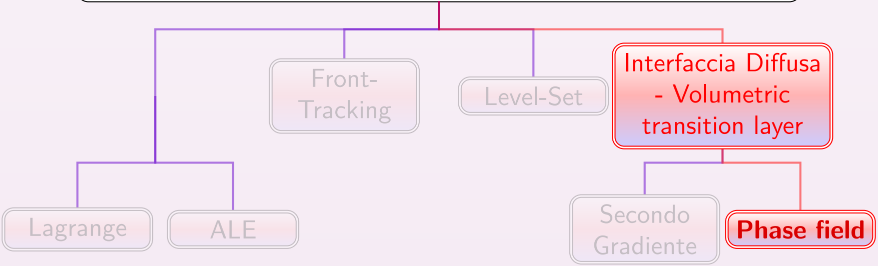
Modellizzazione matematica dell'interfaccia liquido-vapore

In $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ a scala "bolle" l'interfaccia Γ è una superficie di discontinuità di posizione $(\mathbf{x}, t)$ sconosciuta

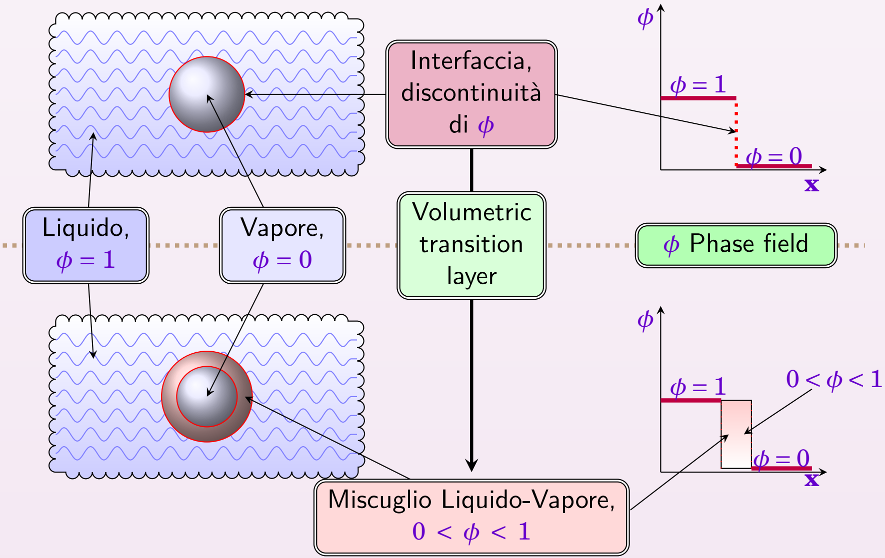
- Lagrange
- ALE
- Front-Tracking
- Level-Set
- Interfaccia Diffusa - Volumetric transition layer
  - Secondo Gradiente
  - Phase field

Modellizzazione matematica dell'interfaccia liquido-vapore

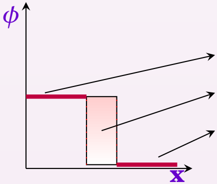
In $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ a scala "bolle" l'interfaccia Γ è una superficie di discontinuità di posizione $(\mathbf{x}, t)$ sconosciuta



Principio


Interfaccia, discontinuità di ϕ
ϕ
$\phi = 1$
$\phi = 0$
x
Liquido, $\phi = 1$
Vapore, $\phi = 0$
Volumetric transition layer
ϕ Phase field
ϕ
$\phi = 1$
$0 < \phi < 1$
$\phi = 0$
x
Miscuglio Liquido-Vapore, $0 < \phi < 1$

Principio

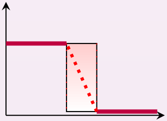


$\phi \in [0,1]$ è un indicatore di fase:

$$\begin{cases} \phi(\mathbf{x}) = 1 & \text{se in } \mathbf{x} \text{ c'è solo la fase 1} \\ 0 < \phi(\mathbf{x}) < 1 & \text{se in } \mathbf{x} \text{ c'è coesistenza delle due fasi} \\ \phi(\mathbf{x}) = 0 & \text{se in } \mathbf{x} \text{ c'è solo la fase 2} \end{cases}$$

⚠ "Costruire" una fisica nella zona di coesistenza

Nostre scelte:



$\phi \rightsquigarrow$ frazione di volume (o di massa o di energia)

Costruzione: termodinamica classica $\rightsquigarrow$ linearità

Evoluzione: 2° principio della termodinamica + trasporto

Due leggi di stato per ciascuna fase pura $\alpha = 1,2$

- τ_α volume specifico,
- ε_α energia interna specifica;
- $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha$ entropia specifica (con hessiana def. stret. neg.);
- $T_\alpha := \left(\left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial \varepsilon_\alpha} \right|_{\tau_\alpha} \right)^{-1} > 0$ temperatura, $P_\alpha := T_\alpha \left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial \tau_\alpha} \right|_{\varepsilon_\alpha} > 0$ pressione;
- $(P_\alpha, T_\alpha) \mapsto g_\alpha := \varepsilon_\alpha + P_\alpha \tau_\alpha - T_\alpha s_\alpha$ entalpia libera (di Gibbs).

Due leggi di stato per ciascuna fase pura $\alpha = 1,2$

- τ_α volume specifico,
- ε_α energia interna specifica;
- $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha$ entropia specifica (con hessiana def. stret. neg.);
- $T_\alpha := \left(\left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial \varepsilon_\alpha} \right|_{\tau_\alpha} \right)^{-1} > 0$ temperatura, $P_\alpha := T_\alpha \left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial \tau_\alpha} \right|_{\varepsilon_\alpha} > 0$ pressione;
- $(P_\alpha, T_\alpha) \mapsto g_\alpha := \varepsilon_\alpha + P_\alpha \tau_\alpha - T_\alpha s_\alpha$ entalpia libera (di Gibbs).

Due leggi di stato per ciascuna fase pura $\alpha = 1,2$

- τ_α volume specifico,
- ε_α energia interna specifica;
- $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \longmapsto s_\alpha$ entropia specifica (con hessiana def. stret. neg.);
- $T_\alpha := \left(\left.\frac{\partial s_\alpha}{\partial \varepsilon_\alpha}\right|_{\tau_\alpha} \right)^{-1} > 0$ temperatura, $P_\alpha := T_\alpha \left.\frac{\partial s_\alpha}{\partial \tau_\alpha}\right|_{\varepsilon_\alpha} > 0$ pressione;
- $(P_\alpha, T_\alpha) \longmapsto g_\alpha := \varepsilon_\alpha + P_\alpha \tau_\alpha - T_\alpha s_\alpha$ entalpia libera (di Gibbs).

Due leggi di stato per ciascuna fase pura $\alpha = 1,2$

- τ_α volume specifico,
- ε_α energia interna specifica;
- $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha$ entropia specifica (con hessiana def. stret. neg.);
- $T_\alpha := \left(\left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial \varepsilon_\alpha} \right|_{\tau_\alpha} \right)^{-1} > 0$ temperatura, $P_\alpha := T_\alpha \left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial \tau_\alpha} \right|_{\varepsilon_\alpha} > 0$ pressione;
- $(P_\alpha, T_\alpha) \mapsto g_\alpha := \varepsilon_\alpha + P_\alpha \tau_\alpha - T_\alpha s_\alpha$ entalpia libera (di Gibbs).

Legge di stato per un miscuglio di 2 fluidi senza cambiamento di fase

- $\tau := \sum_\alpha y_\alpha \tau_\alpha$ volume;
- $\varepsilon := \sum_\alpha y_\alpha \varepsilon_\alpha$ energia interna;
- y_α frazioni di massa, $\sum_\alpha y_\alpha = 1$;
- z_α frazioni di volume, $\sum_\alpha z_\alpha = 1$;
- ψ_α frazioni di energia, $\sum_\alpha \psi_\alpha = 1$;

- $\frac{1}{\tau} = \rho = \sum_\alpha z_\alpha \rho_\alpha$ densità;
- $y_\alpha \tau_\alpha = z_\alpha \tau$;
- $y_\alpha \varepsilon_\alpha = \psi_\alpha \varepsilon$;

Legge di stato per un miscuglio di 2 fluidi senza cambiamento di fase

- $\tau := \sum_\alpha y_\alpha \tau_\alpha$ volume;
- $\varepsilon := \sum_\alpha y_\alpha \varepsilon_\alpha$ energia interna;
- y_α frazioni di massa, $\sum_\alpha y_\alpha = 1$;
- z_α frazioni di volume, $\sum_\alpha z_\alpha = 1$;
- ψ_α frazioni di energia, $\sum_\alpha \psi_\alpha = 1$;

- $\frac{1}{\tau} = \rho = \sum_\alpha z_\alpha \rho_\alpha$ densità;
- $y_\alpha \tau_\alpha = z_\alpha \tau$;
- $y_\alpha \varepsilon_\alpha = \psi_\alpha \varepsilon$;

Legge di stato per un miscuglio di 2 fluidi senza cambiamento di fase

- $\tau := \sum_\alpha y_\alpha \tau_\alpha$ volume;
- $\varepsilon := \sum_\alpha y_\alpha \varepsilon_\alpha$ energia interna;
- y_α frazioni di massa, $\sum_\alpha y_\alpha = 1$;
- z_α frazioni di volume, $\sum_\alpha z_\alpha = 1$;
- ψ_α frazioni di energia, $\sum_\alpha \psi_\alpha = 1$;

- $\frac{1}{\tau} = \rho = \sum_\alpha z_\alpha \rho_\alpha$ densità;
- $y_\alpha \tau_\alpha = z_\alpha \tau$;
- $y_\alpha \varepsilon_\alpha = \psi_\alpha \varepsilon$;

Legge di stato per un miscuglio di 2 fluidi senza cambiamento di fase

- $\tau := \sum_\alpha y_\alpha \tau_\alpha$ volume;
- $\varepsilon := \sum_\alpha y_\alpha \varepsilon_\alpha$ energia interna;
- y_α frazioni di massa, $\sum_\alpha y_\alpha = 1$;
- z_α frazioni di volume, $\sum_\alpha z_\alpha = 1$;
- ψ_α frazioni di energia, $\sum_\alpha \psi_\alpha = 1$;

- $\frac{1}{\tau} = \rho = \sum_\alpha z_\alpha \rho_\alpha$ densità;
- $y_\alpha \tau_\alpha = z_\alpha \tau$;
- $y_\alpha \varepsilon_\alpha = \psi_\alpha \varepsilon$;

Entropia senza cambiamento di fase

$$(\tau,\varepsilon) \mapsto \sigma := \sum_\alpha y_\alpha s_\alpha(\tau_\alpha,\varepsilon_\alpha) = \sum_\alpha y_\alpha s_\alpha \left(\frac{z_\alpha}{y_\alpha}\tau, \frac{\psi_\alpha}{y_\alpha}\varepsilon\right).$$

Termodinamica del cambiamento di fase

Entropia senza C.F.

$$(y, z, \psi, \tau, \varepsilon) \mapsto \sigma$$

Nel miscuglio

$$T_1 = T_2 \quad P_1 = P_2 \quad g_1 = g_2 \longrightarrow \tau_1^* \neq \tau_2^* \quad \varepsilon_1^* \neq \varepsilon_2^* \quad s_1^* \neq s_2^*$$

Entropia all'equilibrio

$$(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$$

Termodinamica del cambiamento di fase

Entropia senza C.F.

$$(y, z, \psi, \tau, \varepsilon) \mapsto \sigma$$

Nel miscuglio

$$\begin{matrix} T_1 = T_2 \\ P_1 = P_2 \\ g_1 = g_2 \end{matrix} \longrightarrow \begin{matrix} \tau_1^* \neq \tau_2^* \\ \varepsilon_1^* \neq \varepsilon_2^* \\ s_1^* \neq s_2^* \end{matrix}$$

Entropia all'equilibrio

$$(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\mathrm{eq}}$$

Termodinamica del cambiamento di fase

Entropia senza C.F.

$$(y,z,\psi,\tau,\varepsilon)\mapsto\sigma$$

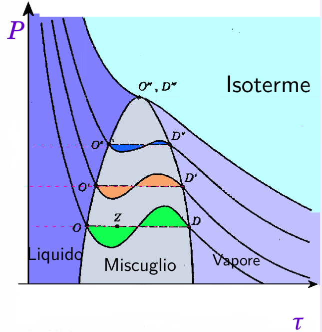
Nel miscuglio

$$\begin{array}{c} T_1=T_2\\ P_1=P_2\\ g_1=g_2 \end{array} \longrightarrow \begin{array}{c} \tau_1^*\neq\tau_2^*\\ \varepsilon_1^*\neq\varepsilon_2^*\\ s_1^*\neq s_2^* \end{array}$$

Entropia all'equilibrio

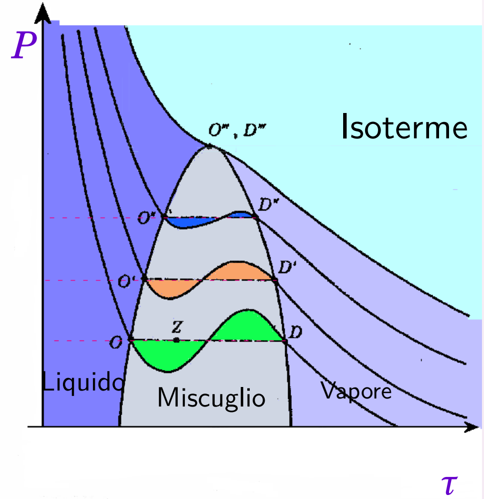
$$(\tau,\varepsilon)\mapsto s^{\text{eq}}$$

Legge di Van Der Waals
Costruzione di Maxwell



$s_1^* \neq s_2^*$

Legge di Van Der Waals
Costruzione di Maxwell



Costruzione di $(\tau,\varepsilon) \longmapsto s^{\mathrm{EQ}}$

Trovare $(\tau_1^*,\varepsilon_1^*)$ t.c., a τ,ε fissati, $\begin{cases} T_1=T_2 \\ P_1=P_2 \\ g_1=g_2 \end{cases}$

Vincolo:
$\begin{pmatrix}1\\ \tau\\ \varepsilon\end{pmatrix} = \sum_\alpha y_\alpha \begin{pmatrix}1\\ \tau_\alpha\\ \varepsilon_\alpha\end{pmatrix}$

Costruzione di $(\tau,\varepsilon) \longmapsto s^{\mathrm{EQ}}$

Trovare $(\tau_1^*,\varepsilon_1^*)$ t.c., a τ,ε fissati, $\begin{cases} T_1=T_2 \\ P_1=P_2 \\ g_1=g_2 \end{cases}$

Bitangente

Trovare due punti $A_\alpha^* := (\tau_\alpha^*,\varepsilon_\alpha^*)$ t.c.
il piano tangente in A_1^* a $s_1(\tau,\varepsilon)$ coincide
con il piano tangente in A_2^* a $s_2(\tau,\varepsilon)$

$y \in (0,1)$

$y \in [0,1]$

Vincolo:
$\begin{pmatrix}1\\ \tau\\ \varepsilon\end{pmatrix} = \sum_\alpha y_\alpha \begin{pmatrix}1\\ \tau_\alpha\\ \varepsilon_\alpha\end{pmatrix}$

Costruzione di $(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\mathrm{EQ}}$

Trovare $(\tau_1^*,\varepsilon_1^*)$ t.c., a τ,ε fissati, $\begin{cases} T_1 = T_2 \\ P_1 = P_2 \\ g_1 = g_2 \end{cases}$

Bitangente

Trovare due punti $A_\alpha^* := (\tau_\alpha^*, \varepsilon_\alpha^*)$ t.c. il piano tangente in A_1^* a $s_1(\tau,\varepsilon)$ coincide con il piano tangente in A_2^* a $s_2(\tau,\varepsilon)$

$y \in (0,1)$

$y \in [0,1]$

$s^{\mathrm{eq}}(\tau,\varepsilon) :=$ inviluppo concavo di $\max\{s_1(\tau,\varepsilon), s_2(\tau,\varepsilon)\}$

Vincolo:
$\begin{pmatrix} 1 \\ \tau \\ \varepsilon \end{pmatrix} = \sum_\alpha y_\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ \tau_\alpha \\ \varepsilon_\alpha \end{pmatrix}$

Costruzione di $(\tau,\varepsilon)\longmapsto s^{\text{EQ}}$

Trovare $(\tau_1^*,\varepsilon_1^*)$ t.c., a τ,ε fissati, $\begin{cases} T_1=T_2 \\ P_1=P_2 \\ g_1=g_2 \end{cases}$

Bitangente

Trovare due punti $A_\alpha^*:=(\tau_\alpha^*,\varepsilon_\alpha^*)$ t.c. il piano tangente in A_1^* a $s_1(\tau,\varepsilon)$ coincide con il piano tangente in A_2^* a $s_2(\tau,\varepsilon)$

Ottimizzazione

$y\in(0,1)$

$y\in[0,1]$

$s^{\text{eq}}(\tau,\varepsilon):=$ inviluppo concavo di $\max\{s_1(\tau,\varepsilon),s_2(\tau,\varepsilon)\}$

Trovare $(\tau_1^*,\varepsilon_1^*)$ t.c. $s^{\text{eq}}:=\max\limits_{y}\sum_\alpha y_\alpha s_\alpha(\tau_\alpha,\varepsilon_\alpha)$

$S^{\text{eq}}\begin{pmatrix} y \\ y\tau_1 \\ y\varepsilon_1 \end{pmatrix}:=-\left\{\left[-S_1\begin{pmatrix} y \\ y\tau_1 \\ y\varepsilon_1 \end{pmatrix}\right]\ \square\ \left[-S_2\begin{pmatrix} 1-y \\ \tau-y\tau_1 \\ \varepsilon-y\varepsilon_1 \end{pmatrix}\right]\right\}$

$S^{\text{eq}}:=-[(-S_1)^*+(-S_2)^*]^*$

Vincolo:
$\begin{pmatrix} 1 \\ \tau \\ \varepsilon \end{pmatrix}=\sum_\alpha y_\alpha\begin{pmatrix} 1 \\ \tau_\alpha \\ \varepsilon_\alpha \end{pmatrix}$

Analisi di $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\mathrm{EQ}}$

1. Ottimizzazione convessa, inf-convoluzione & trasformata di Legendre.
2. Piano bitangente & inviluppo concavo.

Ottimizzazione Convessa

$$\boxed{s_1\left(\frac{z}{y}\tau, \frac{\psi}{y}\varepsilon\right)}$$

$$\boxed{s_2\left(\frac{1-z}{1-y}\tau, \frac{1-\psi}{1-y}\varepsilon\right)}$$

Ottimizzazione Convessa

$$\boxed{s_1\left(\frac{z}{y}\tau, \frac{\psi}{y}\varepsilon\right)} \qquad \boxed{s_2\left(\frac{1-z}{1-y}\tau, \frac{1-\psi}{1-y}\varepsilon\right)}$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}} := \max_{y,z,\psi} \sum_\alpha y_\alpha s_\alpha\left(\frac{z_\alpha}{y_\alpha}\tau, \frac{\psi_\alpha}{y_\alpha}\varepsilon\right)}$$

Ottimizzazione Convessa

$$\boxed{s_1\left(\frac{z}{y}\tau, \frac{\psi}{y}\varepsilon\right)} \qquad \boxed{s_2\left(\frac{1-z}{1-y}\tau, \frac{1-\psi}{1-y}\varepsilon\right)}$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{(\tau,\varepsilon)\mapsto s^{\mathrm{eq}} := \max_{y,z,\psi} \sum_\alpha y_\alpha s_\alpha\left(\frac{z_\alpha}{y_\alpha}\tau, \frac{\psi_\alpha}{y_\alpha}\varepsilon\right)}$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{s^{\mathrm{eq}} := \max_{y,z,\psi} \left\{\sum_\alpha S_\alpha(y_\alpha, z_\alpha\tau, \psi_\alpha\varepsilon)\right\}}$$

Ottimizzazione Convessa

$$\boxed{s_1\left(\frac{z}{y}\tau,\frac{\psi}{y}\varepsilon\right)}\qquad\boxed{s_2\left(\frac{1-z}{1-y}\tau,\frac{1-\psi}{1-y}\varepsilon\right)}$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{(\tau,\varepsilon)\mapsto s^{\mathrm{eq}}:=\max_{y,z,\psi}\sum_\alpha y_\alpha s_\alpha\left(\frac{z_\alpha}{y_\alpha}\tau,\frac{\psi_\alpha}{y_\alpha}\varepsilon\right)}$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{s^{\mathrm{eq}}:=\max_{y,z,\psi}\left\{\sum_\alpha S_\alpha(y_\alpha,z_\alpha\tau,\psi_\alpha\varepsilon)\right\}=-((-S_1)\square(-S_2))}$$

Ottimizzazione Convessa

$$\boxed{s_1\left(\frac{z}{y}\tau,\frac{\psi}{y}\varepsilon\right)} \qquad \boxed{s_2\left(\frac{1-z}{1-y}\tau,\frac{1-\psi}{1-y}\varepsilon\right)}$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{(\tau,\varepsilon)\mapsto s^{\mathrm{eq}} := \max_{y,z,\psi}\sum_\alpha y_\alpha s_\alpha\left(\frac{z_\alpha}{y_\alpha}\tau,\frac{\psi_\alpha}{y_\alpha}\varepsilon\right)}$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{s^{\mathrm{eq}} := \max_{y,z,\psi}\left\{\sum_\alpha S_\alpha(y_\alpha,z_\alpha\tau,\psi_\alpha\varepsilon)\right\} = -((-S_1)\square(-S_2)) = -((-S_1)^* + (-S_2)^*)^*}$$

Ottimizzazione Convessa

$(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\mathrm{eq}}$ è

Ottimizzazione Convessa

$(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ è

- ✯ concava;

Ottimizzazione Convessa

$(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\mathrm{eq}}$ è

- concava;
- $\mathscr{C}^1$;

Ottimizzazione Convessa

$(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\mathrm{eq}}$ è

- ✭ concava;
- ✭ $\mathscr{C}^1$;
- ✭ $\mathscr{C}^2$ q.o.
  (teorema di Alexandrov);

Ottimizzazione Convessa

$(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\mathrm{eq}}$ è

- ✭ concava;
- ✭ $\mathscr{C}^1$;
- ✭ $\mathscr{C}^2$ q.o.
  (teorema di Alexandrov);
- ✭ unicità del max;

Ottimizzazione Convessa

$(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\mathsf{eq}}$ è

- ★ concava;
- ★ strettamente?
- ★ $\mathscr{C}^1$;
- ★ $\mathscr{C}^2$ q.o. (teorema di Alexandrov);
- ★ unicità del max;

Ottimizzazione Convessa

$(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\mathsf{eq}}$ è

- ★ concava;
- ★ $\mathscr{C}^1$;
- ★ $\mathscr{C}^2$ q.o. (teorema di Alexandrov);
- ★ unicità del max;

- ★ strettamente?
- ★ esistenza ed unicità della zona di miscuglio?

Ottimizzazione Convessa

$(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ è

- ★ concava;
- ★ $\mathscr{C}^1$;
- ★ $\mathscr{C}^2$ q.o. (teorema di Alexandrov);
- ★ unicità del max;

- ★ strettamente?
- ★ esistenza ed unicità della zona di miscuglio?
- ★ Iperbolicità del sistema di Eulero?

Iperbolicità

$$\partial_t \vec{V} + A(\vec{V})\,\mathrm{div}\,\vec{V} = \vec{0}; \qquad A \in \mathscr{M}^{n\times n}.$$

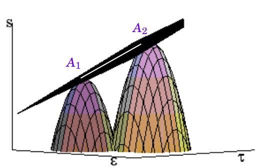
$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ autovalori di A.

- $\exists \lambda_i \notin \mathbb{R} \rightsquigarrow$ il sistema è *non iperbolico*;
- $\forall i,\ \lambda_i \in \mathbb{R} \rightsquigarrow$ il sistema è *iperbolico*:
  - $\lambda_i \neq \lambda_j \rightsquigarrow$ il sistema è *strettamente iperbolico*;
  - $\exists \lambda_i$ con molteplicità m allora:
    - dim autospazio $< m \rightsquigarrow$ il sistema è *debolmente iperbolico*,
    - dim autospazio $= m \rightsquigarrow$ il sistema è *strettamente iperbolico*.

Piano bitangente: esistenza ed unicità del miscuglio

Teorema

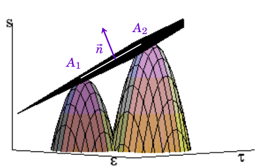
Sia $\mathscr{S}_\alpha$ la superficie $(\tau,\varepsilon)\mapsto s_\alpha(\tau,\varepsilon)$ nello spazio (τ,ε,s).
Il problema d'ottimizzazione è equivalente a trovare un punto $A_\alpha := (\tau^*_\alpha, \varepsilon^*_\alpha, s^*_\alpha := s_\alpha(\tau^*_\alpha, \varepsilon^*_\alpha))$ su ciascuna superficie tale che i due iperpiani tangenti in questi punti coincidono.



Piano bitangente: esistenza ed unicità del miscuglio

Teorema

Sia $\mathscr{S}_\alpha$ la superficie $(\tau,\varepsilon)\mapsto s_\alpha(\tau,\varepsilon)$ nello spazio (τ,ε,s).
Il problema d'ottimizzazione è equivalente a trovare un punto $A_\alpha := (\tau^*_\alpha, \varepsilon^*_\alpha, s^*_\alpha := s_\alpha(\tau^*_\alpha,\varepsilon^*_\alpha))$ su ciascuna superficie tale che i due iperpiani tangenti in questi punti coincidono.

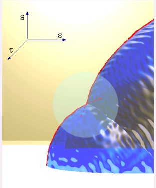


Osservazione

$$\vec{n} = \left(\frac{1}{T}, \frac{P}{T}, \frac{g}{T}\right) \quad \Rightarrow \quad P, T, g \text{ sono costanti lungo il segmento } \overline{A_1A_2}.$$

Inviluppo concavo

$(\tau,\varepsilon) \mapsto s_\alpha$

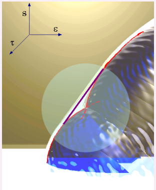


Nel miscuglio
$T_1 = T_2$
$P_1 = P_2$
$g_1 = g_2$

Costruzione:

$\boxed{\text{inviluppo concavo di } \max\{s_1(\tau,\varepsilon), s_2(\tau,\varepsilon)\}}$

$(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\mathsf{eq}}$



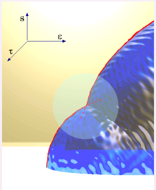
Pertanto $(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\mathsf{eq}}$

1. è concava; strettamente nelle fasi pure, non strettamente nel miscuglio;
2. ha hessiana definita strettamente negativa nelle fasi pure, negativa non strettamente nel miscuglio;

- ☞ ∃! della zona del miscuglio?
- ☞ Unicità del segmento $\overline{A_1 A_2}$ per ogni (τ,ε) fissati?

Inviluppo concavo

$(\tau,\varepsilon) \mapsto s_\alpha$

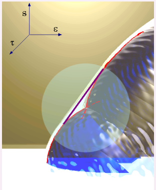


Nel miscuglio
$T_1 = T_2$
$P_1 = P_2$
$g_1 = g_2$

Costruzione:

$\boxed{\text{inviluppo concavo di } \max\{s_1(\tau,\varepsilon), s_2(\tau,\varepsilon)\}}$

$(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\mathrm{eq}}$



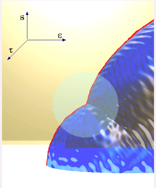
Pertanto $(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\mathrm{eq}}$

1. è concava; strettamente nelle fasi pure,
   non strettamente nel miscuglio;
2. ha hessiana definita strettamente negativa nelle fasi pure,
   negativa non strettamente nel miscuglio;

- ☞ $\exists!$ della zona del miscuglio?
- ☞ Unicità del segmento $\overline{A_1A_2}$ per ogni (τ,ε) fissati?

Inviluppo concavo

$(\tau,\varepsilon) \mapsto s_\alpha$

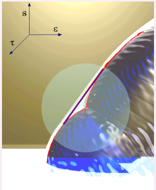


Nel miscuglio
$T_1 = T_2$
$P_1 = P_2$
$g_1 = g_2$

Costruzione:

inviluppo concavo di $\max\{s_1(\tau,\varepsilon), s_2(\tau,\varepsilon)\}$

$(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$



Pertanto $(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$

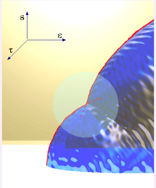
1. è concava; strettamente nelle fasi pure, non strettamente nel miscuglio;
2. ha hessiana definita strettamente negativa nelle fasi pure, negativa non strettamente nel miscuglio;

☞ $\exists!$ della zona del miscuglio?

☞ Unicità del segmento $\overline{A_1A_2}$ per ogni (τ,ε) fissati?

Inviluppo concavo

$(\tau,\varepsilon) \mapsto s_\alpha$

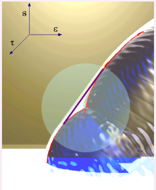


Nel miscuglio
$T_1 = T_2$
$P_1 = P_2$
$g_1 = g_2$

Costruzione:

$\boxed{\text{inviluppo concavo di } \max\{s_1(\tau,\varepsilon), s_2(\tau,\varepsilon)\}}$

$(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$



Pertanto $(\tau,\varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$

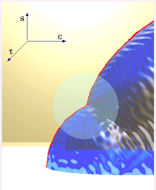
1. è concava; strettamente nelle fasi pure, non strettamente nel miscuglio;
2. ha hessiana definita strettamente negativa nelle fasi pure, negativa non strettamente nel miscuglio;

☞ $\exists!$ della zona del miscuglio?

☞ Unicità del segmento $\overline{A_1A_2}$ per ogni (τ,ε) fissati?

Inviluppo concavo

$(\tau,\varepsilon) \longmapsto s_\alpha$

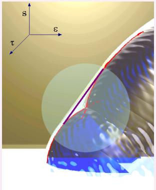


Nel miscuglio
$T_1 = T_2$
$P_1 = P_2$
$g_1 = g_2$

Costruzione:

$\boxed{\text{inviluppo concavo di } \max\{s_1(\tau,\varepsilon), s_2(\tau,\varepsilon)\}}$

$(\tau,\varepsilon) \longmapsto s^{\text{eq}}$



Pertanto $(\tau,\varepsilon) \longmapsto s^{\text{eq}}$

1. è concava; strettamente nelle fasi pure,
   non strettamente nel miscuglio;
2. ha hessiana definita strettamente negativa nelle fasi pure,
   negativa non strettamente nel miscuglio;

- $\exists!$ della zona del miscuglio?
- Unicità del segmento $\overline{A_1A_2}$ per ogni (τ,ε) fissati?

Esistenza ed unicità del segmento $\overline{A_1A_2}$

Teorema

Sia $\mathbf{w}:=(\tau,\varepsilon)$ *uno "stato saturo", allora*

1. Unicità: *esiste una ed una sola coppia di punti* $\mathbf{M}_1^*:=(\mathbf{w}_1^*,s_1^*:=s_1(\mathbf{w}_1^*))\in\mathscr{S}_1$ *e* $\mathbf{M}_2^*:=(\mathbf{w}_2^*,s_2^*:=s_2(\mathbf{w}_2^*))\in\mathscr{S}_2$ *tale che* $\mathbf{M}:=(\mathbf{w},s^{\mathrm{eq}}(\mathbf{w}))$ *appartiene al segmento* $\mathfrak{r}_{12}:=(\mathbf{M}_1^*,\mathbf{M}_2^*)=\{y\mathbf{M}_1^*+(1-y)\mathbf{M}_2^*\mid y\in[0,1]\}$.

Per ogni punto $\mathfrak{r}_{12}$ *del segmento abbiamo*

2. $s_{\tau\tau}^{\mathrm{eq}}\,s_{\varepsilon\varepsilon}^{\mathrm{eq}}=(s_{\tau\varepsilon}^{\mathrm{eq}})^2,\quad s_{\tau\tau}^{\mathrm{eq}}=\left(\frac{\varepsilon_1^*-\varepsilon_2^*}{\tau_1^*-\tau_2^*}\right)^2 s_{\varepsilon\varepsilon}^{\mathrm{eq}};$
3. $s_{\tau\tau}^{\mathrm{eq}}<0,\quad s_{\varepsilon\varepsilon}^{\mathrm{eq}}<0,\quad s_{\tau\varepsilon}^{\mathrm{eq}}\neq 0;$
4. $P\neq-\frac{\varepsilon_1^*-\varepsilon_2^*}{\tau_1^*-\tau_2^*},\quad T\neq\frac{\varepsilon_1^*-\varepsilon_2^*}{s_1^*-s_2^*}.$

Proof

Esistenza ed unicità del segmento $\overline{A_1A_2}$

Teorema

Sia $\mathbf{w} := (\tau, \varepsilon)$ *uno "stato saturo", allora*

1. Unicità*: esiste una ed una sola coppia di punti* $\mathbf{M}_1^* := (\mathbf{w}_1^*, s_1^* := s_1(\mathbf{w}_1^*)) \in \mathscr{S}_1$ *e* $\mathbf{M}_2^* := (\mathbf{w}_2^*, s_2^* := s_2(\mathbf{w}_2^*)) \in \mathscr{S}_2$ *tale che* $\mathbf{M} := (\mathbf{w}, s^{\mathrm{eq}}(\mathbf{w}))$ *appartiene al segmento* $\mathfrak{r}_{12} := (\mathbf{M}_1^*, \mathbf{M}_2^*) = \{y\mathbf{M}_1^* + (1-y)\mathbf{M}_2^* \mid y \in [0,1]\}$.

Per ogni punto $\mathfrak{r}_{12}$ *del segmento abbiamo*

2. $s_{\tau\tau}^{\mathrm{eq}}\, s_{\varepsilon\varepsilon}^{\mathrm{eq}} = (s_{\tau\varepsilon}^{\mathrm{eq}})^2, \quad s_{\tau\tau}^{\mathrm{eq}} = \left(\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*}\right)^2 s_{\varepsilon\varepsilon}^{\mathrm{eq}};$
3. $s_{\tau\tau}^{\mathrm{eq}} < 0, \quad s_{\varepsilon\varepsilon}^{\mathrm{eq}} < 0, \quad s_{\tau\varepsilon}^{\mathrm{eq}} \neq 0;$
4. $P \neq -\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*}, \quad T \neq \frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{s_1^* - s_2^*}.$

Proof

Esistenza ed unicità del segmento $\overline{A_1A_2}$

Teorema

Sia $\mathbf{w} := (\tau, \varepsilon)$ *uno "stato saturo", allora*

1. Unicità*: esiste una ed una sola coppia di punti* $\mathbf{M}_1^* := (\mathbf{w}_1^*, s_1^* := s_1(\mathbf{w}_1^*)) \in \mathscr{S}_1$ *e* $\mathbf{M}_2^* := (\mathbf{w}_2^*, s_2^* := s_2(\mathbf{w}_2^*)) \in \mathscr{S}_2$ *tale che* $\mathbf{M} := (\mathbf{w}, s^{\mathrm{eq}}(\mathbf{w}))$ *appartiene al segmento* $\mathfrak{r}_{12} := (\mathbf{M}_1^*, \mathbf{M}_2^*) = \{y\mathbf{M}_1^* + (1-y)\mathbf{M}_2^* \mid y \in [0,1]\}$.

Per ogni punto $\mathfrak{r}_{12}$ *del segmento abbiamo*

2. $s_{\tau\tau}^{\mathrm{eq}}\, s_{\varepsilon\varepsilon}^{\mathrm{eq}} = (s_{\tau\varepsilon}^{\mathrm{eq}})^2, \quad s_{\tau\tau}^{\mathrm{eq}} = \left(\frac{\varepsilon_1^*-\varepsilon_2^*}{\tau_1^*-\tau_2^*}\right)^2 s_{\varepsilon\varepsilon}^{\mathrm{eq}};$
3. $s_{\tau\tau}^{\mathrm{eq}} < 0, \quad s_{\varepsilon\varepsilon}^{\mathrm{eq}} < 0, \quad s_{\tau\varepsilon}^{\mathrm{eq}} \neq 0;$
4. $P \neq -\frac{\varepsilon_1^*-\varepsilon_2^*}{\tau_1^*-\tau_2^*}, \quad T \neq \frac{\varepsilon_1^*-\varepsilon_2^*}{s_1^*-s_2^*}.$

Proof

Esistenza ed unicità del segmento $\overline{A_1A_2}$

Teorema

Sia $\mathbf{w} := (\tau, \varepsilon)$ *uno "stato saturo", allora*

1. Unicità: *esiste una ed una sola coppia di punti* $\mathbf{M}_1^* := (\mathbf{w}_1^*, s_1^* := s_1(\mathbf{w}_1^*)) \in \mathscr{S}_1$ *e* $\mathbf{M}_2^* := (\mathbf{w}_2^*, s_2^* := s_2(\mathbf{w}_2^*)) \in \mathscr{S}_2$ *tale che* $\mathbf{M} := (\mathbf{w}, s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))$ *appartiene al segmento* $\mathfrak{r}_{12} := (\mathbf{M}_1^*, \mathbf{M}_2^*) = \{y\mathbf{M}_1^* + (1-y)\mathbf{M}_2^* \mid y \in [0,1]\}$.

Per ogni punto $\mathfrak{r}_{12}$ *del segmento abbiamo*

2. $s_{\tau\tau}^{\text{eq}}\, s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} = (s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}})^2, \quad s_{\tau\tau}^{\text{eq}} = \left(\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*}\right)^2 s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}};$
3. $s_{\tau\tau}^{\text{eq}} < 0, \quad s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} < 0, \quad s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}} \neq 0;$
4. $P \neq -\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*}, \quad T \neq \frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{s_1^* - s_2^*}.$

Proof

Esistenza ed unicità del segmento $\overline{A_1A_2}$

Teorema

Sia $\mathbf{w}:=(\tau,\varepsilon)$ *uno "stato saturo", allora*

1. Unicità: *esiste una ed una sola coppia di punti* $\mathbf{M}_1^*:=(\mathbf{w}_1^*,s_1^*:=s_1(\mathbf{w}_1^*))\in\mathscr{S}_1$ *e* $\mathbf{M}_2^*:=(\mathbf{w}_2^*,s_2^*:=s_2(\mathbf{w}_2^*))\in\mathscr{S}_2$ *tale che* $\mathbf{M}:=(\mathbf{w},s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))$ *appartiene al segmento* $\mathfrak{r}_{12}:=(\mathbf{M}_1^*,\mathbf{M}_2^*)=\{y\mathbf{M}_1^*+(1-y)\mathbf{M}_2^*\mid y\in[0,1]\}$.

Per ogni punto $\mathfrak{r}_{12}$ *del segmento abbiamo*

2. $s_{\tau\tau}^{\text{eq}}\,s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}}=(s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}})^2,\quad s_{\tau\tau}^{\text{eq}}=\left(\frac{\varepsilon_1^*-\varepsilon_2^*}{\tau_1^*-\tau_2^*}\right)^2 s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}}$;
3. $s_{\tau\tau}^{\text{eq}}<0,\quad s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}}<0,\quad s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}}\neq 0$;
4. $P\neq-\frac{\varepsilon_1^*-\varepsilon_2^*}{\tau_1^*-\tau_2^*},\quad T\neq\frac{\varepsilon_1^*-\varepsilon_2^*}{s_1^*-s_2^*}$.

Proof

Esistenza ed unicità del segmento $\overline{A_1A_2}$

Teorema

Sia $\mathbf{w} := (\tau, \varepsilon)$ *uno "stato saturo", allora*

1. Unicità*: esiste una ed una sola coppia di punti* $\mathbf{M}_1^* := (\mathbf{w}_1^*, s_1^* := s_1(\mathbf{w}_1^*)) \in \mathscr{S}_1$ *e* $\mathbf{M}_2^* := (\mathbf{w}_2^*, s_2^* := s_2(\mathbf{w}_2^*)) \in \mathscr{S}_2$ *tale che* $\mathbf{M} := (\mathbf{w}, s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))$ *appartiene al segmento* $\mathfrak{r}_{12} := (\mathbf{M}_1^*, \mathbf{M}_2^*) = \{y\mathbf{M}_1^* + (1-y)\mathbf{M}_2^* \mid y \in [0,1]\}$.

Per ogni punto $\mathfrak{r}_{12}$ *del segmento abbiamo*

2. $s_{\tau\tau}^{\text{eq}}\, s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} = (s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}})^2, \quad s_{\tau\tau}^{\text{eq}} = \left(\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*}\right)^2 s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}};$
3. $s_{\tau\tau}^{\text{eq}} < 0, \quad s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} < 0, \quad s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}} \neq 0;$
4. $P \neq -\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*}, \quad T \neq \frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{s_1^* - s_2^*}.$

Proof

Esistenza ed unicità del segmento $\overline{A_1A_2}$

Teorema

Sia $\mathbf{w}:=(\tau,\varepsilon)$ *uno "stato saturo", allora*

1. Unicità: *esiste una ed una sola coppia di punti* $\mathbf{M}_1^*:=(\mathbf{w}_1^*,s_1^*:=s_1(\mathbf{w}_1^*))\in\mathscr{S}_1$ *e* $\mathbf{M}_2^*:=(\mathbf{w}_2^*,s_2^*:=s_2(\mathbf{w}_2^*))\in\mathscr{S}_2$ *tale che* $\mathbf{M}:=(\mathbf{w},s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))$ *appartiene al segmento* $\mathfrak{r}_{12}:=(\mathbf{M}_1^*,\mathbf{M}_2^*)=\{y\mathbf{M}_1^*+(1-y)\mathbf{M}_2^*\mid y\in[0,1]\}$.

Per ogni punto $\mathfrak{r}_{12}$ *del segmento abbiamo*

2. $s^{\text{eq}}_{\tau\tau}\,s^{\text{eq}}_{\varepsilon\varepsilon}=(s^{\text{eq}}_{\tau\varepsilon})^2,\quad s^{\text{eq}}_{\tau\tau}=\left(\frac{\varepsilon_1^*-\varepsilon_2^*}{\tau_1^*-\tau_2^*}\right)^2 s^{\text{eq}}_{\varepsilon\varepsilon}$;
3. $s^{\text{eq}}_{\tau\tau}<0,\quad s^{\text{eq}}_{\varepsilon\varepsilon}<0,\quad s^{\text{eq}}_{\tau\varepsilon}\neq 0$;
4. $P\neq-\frac{\varepsilon_1^*-\varepsilon_2^*}{\tau_1^*-\tau_2^*},\quad T\neq\frac{\varepsilon_1^*-\varepsilon_2^*}{s_1^*-s_2^*}$.

Proof

Cinematica del cambiamento di fase

Equazioni di evoluzione

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0 \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = 0 \end{cases} \qquad \text{con} \quad P(\rho,\varepsilon) = \frac{\left.\dfrac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial \tau}\right|_{\varepsilon}}{\left.\dfrac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial \varepsilon}\right|_{\tau}} = -\rho^2 \frac{\left.\dfrac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial \rho}\right|_{\varepsilon}}{\left.\dfrac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial \varepsilon}\right|_{\rho}}$$

Cinematica del cambiamento di fase

Equazioni di evoluzione

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0 \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = 0 \end{cases} \qquad \text{con} \quad P(\rho,\varepsilon) = \frac{\left.\frac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial \tau}\right|_\varepsilon}{\left.\frac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial \varepsilon}\right|_\tau} = -\rho^2 \frac{\left.\frac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial \rho}\right|_\varepsilon}{\left.\frac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial \varepsilon}\right|_\rho}$$

❶ il sistema d'Eulero munito della legge di stato $(\tau,\varepsilon) \longmapsto s^{\mathrm{eq}}$ è strettamente iperbolico, ($\neq$ P-sistema)

Cinematica del cambiamento di fase

Equazioni di evoluzione

$$\begin{cases}\partial_t\rho+\operatorname{div}(\rho\mathbf{u})=0\\ \partial_t(\rho\mathbf{u})+\operatorname{div}(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}+P)=0\\ \partial_t(\rho e)+\operatorname{div}((\rho e+P)\mathbf{u})=0\end{cases}\qquad \text{con}\quad P(\rho,\varepsilon)=\frac{\left.\frac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial\tau}\right|_{\varepsilon}}{\left.\frac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial\varepsilon}\right|_{\tau}}=-\rho^2\frac{\left.\frac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial\rho}\right|_{\varepsilon}}{\left.\frac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial\varepsilon}\right|_{\rho}}$$

❶ il sistema d'Eulero munito della legge di stato $(\tau,\varepsilon)\mapsto s^{\mathrm{eq}}$ è strettamente iperbolico, ($\neq$ P-sistema)

❷ la velocità del suono

$$(\tau,\varepsilon)\mapsto c:=\sqrt{-\tau^2T\left(P^2\frac{\partial^2 s^{\mathrm{eq}}}{\partial\varepsilon^2}-2P\frac{\partial^2 s^{\mathrm{eq}}}{\partial\varepsilon\partial\tau}+\frac{\partial^2 s^{\mathrm{eq}}}{\partial\tau^2}\right)}$$

è $\mathscr{C}^0$ a tratti.

1. Contesto ed obbiettivi
   - Pressurized Water Reactor
   - Crisi d'ebollizione
2. Modello DNS
   - Notazioni e relazioni costitutive
   - Transizioni di fase del 1°ordine
     - Ottimizzazione convessa
     - Piano bitangente ed inviluppo concavo
   - Cinematica del cambiamento di fase
3. Simulazione
   - Rilassamento
   - Schema numerico
   - Esempio di legge di stato
     - Test
4. Conclusioni & prospettive

Rilassamento

Sistema all'equilibrio

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0$$
$$\partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0$$
$$\partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = -\operatorname{div}(\vartheta \, \mathbf{grad}\, T)$$
$$P(\rho, \varepsilon) = \frac{\left.\dfrac{\partial s^{\mathsf{eq}}}{\partial \tau}\right|_{\varepsilon}}{\left.\dfrac{\partial s^{\mathsf{eq}}}{\partial \varepsilon}\right|_{\tau}}$$

$\vartheta := \sum_\alpha z_\alpha \vartheta_\alpha$ con $\vartheta_\alpha :=$ conduttività termica della fase α

Rilassamento

1 velocità, 2 fluidi

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0 \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = -\operatorname{div}(\vartheta\, \mathbf{grad}\, T) \end{cases}$$

$$P(\rho,\varepsilon) = \frac{\left.\frac{\partial \sigma}{\partial \tau}\right|_{\varepsilon}}{\left.\frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}\right|_{\tau}}$$

Sistema all'equilibrio

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0$$
$$\partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0$$
$$\partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = -\operatorname{div}(\vartheta\, \mathbf{grad}\, T)$$
$$P(\rho,\varepsilon) = \frac{\left.\frac{\partial s^{\text{eq}}}{\partial \tau}\right|_{\varepsilon}}{\left.\frac{\partial s^{\text{eq}}}{\partial \varepsilon}\right|_{\tau}}$$

$\vartheta := \sum_\alpha z_\alpha \vartheta_\alpha$ con $\vartheta_\alpha :=$ conduttività termica della fase α

Rilassamento

1 velocità, 2 fluidi

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0 \\ \partial_t (\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = -\operatorname{div}(\vartheta\, \mathbf{grad}\, T) \end{cases}$$

Solo nel miscuglio

$$\begin{cases} \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad}\, z = \\ \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad}\, y = \\ \partial_t \psi + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad}\, \psi = \end{cases}$$

$$P(\rho,\varepsilon) = \frac{\left.\frac{\partial \sigma}{\partial \tau}\right|_\varepsilon}{\left.\frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}\right|_\tau}$$

Sistema all'equilibrio

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0$$
$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0$$
$$\partial_t (\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = -\operatorname{div}(\vartheta\, \mathbf{grad}\, T)$$
$$P(\rho,\varepsilon) = \frac{\left.\frac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial \tau}\right|_\varepsilon}{\left.\frac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial \varepsilon}\right|_\tau}$$

$\vartheta := \sum_\alpha z_\alpha \vartheta_\alpha$ con $\vartheta_\alpha :=$ conduttività termica della fase α

Rilassamento

1 velocità, 2 fluidi

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0 \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = -\operatorname{div}(\vartheta \, \mathbf{grad} \, T) \end{cases}$$

Solo nel miscuglio

$$\begin{cases} \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} \, z = \mu_1 \left(\frac{P_2}{T_2} - \frac{P_1}{T_1} \right) \\ \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} \, y = \mu_2 \left(\frac{g_1}{T_1} - \frac{g_2}{T_2} \right) \frac{1}{\rho} \\ \partial_t \psi + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} \, \psi = \mu_3 \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \varepsilon \end{cases}$$

$$P(\rho, \varepsilon) = \frac{\left.\frac{\partial \sigma}{\partial \tau}\right|_{\varepsilon}}{\left.\frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}\right|_{\tau}}$$

Sistema all'equilibrio

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0$$
$$\partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0$$
$$\partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = -\operatorname{div}(\vartheta \, \mathbf{grad} \, T)$$
$$P(\rho, \varepsilon) = \frac{\left.\frac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial \tau}\right|_{\varepsilon}}{\left.\frac{\partial s^{\mathrm{eq}}}{\partial \varepsilon}\right|_{\tau}}$$

$\frac{1}{\mu_i}$:= parametri di rilassamento / tempi di ritorno all'equilibrio.

$\vartheta := \sum_\alpha z_\alpha \vartheta_\alpha$ con $\vartheta_\alpha :=$ conduttività termica della fase α

Rilassamento

1 velocità, 2 fluidi

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0 \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = -\operatorname{div}(\vartheta\, \mathbf{grad}\, T) \end{cases}$$

Solo nel miscuglio

$$\begin{cases} \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad}\, z = \mu_1 \left(\dfrac{P_2}{T_2} - \dfrac{P_1}{T_1} \right) \\ \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad}\, y = \mu_2 \left(\dfrac{g_1}{T_1} - \dfrac{g_2}{T_2} \right) \dfrac{1}{\rho} \\ \partial_t \psi + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad}\, \psi = \mu_3 \left(\dfrac{1}{T_1} - \dfrac{1}{T_2} \right) \varepsilon \end{cases}$$

$$P(\rho, \varepsilon) = \frac{\left.\dfrac{\partial \sigma}{\partial \tau}\right|_{\varepsilon}}{\left.\dfrac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}\right|_{\tau}}$$

$$\xrightarrow[\mu_1, \mu_2, \mu_3 \to +\infty]{\text{Formale}}$$

Sistema all'equilibrio

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0$$
$$\partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0$$
$$\partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = -\operatorname{div}(\vartheta\, \mathbf{grad}\, T)$$
$$P(\rho, \varepsilon) = \frac{\left.\dfrac{\partial s^{\text{eq}}}{\partial \tau}\right|_{\varepsilon}}{\left.\dfrac{\partial s^{\text{eq}}}{\partial \varepsilon}\right|_{\tau}}$$

$\dfrac{1}{\mu_i} :=$ parametri di rilassamento / tempi di ritorno all'equilibrio.

$\vartheta := \sum_\alpha z_\alpha \vartheta_\alpha$ con $\vartheta_\alpha :=$ conduttività termica della fase α

Schema di rilassamento per il modello bifluido

$$\mathbf{V}^n \xrightarrow[\text{Risoluzione numerica del sistema omogeneo}]{\text{Passo convettivo}} \mathbf{V}^{n+1/3}$$

$$\left[\begin{array}{l}
\begin{cases}
\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho\mathbf{u}) = 0\\
\partial_t(\rho\mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u} + P) = 0\\
\partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = 0
\end{cases}\\
\begin{cases}
\partial_t z + \mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\, z = 0\\
\partial_t y + \mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\, y = 0
\end{cases}\\
T_1 = T_2
\end{array}\right.$$

Oppure

$$\left[\begin{array}{l}
\begin{cases}
\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho\mathbf{u}) = 0\\
\partial_t(\rho\mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u} + P) = 0\\
\partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = 0
\end{cases}\\
\begin{cases}
\partial_t z + \mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\, z = 0\\
\partial_t y + \mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\, y = 0\\
\partial_t \psi + \mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\, \psi = 0
\end{cases}
\end{array}\right.$$

Schema di rilassamento per il modello bifluido

$$\mathbf{V}^n \xrightarrow[\text{Risoluzione numerica del sistema omogeneo}]{\text{Passo convettivo}} \mathbf{V}^{n+1/3} \xrightarrow[\text{Risoluzione implicita dell'equazione di diffusione del calore}]{\text{Calore}} \mathbf{V}^{n+2/3}$$

Risoluzione numerica del sistema omogeneo

$$\left[\begin{array}{l}\begin{cases}\partial_t\rho+\operatorname{div}(\rho\mathbf{u})=0\\ \partial_t(\rho\mathbf{u})+\operatorname{div}(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}+P)=0\\ \partial_t(\rho e)+\operatorname{div}((\rho e+P)\mathbf{u})=0\end{cases}\\ \begin{cases}\partial_t z+\mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\, z=0\\ \partial_t y+\mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\, y=0\end{cases}\\ T_1=T_2\end{array}\right.$$

Oppure

$$\left[\begin{array}{l}\begin{cases}\partial_t\rho+\operatorname{div}(\rho\mathbf{u})=0\\ \partial_t(\rho\mathbf{u})+\operatorname{div}(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}+P)=0\\ \partial_t(\rho e)+\operatorname{div}((\rho e+P)\mathbf{u})=0\end{cases}\\ \begin{cases}\partial_t z+\mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\, z=0\\ \partial_t y+\mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\, y=0\\ \partial_t \psi+\mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\, \psi=0\end{cases}\end{array}\right.$$

Risoluzione implicita dell'equazione di diffusione del $\boxed{\text{calore}}$

$$\left[\begin{array}{l}\begin{cases}\partial_t\rho=0\\ \partial_t(\rho\mathbf{u})=0\\ \partial_t(\rho e)=-\operatorname{div}(\vartheta\,\mathbf{grad}\,T)\end{cases}\\ \begin{cases}\partial_t z=0\\ \partial_t y=0\end{cases}\\ T_1=T_2\end{array}\right.$$

Schema di rilassamento per il modello bifluido

$$\mathbf{V}^n \xrightarrow{\text{Passo convettivo}} \mathbf{V}^{n+1/3} \xrightarrow{\text{Calore}} \mathbf{V}^{n+2/3} \xrightarrow{\text{Rilassamento/Proiezione}} \mathbf{V}^{n+1}$$

Passo convettivo

Risoluzione numerica del sistema omogeneo

$$\left[\begin{array}{l}\begin{cases}\partial_t\rho+\operatorname{div}(\rho\mathbf{u})=0\\ \partial_t(\rho\mathbf{u})+\operatorname{div}(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}+P)=0\\ \partial_t(\rho e)+\operatorname{div}((\rho e+P)\mathbf{u})=0\end{cases}\\ \begin{cases}\partial_t z+\mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\,z=0\\ \partial_t y+\mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\,y=0\end{cases}\\ T_1=T_2\end{array}\right.$$

Oppure

$$\left[\begin{array}{l}\begin{cases}\partial_t\rho+\operatorname{div}(\rho\mathbf{u})=0\\ \partial_t(\rho\mathbf{u})+\operatorname{div}(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}+P)=0\\ \partial_t(\rho e)+\operatorname{div}((\rho e+P)\mathbf{u})=0\end{cases}\\ \begin{cases}\partial_t z+\mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\,z=0\\ \partial_t y+\mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\,y=0\\ \partial_t\psi+\mathbf{u}\cdot\mathbf{grad}\,\psi=0\end{cases}\end{array}\right.$$

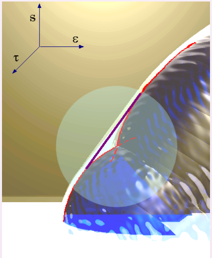
Calore

Risoluzione implicita dell'equazione di diffusione del $\boxed{\text{calore}}$

$$\left[\begin{array}{l}\begin{cases}\partial_t\rho=0\\ \partial_t(\rho\mathbf{u})=0\\ \partial_t(\rho e)=-\operatorname{div}(\vartheta\,\mathbf{grad}\,T)\end{cases}\\ \begin{cases}\partial_t z=0\\ \partial_t y=0\end{cases}\\ T_1=T_2\end{array}\right.$$

Rilassamento/Proiezione

Proiezione sulla varietà d'equilibrio $\boxed{\text{termico, meccanico, chimico}}$ definita dalla superficie $(\tau,\varepsilon)\mapsto s^{\mathrm{eq}}(\tau,\varepsilon)$



Caso di due Gas Perfetti

Leggi di stato

$$s_\alpha = c_{v_\alpha} \log\left(\varepsilon_\alpha (\tau_\alpha)^{\gamma_\alpha - 1}\right) + s_\alpha^0 \qquad \text{con} \qquad \varepsilon_\alpha = c_{v_\alpha} T_\alpha$$

s_α^0 stato termodinamico di riferimento (non lede la generalità supporre $s_\alpha^0 = 0$).

Caso di due Gas Perfetti

Leggi di stato

$$s_\alpha = c_{v_\alpha} \log\left(\varepsilon_\alpha (\tau_\alpha)^{\gamma_\alpha - 1}\right) + s_\alpha^0 \qquad \text{con} \qquad \varepsilon_\alpha = c_{v_\alpha} T_\alpha$$

s_α^0 stato termodinamico di riferimento (non lede la generalità supporre $s_\alpha^0 = 0$).

Transizione di fase del 1°ordine

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1^* = \varepsilon_2^* \quad &\Leftrightarrow \quad c_{v_1} = c_{v_2},\ \gamma_1 \neq \gamma_2;\\
s_1^* = s_2^* \quad &\Leftrightarrow \quad c_{v_1} \neq c_{v_2},\ c_{v_1}(\gamma_1 - 1) = c_{v_2}(\gamma_2 - 1);\\
\tau_1^* = \tau_2^* \quad &\Leftrightarrow \quad c_{v_1} \neq c_{v_2},\ c_{p_1} = c_{p_2}.
\end{aligned}$$

$$c_{v_1} \neq c_{v_2} \qquad c_{v_1}(\gamma_1 - 1) \neq c_{v_2}(\gamma_2 - 1) \qquad c_{v_1}\gamma_1 \neq c_{v_2}\gamma_2$$

Tappa di proiezione

Equivale alla risoluzione del sistema:

$$\left\{\begin{array}{rcl} T_1 & = & T_2 \\ (\gamma_1-1)c_{v_1}\tau_2 & = & (\gamma_2-1)c_{v_2}\tau_1 \\ c_{v_1}\left[\log\left(\varepsilon_1\ \tau_1^{\gamma_1-1}\right)-\gamma_1\right] & = & c_{v_2}\left[\log\left(\varepsilon_2\ \tau_2^{\gamma_2-1}\right)-\gamma_2\right] \end{array}\right.$$

con i vincoli

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \tau \\ \varepsilon \end{pmatrix} = \sum_{\alpha=1,2} y_\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ \tau_\alpha \\ \varepsilon_\alpha \end{pmatrix}$$

Calcolo "esatto" della proiezione

$$\tau_\alpha^* = A_\alpha (T^*)^B$$

dove

$$\begin{cases} B = \dfrac{c_{v_2} - c_{v_1}}{(\gamma_1 - 1)c_{v_1} - (\gamma_2 - 1)c_{v_2}} \\ A_1 = \left[\dfrac{(c_{v_2})^{c_{v_2}}}{(c_{v_1})^{c_{v_1}}} \left(\dfrac{(\gamma_2 - 1)c_{v_2}}{(\gamma_1 - 1)c_{v_1}} \right)^{(\gamma_2 - 1)c_{v_2}} \exp(c_{v_1}\gamma_1 - c_{v_2}\gamma_2) \right]^{\frac{1}{(\gamma_1 - 1)c_{v_1} - (\gamma_2 - 1)c_{v_2}}} \\ A_2 = \left[\dfrac{(c_{v_2})^{c_{v_2}}}{(c_{v_1})^{c_{v_1}}} \left(\dfrac{(\gamma_2 - 1)c_{v_2}}{(\gamma_1 - 1)c_{v_1}} \right)^{(\gamma_1 - 1)c_{v_1}} \exp(c_{v_1}\gamma_1 - c_{v_2}\gamma_2) \right]^{\frac{1}{(\gamma_1 - 1)c_{v_1} - (\gamma_2 - 1)c_{v_2}}} \end{cases}$$

e $(\tau, \varepsilon) \mapsto T^*$ è la temperatura di saturazione.

Temperatura di saturazione

T^* è definita implicitamente da $f(T)=0$ dove

$$\begin{array}{rcl} f:(0,+\infty) & \to & \mathbb{R} \\ T & \mapsto & a_3 T^B + a_2 T^{B-1} + a_1 \end{array}$$

$$\begin{cases} a_1 := \tau\left(c_{v_2} - c_{v_1}\right), \\ a_2 := \varepsilon\left[\dfrac{(\gamma_1-1)c_{v_1}}{(\gamma_2-1)c_{v_2}} - 1\right]\left[\dfrac{(c_{v_2})^{c_{v_2}}}{(c_{v_1})^{c_{v_1}}}\left(\dfrac{(\gamma_2-1)c_{v_2}}{(\gamma_1-1)c_{v_1}}\right)^{(\gamma_1-1)c_{v_1}}\exp(c_{v_1}\gamma_1 - c_{v_2}\gamma_2)\right]^{\frac{1}{(\gamma_1-1)c_{v_1}-(\gamma_2-1)c_{v_2}}} \\ a_3 := c_{v_1}\left[1 - \dfrac{(\gamma_1-1)}{(\gamma_2-1)}\right]\left[\dfrac{(c_{v_2})^{c_{v_2}}}{(c_{v_1})^{c_{v_1}}}\left(\dfrac{(\gamma_2-1)c_{v_2}}{(\gamma_1-1)c_{v_1}}\right)^{(\gamma_1-1)c_{v_1}}\exp(c_{v_1}\gamma_1 - c_{v_2}\gamma_2)\right]^{\frac{1}{(\gamma_1-1)c_{v_1}-(\gamma_2-1)c_{v_2}}} \end{cases}$$

Temperatura di saturazione

T^* è definita implicitamente da $f(T)=0$ dove

$$\begin{array}{rcl} f:(0,+\infty) & \to & \mathbb{R} \\ T & \mapsto & a_3T^B+a_2T^{B-1}+a_1 \end{array}$$

$$\begin{cases} a_1 := \tau\left(c_{v_2}-c_{v_1}\right), \\ a_2 := \varepsilon\left[\dfrac{(\gamma_1-1)c_{v_1}}{(\gamma_2-1)c_{v_2}}-1\right]\left[\dfrac{(c_{v_2})^{c_{v_2}}}{(c_{v_1})^{c_{v_1}}}\left(\dfrac{(\gamma_2-1)c_{v_2}}{(\gamma_1-1)c_{v_1}}\right)^{(\gamma_1-1)c_{v_1}}\exp(c_{v_1}\gamma_1-c_{v_2}\gamma_2)\right]^{\frac{1}{(\gamma_1-1)c_{v_1}-(\gamma_2-1)c_{v_2}}} \\ a_3 := c_{v_1}\left[1-\dfrac{(\gamma_1-1)}{(\gamma_2-1)}\right]\left[\dfrac{(c_{v_2})^{c_{v_2}}}{(c_{v_1})^{c_{v_1}}}\left(\dfrac{(\gamma_2-1)c_{v_2}}{(\gamma_1-1)c_{v_1}}\right)^{(\gamma_1-1)c_{v_1}}\exp(c_{v_1}\gamma_1-c_{v_2}\gamma_2)\right]^{\frac{1}{(\gamma_1-1)c_{v_1}-(\gamma_2-1)c_{v_2}}} \end{cases}$$

Inoltre l'equazione della curva di saturazione $(\tau,\varepsilon)\mapsto P^*$ è

$$P^*=(T^*)^{\frac{(c_{v_2}\gamma_2-c_{v_1}\gamma_1)}{(c_{v_2}(\gamma_2-1)-c_{v_1}(\gamma_1-1))}}\left[\frac{\left((\gamma_2-1)^{(\gamma_2-1)}c_{v_2}^{\gamma_2}\right)^{c_{v_2}}}{\left((\gamma_1-1)^{(\gamma_1-1)}c_{v_1}^{\gamma_1}\right)^{c_{v_1}}}\exp\left(c_{v_1}\gamma_1-c_{v_2}\gamma_2\right)\right]^{\frac{1}{(c_{v_2}(\gamma_2-1)-c_{v_1}(\gamma_1-1))}}$$

$\Rightarrow$ assenza punto critico (legge troppo semplice).

Un esempio monodimensionale

3 bolle di vapore immerse in acqua. Le due fasi sono inizialmente immobili. Creiamo artificialmente una compressione imponendo una velocità fittizia sulle maglie a sinistra alfine di simulare il movimento di un pistone. Si osserva che tale movimento va a generare un'onda di pressione che si muove da sinistra verso destra. Allorché raggiunge una bolla, essa va a perturbare l'equilibrio termomeccanico e le bolle di vapore si liquefanno.

2 gas perfetti

		Liquido	Vapore
c_v	$[\mathrm{J} \cdot \mathrm{kg}^{-1} \cdot \mathrm{K}^{-1}]$	1816.2	1040.14
γ	$(= c_p/c_v)$	2.35	1.43

Un esempio monodimensionale

3 bolle di vapore immerse in acqua. Le due fasi sono inizialmente immobili. Creiamo artificialmente una compressione imponendo una velocità fittizia sulle maglie a sinistra alfine di simulare il movimento di un pistone. Si osserva che tale movimento va a generare un'onda di pressione che si muove da sinistra verso destra. Allorché raggiunge una bolla, essa va a perturbare l'equilibrio termomeccanico e le bolle di vapore si liquefanno.

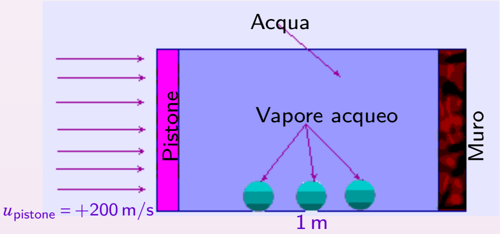
Dati iniziali del problema di Riemann

$T\|_{t=0} = 400\,\mathrm{K}$	in tutto il dominio
$(P, \tau_1, \tau_2)\|_{t=0}(T)$	tali che ci sia equilibrio.
$u = 0\,\mathrm{m/s}$	in ciascuna fase

Un esempio monodimensionale

3 bolle di vapore immerse in acqua. Le due fasi sono inizialmente immobili. Creiamo artificialmente una compressione imponendo una velocità fittizia sulle maglie a sinistra alfine di simulare il movimento di un pistone. Si osserva che tale movimento va a generare un'onda di pressione che si muove da sinistra verso destra. Allorché raggiunge una bolla, essa va a perturbare l'equilibrio termomeccanico e le bolle di vapore si liquefanno.

Geometria

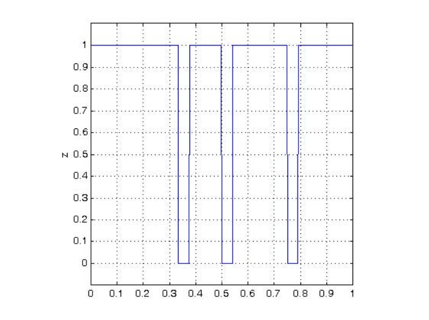


Un esempio monodimensionale

3 bolle di vapore immerse in acqua. Le due fasi sono inizialmente immobili. Creiamo artificialmente una compressione imponendo una velocità fittizia sulle maglie a sinistra alfine di simulare il movimento di un pistone. Si osserva che tale movimento va a generare un'onda di pressione che si muove da sinistra verso destra. Allorché raggiunge una bolla, essa va a perturbare l'equilibrio termomeccanico e le bolle di vapore si liquefanno.

$z = 1$	liquido
$0 < z < 1$	transizione
$z = 0$	vapore

Profilo dell'interfaccia



Risultati

Modellizzazione

- Scelte: interfaccia diffusa - "phase field", correnti di flusso comprimibili.
- Costruzione: consistenza con la termodinamica classica all'equilibrio, generalizzazione consistente con il modello isotermo/isentropico.
- Analisi completa delle proprietà dell'entropia d'equilibrio.
- Il sistema di Eulero associato è *strettamente iperbolico*,
- la velocità del suono è discontina.

Approssimazione

- Il sistema di Eulero è il rilassato di un modello più generale (a 5 o 6 equazioni).
- L'implicitazione della diffusione del calore non penalizza il passo temporale.
- Risoluzione "esatta" del cambiamento di fase (tappa di rilassamento-proiezione).
- Schema numerico valido per leggi tabulate.
- Studio completo del caso Gas Perfetto - Gas Perfetto.

Risultati

Modellizzazione

- Scelte: interfaccia diffusa - "phase field", correnti di flusso comprimibili.
- Costruzione: consistenza con la termodinamica classica all'equilibrio, generalizzazione consistente con il modello isotermo/isentropico.
- Analisi completa delle proprietà dell'entropia d'equilibrio.
- Il sistema di Eulero associato è *strettamente iperbolico*,
- la velocità del suono è discontina.

Approssimazione

- Il sistema di Eulero è il rilassato di un modello più generale (a 5 o 6 equazioni).
- L'implicitazione della diffusione del calore non penalizza il passo temporale.
- Risoluzione "esatta" del cambiamento di fase (tappa di rilassamento-proiezione).
- Schema numerico valido per leggi tabulate.
- Studio completo del caso Gas Perfetto - Gas Perfetto.

Risultati

Modellizzazione

- Scelte: interfaccia diffusa - "phase field", correnti di flusso comprimibili.
- Costruzione: consistenza con la termodinamica classica all'equilibrio, generalizzazione consistente con il modello isotermo/isentropico.
- Analisi completa delle proprietà dell'entropia d'equilibrio.
- Il sistema di Eulero associato è *strettamente iperbolico*,
- la velocità del suono è discontina.

Approssimazione

- Il sistema di Eulero è il rilassato di un modello più generale (a 5 o 6 equazioni).
- L'implicitazione della diffusione del calore non penalizza il passo temporale.
- Risoluzione "esatta" del cambiamento di fase (tappa di rilassamento-proiezione).
- Schema numerico valido per leggi tabulate.
- Studio completo del caso Gas Perfetto - Gas Perfetto.

Risultati

Modellizzazione

- Scelte: interfaccia diffusa - "phase field", correnti di flusso comprimibili.
- Costruzione: consistenza con la termodinamica classica all'equilibrio, generalizzazione consistente con il modello isotermo/isentropico.
- Analisi completa delle proprietà dell'entropia d'equilibrio.
- Il sistema di Eulero associato è *strettamente iperbolico*,
- la velocità del suono è discontina.

Approssimazione

- Il sistema di Eulero è il rilassato di un modello più generale (a 5 o 6 equazioni).
- L'implicitazione della diffusione del calore non penalizza il passo temporale.
- Risoluzione "esatta" del cambiamento di fase (tappa di rilassamento-proiezione).
- Schema numerico valido per leggi tabulate.
- Studio completo del caso Gas Perfetto - Gas Perfetto.

Risultati

Modellizzazione

- Scelte: interfaccia diffusa - "phase field", correnti di flusso comprimibili.
- Costruzione: consistenza con la termodinamica classica all'equilibrio, generalizzazione consistente con il modello isotermo/isentropico.
- Analisi completa delle proprietà dell'entropia d'equilibrio.
- Il sistema di Eulero associato è *strettamente iperbolico*,
- la velocità del suono è discontina.

Approssimazione

- Il sistema di Eulero è il rilassato di un modello più generale (a 5 o 6 equazioni).
- L'implicitazione della diffusione del calore non penalizza il passo temporale.
- Risoluzione "esatta" del cambiamento di fase (tappa di rilassamento-proiezione).
- Schema numerico valido per leggi tabulate.
- Studio completo del caso Gas Perfetto - Gas Perfetto.

Risultati

Modellizzazione

- Scelte: interfaccia diffusa - "phase field", correnti di flusso comprimibili.
- Costruzione: consistenza con la termodinamica classica all'equilibrio, generalizzazione consistente con il modello isotermo/isentropico.
- Analisi completa delle proprietà dell'entropia d'equilibrio.
- Il sistema di Eulero associato è *strettamente iperbolico*,
- la velocità del suono è discontina.

Approssimazione

- Il sistema di Eulero è il rilassato di un modello più generale (a 5 o 6 equazioni).
- L'implicitazione della diffusione del calore non penalizza il passo temporale.
- Risoluzione "esatta" del cambiamento di fase (tappa di rilassamento-proiezione).
- Schema numerico valido per leggi tabulate.
- Studio completo del caso Gas Perfetto - Gas Perfetto.

Risultati

Modellizzazione

- Scelte: interfaccia diffusa - "phase field", correnti di flusso comprimibili.
- Costruzione: consistenza con la termodinamica classica all'equilibrio, generalizzazione consistente con il modello isotermo/isentropico.
- Analisi completa delle proprietà dell'entropia d'equilibrio.
- Il sistema di Eulero associato è *strettamente iperbolico*,
- la velocità del suono è discontina.

Approssimazione

- Il sistema di Eulero è il rilassato di un modello più generale (a 5 o 6 equazioni).
- L'implicitazione della diffusione del calore non penalizza il passo temporale.
- Risoluzione "esatta" del cambiamento di fase (tappa di rilassamento-proiezione).
- Schema numerico valido per leggi tabulate.
- Studio completo del caso Gas Perfetto - Gas Perfetto.

Risultati

Modellizzazione

- Scelte: interfaccia diffusa - "phase field", correnti di flusso comprimibili.
- Costruzione: consistenza con la termodinamica classica all'equilibrio, generalizzazione consistente con il modello isotermo/isentropico.
- Analisi completa delle proprietà dell'entropia d'equilibrio.
- Il sistema di Eulero associato è *strettamente iperbolico*,
- la velocità del suono è discontina.

Approssimazione

- Il sistema di Eulero è il rilassato di un modello più generale (a 5 o 6 equazioni).
- L'implicitazione della diffusione del calore non penalizza il passo temporale.
- Risoluzione "esatta" del cambiamento di fase (tappa di rilassamento-proiezione).
- Schema numerico valido per leggi tabulate.
- Studio completo del caso Gas Perfetto - Gas Perfetto.

Risultati

Modellizzazione

- Scelte: interfaccia diffusa - "phase field", correnti di flusso comprimibili.
- Costruzione: consistenza con la termodinamica classica all'equilibrio, generalizzazione consistente con il modello isotermo/isentropico.
- Analisi completa delle proprietà dell'entropia d'equilibrio.
- Il sistema di Eulero associato è *strettamente iperbolico*,
- la velocità del suono è discontina.

Approssimazione

- Il sistema di Eulero è il rilassato di un modello più generale (a 5 o 6 equazioni).
- L'implicitazione della diffusione del calore non penalizza il passo temporale.
- Risoluzione "esatta" del cambiamento di fase (tappa di rilassamento-proiezione).
- Schema numerico valido per leggi tabulate.
- Studio completo del caso Gas Perfetto - Gas Perfetto.

Risultati

Modellizzazione

- Scelte: interfaccia diffusa - "phase field", correnti di flusso comprimibili.
- Costruzione: consistenza con la termodinamica classica all'equilibrio, generalizzazione consistente con il modello isotermo/isentropico.
- Analisi completa delle proprietà dell'entropia d'equilibrio.
- Il sistema di Eulero associato è *strettamente iperbolico*,
- la velocità del suono è discontina.

Approssimazione

- Il sistema di Eulero è il rilassato di un modello più generale (a 5 o 6 equazioni).
- L'implicitazione della diffusione del calore non penalizza il passo temporale.
- Risoluzione "esatta" del cambiamento di fase (tappa di rilassamento-proiezione).
- Schema numerico valido per leggi tabulate.
- Studio completo del caso Gas Perfetto - Gas Perfetto.

Risultati

Modellizzazione

- Scelte: interfaccia diffusa - "phase field", correnti di flusso comprimibili.
- Costruzione: consistenza con la termodinamica classica all'equilibrio, generalizzazione consistente con il modello isotermo/isentropico.
- Analisi completa delle proprietà dell'entropia d'equilibrio.
- Il sistema di Eulero associato è *strettamente iperbolico*,
- la velocità del suono è discontina.

Approssimazione

- Il sistema di Eulero è il rilassato di un modello più generale (a 5 o 6 equazioni).
- L'implicitazione della diffusione del calore non penalizza il passo temporale.
- Risoluzione "esatta" del cambiamento di fase (tappa di rilassamento-proiezione).
- Schema numerico valido per leggi tabulate.
- Studio completo del caso Gas Perfetto - Gas Perfetto.

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde...) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight ...

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde…) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight …

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde. . .) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight . . .

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde. . .) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight . . .

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde. . .) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight . . .

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde. . .) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight . . .

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde. . .) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight . . .

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde. . .) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight . . .

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde. . .) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight . . .

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde. . .) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight . . .

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde. . .) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight . . .

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde. . .) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight . . .

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Ongoing & to do

Modellizzazione

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde. . .) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight . . .

Approssimazione

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

ONGOING & TO DO

MODELLIZZAZIONE

- legame con un modello a 7 equazioni (V. Guillemand - J.M Herard), con il metodo del secondo gradiente (D. Jamet), con un altro metodo phase field (P. Ruyer - Truskinovsky);
- metastabilità (Liu, S. Kokh);
- tensione di superficie, angolo di contatto con la parete;
- ricerca di un modello di coalescenza;
- studio del problema di Riemann (onde. . .) (N. Seguin, E. Godlewsky);
- studio del limite $\mu_i \to +\infty$ (N. Seguin, S. Kokh);
- punto triplo (ok) e punto critico (trans. del 2°ordine);
- gravità, instabilità di Bénard-Rayleight . . .

APPROSSIMAZIONE

- QHull3D per inviluppo concavo e/o inf-convoluzione tramite trasformata di Legendre ($\approx 3 \times \text{Leg3D} = 3 \times 3 \times \text{QHull1D}$)
- tappa convettiva: 6 equazioni o variante 5 equazioni (VRoe, Lagoutière, varianti algoritmo Allaire-Clerc-Kokh)
- confronto con esperienze concrete di laboratorio
- griglie non strutturate
- (S. Kokh) da 2D a 3D, (TRITON, codice parallelo)

Grazie per l'attenzione

Dimostrazione.

❶ The existence of the segment $\mathfrak{r}_{12}$ follows from proposition. We prove the uniqueness: s_α is strictly concave and increasing according to τ and ε then there is a bijection with (P,T) and $\vec{w}_\alpha$.
If $\tilde{\mathfrak{r}}_{12} = ((\tilde{\vec{w}}_1^*, \tilde{s}_1^*), (\tilde{\vec{w}}_2^*, \tilde{s}_2^*))$ is such that $(\vec{w}, s^{\text{eq}}(\vec{w})) \in \mathfrak{r}_{12} \cap \tilde{\mathfrak{r}}_{12}$, as (P,T,g) are constant along $\mathfrak{r}_{12}$ and $\tilde{\mathfrak{r}}_{12}$, we have $\vec{w}_\alpha^* = \tilde{\vec{w}}_\alpha^*$ and consequently $\mathfrak{r}_{12} = \tilde{\mathfrak{r}}_{12}$. $\square$

◂ Return

Dimostrazione.

➋ The jump of specific volume, energy and entropy implies that for every point $(\vec{w}, s^{\mathrm{eq}}(\vec{w}))$ in the saturation zone we have $0 < y^* < 1$, $\tau_1^* \neq \tau_2^*$, $\varepsilon_1^* \neq \varepsilon_2^*$, $s_1^* \neq s_2^*$.

Along $\mathfrak{r}_{12}(\vec{w})$, (P,T,g) are constant, then we have
$0 = \mathrm{d}(P/T) = s^{\mathrm{eq}}_{\tau\varepsilon}(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + s^{\mathrm{eq}}_{\tau\tau}(\tau_1^* - \tau_2^*)$ and
$0 = \mathrm{d}(1/T) = s^{\mathrm{eq}}_{\varepsilon\varepsilon}(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + s^{\mathrm{eq}}_{\tau\varepsilon}(\tau_1^* - \tau_2^*)$.

$\square$

Return

Dimostrazione.

❸ By contradiction: let $\overline{\vec{w}}$ be a saturated state such that $s^{\text{eq}}_{\tau\tau}(\overline{\vec{w}}) = 0$. By relations ❷, the Hessian matrix is null, *i.e.* $\mathrm{d}^2 s^{\text{eq}}(\overline{\vec{w}}) = \left(\begin{smallmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{smallmatrix}\right)$. We note $(P_\alpha, T_\alpha, g_\alpha)(\overline{\vec{w}}) = (\overline{P}, \overline{T}, \overline{g})$ for $\alpha = 1, 2$. We consider a regular $\mathscr{C}^2$ curve in $\mathscr{S}$ parameterized by $t \in [-1,1] \mapsto (\vec{w}, \gamma = s^{\text{eq}}(\vec{w}))(t)$ such that $\vec{w}(0) = \overline{\vec{w}}$. We have $\gamma''(0) = \mathrm{d}s^{\text{eq}}(\overline{\vec{w}}) \frac{\mathrm{d}^2 \vec{w}(0)}{\mathrm{d}t^2} + \left(\frac{\mathrm{d}\vec{w}(0)}{\mathrm{d}t}\right)^T \mathrm{d}^2 s^{\text{eq}}(\overline{\vec{w}}) \frac{\mathrm{d}\vec{w}(0)}{\mathrm{d}t} = \mathrm{d}s^{\text{eq}}(\overline{\vec{w}}) \frac{\mathrm{d}^2 \vec{w}(0)}{\mathrm{d}t^2}$.
Moreover there exist $\mathscr{C}^2$ smooth functions $t \mapsto (y^*_\alpha, \vec{w}^*_\alpha)(t)$ such that $(\vec{w}, \gamma)(t) = \sum_\alpha y^*_\alpha (\vec{w}^*_\alpha, s^*_\alpha(\vec{w}^*_\alpha))(t)$ where $y^*_1 = y^*$ and $y^*_2 = 1 - y^*$. We have $\frac{\mathrm{d}^2 \vec{w}}{\mathrm{d}t^2} = \sum_\alpha \left(\frac{\mathrm{d}^2 y^*_\alpha}{\mathrm{d}t^2} \vec{w}^*_\alpha + 2 \frac{\mathrm{d}y^*_\alpha}{\mathrm{d}t} \frac{\mathrm{d}\vec{w}^*_\alpha}{\mathrm{d}t} + y^*_\alpha \frac{\mathrm{d}^2 \vec{w}^*_\alpha}{\mathrm{d}t^2} \right)$ and
$\gamma''(t) = \sum_\alpha \left[\frac{\mathrm{d}^2 y^*_\alpha}{\mathrm{d}t^2} s^*_\alpha + 2 \frac{\mathrm{d}y^*_\alpha}{\mathrm{d}t} \mathrm{d}s^*_\alpha \frac{\mathrm{d}\vec{w}^*_\alpha}{\mathrm{d}t} + y^*_\alpha \mathrm{d}s^*_\alpha \frac{\mathrm{d}^2 \vec{w}^*_\alpha}{\mathrm{d}t^2} + y^*_\alpha \left(\frac{\mathrm{d}\vec{w}^*_\alpha}{\mathrm{d}t}\right)^T \mathrm{d}^2 s^*_\alpha \frac{\mathrm{d}\vec{w}^*_\alpha}{\mathrm{d}t} \right](t)$.
This implies
$\gamma''(0) = \mathrm{d}s^{\text{eq}}(\overline{\vec{w}}) \frac{\mathrm{d}^2 \vec{w}(0)}{\mathrm{d}t^2} + \frac{\mathrm{d}^2 y^*}{\mathrm{d}t^2} \left(\frac{g_1}{T_1} - \frac{g_2}{T_2} \right) + \sum_\alpha \left(y^*_\alpha \left(\frac{\mathrm{d}\vec{w}^*_\alpha}{\mathrm{d}t}\right)^T \mathrm{d}^2 s^*_\alpha \frac{\mathrm{d}\mathbf{w}^*_\alpha}{\mathrm{d}t} \right)$ since $\mathrm{d}s^*_\alpha(\vec{w}^*_\alpha(0)) = \mathrm{d}s^{\text{eq}}(\vec{w}(0)) = \left(\frac{1}{\overline{T}}, \frac{\overline{P}}{\overline{T}} \right)$. Consequently, as $\frac{g_\alpha}{T_\alpha} = \frac{\overline{g}}{\overline{T}}$, we have $\sum_\alpha \left(y^*_\alpha \left(\frac{\mathrm{d}\vec{w}^*_\alpha}{\mathrm{d}t}\right)^T \mathrm{d}^2 s^*_\alpha \frac{\mathrm{d}\vec{w}^*_\alpha}{\mathrm{d}t} \right) = 0$ which is impossible.

□

Return

Dimostrazione.

❹ This point follows from $0 = g_1 - g_2 = (\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + P(\tau_1^* - \tau_2^*) - T(s_1^* - s_2^*)$. □

◂ Return