



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI GENOVA
Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

Tesi di laurea in Fisica

Dinamica lineare e non lineare di fluidi viscoelastici

Candidato:
Andrea Bistagnino

Relatori :
Prof. Roberto Festa
Dott. Andrea Mazzino

Correlatore :
Prof. Renzo Collina

Anno Accademico 2003/2004

Questo lavoro è il frutto di circa un anno di lavoro nel laboratorio del gruppo di fisica dell'atmosfera dell'università di Genova. Se è stato possibile tutto questo, lo devo in primo luogo alla mia famiglia, che mi ha sempre aiutato e sostenuto in tutte le mie decisioni. Senza i miei genitori e mia sorella, mai sarei riuscito ad arrivare qui. Grazie poi a tutti i miei nonni; a loro vorrei dedicare questo lavoro. E infine grazie a tutti gli zii per il loro affetto e sostegno, e ai miei cugini perchè sono una grande parte di me: Stefano, Silvia, Paola, Marco, Marcolino e Ilaria.

Il secondo, grande ringraziamento va ad Andrea Mazzino, che mi ha dato la possibilità di lavorare a questa tesi e mi ha seguito sempre con grande impegno e pazienza. Il sostegno che mi ha dato, sia dal punto di vista professionale che umano, è stato fondamentale - e non solo ai fini della tesi. Un sentito ringraziamento va poi al Prof. Festa e al Prof. Ratto, per la guida che rappresenta il loro lavoro passato e presente e per i tanti consigli. Grazie ZioCorrado, per il tuo affetto, la disponibilità e l'aiuto.

Non posso poi dimenticare che, se ho mantenuto un po' di lucidità, lo devo anche alle mille pause con gli amici del laboratorio: Lara, Agnese, Fabrizio, Aldo, Federico, Massimiliano, Luca, Federico, Andrea, Dario, Marco e Abe, a cui devo molto anche perchè senza il suo lavoro forse avrei fatto scelte diverse. I miei migliori auguri a Emilia, Elisa, Anita e alla piccola Valentina.

Per cinque anni passati insieme, tra esami e lavoro, ma soprattutto tra vacanze e divertimenti e uscite, grazie in ordine sparso a: Paolo, Peach, Matti, Balda, ValeA, ValeC, MeSa, Parrods, Bvotto, Dani e Linda, John e la Mari, Fra. Chi è invece presente da più lunga data non ha bisogno di parole: Andre, Ari, Betty, Sergio, Etro, ValeZ, Claude, Simona, Audèri, Jack. Se l'anno che ho passato in Svezia è stato uno dei periodi migliori della mia vita lo devo anche ad Andrea, Tobi, Steffen, Costanza, Lutz, Stijn, Christoph, Nicole, Jukka, Alessandro, Scott, Erik, Katerina, Lukasz e tutti gli altri amici in giro per il mondo. Thank you so much! And -as Steffen would say- keep on boxing! Per tutto il tempo passato insieme, per tutto quello che succederà, per l'affetto e l'amicizia grazie a Federica e Carola, che mi sono vicine da sempre.

Alla costruzione di un futuro più felice e giusto per tutti, ricco di sorprese, fino a quando tutti insieme scopriremo la risposta alle domande più importanti, skål!

Indice

Introduzione	6
1 Meccanica dei fluidi viscoelastici	11
1.1 Richiami di meccanica dei fluidi	11
1.2 Fluidi viscoelastici e loro modelli	14
1.2.1 I polimeri	14
1.2.2 Il modello dumbbell e l'approssimazione Oldroyd-B	15
1.3 Le equazioni costitutive del fluido viscoelastico	17
1.3.1 La derivazione dell'equazione per il tensore degli sforzi	18
2 Il metodo multiscale	21
2.1 Sistemi lineari e linearizzazione	21
2.1.1 Sistemi lineari e analisi di Fourier	21
2.2 Il metodo multiscale	23
2.2.1 Oscillatori debolmente non lineari: l'oscillatore di Duffing	23
2.2.2 La soluzione asintotica dell'oscillatore di Duffing	25
3 Analisi lineare e non lineare	29
3.1 Il formalismo multiscale nell'analisi di flussi viscoelastici	29
3.2 Analisi di stabilità lineare	30
3.3 Analisi di stabilità non lineare	36
3.3.1 Risoluzione del sistema non lineare	38
3.4 La dinamica dell'equazione di Cahn-Hilliard	40
3.4.1 Limiti di validità dell'equazione di Cahn-Hilliard	44
3.5 Simulazioni numeriche dirette	46
4 L'equazione di Cahn-Hilliard generalizzata	51
4.1 Generalità del problema	52
4.2 Il caso sopra soglia	53
4.2.1 Soluzione multiscale nel caso $De > De^*$	54
4.3 Il caso $De < De^*$	55
4.4 Extrusions: il caso sotto soglia per $De > De^*$	56
4.4.1 Lo scaling nel caso linearmente stabile	57

4.5	La dinamica dell'equazione generalizzata	59
5	La drag reduction	61
5.1	Fenomenologia	61
5.2	Risultati teorici	63
5.3	Risultati numerici	64
5.3.1	Simulazioni numeriche dirette	65
A	Un esempio di linearizzazione: le onde sonore	71
B	L'equazione di Cahn-Hilliard	73
B.1	Metodo di risoluzione	73
B.2	I parametri A, B, C	76
C	L'equazione di Cahn-Hilliard generalizzata sopra soglia	79
D	Codice pseudospettrale	81
D.1	Discretizzazione spaziale e FFT	81
D.2	Discretizzazione temporale	82
D.2.1	Metodo di Eulero	83
D.2.2	Metodo di Runge-Kutta del secondo ordine	83
D.3	Metodo pseudospettrale	84
D.4	Stabilità e dealiasing	85
D.5	Dimensioni fisiche del box	86

Introduzione

Sebbene i fondamenti della meccanica dei fluidi siano conosciuti da ormai quasi tre secoli, grazie agli studi di Eulero, Bernoulli e Lagrange, ci sono aspetti di questa disciplina ancora lontani da una comprensione completa e soddisfacente.

Uno dei problemi più complessi che questi sistemi pongono è l'insorgere della turbolenza. Gli esperimenti mostrano che un flusso con velocità sufficientemente bassa è sempre laminare, o regolare. L'aggettivo laminare deriva dal fatto che, marcando il fluido ad esempio con inchiostro, si possono osservare correnti laminari. Aumentando però la velocità del flusso si osserva sempre la transizione a uno stato turbolento, essenzialmente irregolare, in cui velocità, pressione e la maggior parte delle grandezze fisiche assumono a ogni istante valori casuali.¹

I primi studi sistematici di questo fenomeno furono condotti intorno al 1843 da Reynolds; egli mostrò che non è la velocità in quanto tale l'elemento essenziale per la transizione al regime turbolento, quanto la quantità adimensionale $Re = UL/\nu$, il numero di Reynolds.² Quando il numero di Reynolds associato a un flusso oltrepassa un valore critico Re_c , il flusso diventa turbolento.

Alla fine degli anni '40 il chimico inglese Toms scoprì che l'aggiunta di lunghe catene polimeriche a flussi turbolenti che scorrevano in un canale permetteva di aumentare la portata del flusso tramite la riduzione dell'attrito turbolento. Con polimeri intendo catene più o meno lineari di molecole, come DNA, alcuni olii e plastiche e altri materiali. Ciò che più sorprese è l'efficienza di tale processo: la presenza di poche parti per milione in peso di polimeri poteva ridurre l'attrito anche dell'80% rispetto allo stesso flusso senza polimeri.

Le ampie prospettive applicative scatenarono una grande attività di ricerca che condusse rapidamente all'individuazione delle principali caratteristiche del fenomeno, chiamato *drag reduction* [3].

L'utilizzo più spettacolare per questi additivi polimerici, non solo per la grandezza dell'impianto, ma anche per gli importanti risultati, è probabilmente quello realizzato nell'oleodotto *Trans Alaska*, negli Stati Uniti. Il greggio estratto nel nord

¹È per questo che si crede oggi che siano gli strumenti statistici i migliori per tentare una descrizione della turbolenza.

²Qui U indica la velocità tipica del flusso, L la sua dimensione spaziale tipica e ν la sua viscosità cinematica. Ho trattato brevemente questi argomenti nel capitolo 1; una discussione approfondita si può trovare in [1] o in [2].

dell'Alaska viene trasportato a Valdez, il punto degli Stati Uniti più a nord libero dai ghiacci, attraverso questo oleodotto lungo più di 1200 km. Nel 1988 si condussero esperimenti per verificare se l'aggiunta di additivi polimerici potesse aumentare il flusso di greggio che il sistema era in grado di sostenere. Lo spettacolare risultato fu l'aumento della portata dell'oleodotto del 25% circa, con un trasporto medio di 333 milioni di litri di greggio al giorno. [4]

Dal punto di vista sperimentale la drag reduction è dunque ben conosciuta. Non sono però ancora ben chiari i meccanismi alla base del fenomeno. Gli studi sono sempre stati compiuti su flussi che scorrono in un canale, principalmente per motivi tecnici. Le teorie sviluppate hanno quindi posto le loro basi sulle "strutture dinamiche" del canale, come la legge del profilo logaritmico o le strutture vorticoso di parete. Con questa scelta però si fa dipendere fortemente il fenomeno dalle condizioni al contorno, definendone un carattere non universale.

L'osservazione di drag reduction in simulazioni numeriche di fluidi viscoelastici, avvenuta alla fine degli anni '90, ha invece supportato l'ipotesi che il fenomeno potesse essere investigato anche da un punto di vista teorico. Lo scopo di questa tesi è continuare gli studi teorici eseguiti fin ora del Gruppo di ricerca nel quale ho svolto la presente tesi al fine di riformulare il problema nel contesto di flussi liberi (in assenza di pareti). La drag reduction può venire in questo modo legata direttamente alle caratteristiche viscoelastiche (intrinseche) del fluido, non alla presenza di particolari condizioni al contorno. Da un problema prettamente ingegneristico si passa quindi a uno di grande interesse per la Fisica Teorica.

Nel primo capitolo ho brevemente ricordato le nozioni fondamentali di idrodinamica necessarie alla posizione del problema. Ho quindi introdotto il concetto di fluido viscoelastico e brevemente descritto una nozione generale di polimero. Nella seconda parte del capitolo ho introdotto il modello dumbbell e ricavato le equazioni costitutive del modello viscoelastico nell'approssimazione Oldroyd-B. Nonostante la sua semplicità questo modello è molto usato nello studio delle soluzioni viscoelastiche e cattura tutte le loro principali caratteristiche. Sfruttando alcuni concetti statistici ho quindi ricavato il sistema completo di equazioni sempre usato nel resto della tesi.

Nel secondo capitolo ho introdotto il metodo perturbativo multiscale nella sua generalità, oltre ad alcune tecniche matematiche utili allo studio delle proprietà di stabilità di flussi anche non lineari. Attraverso un esempio mostro le principali caratteristiche che contraddistinguono i sistemi dinamici che può essere vantaggioso studiare con metodologie multiscale, caratteristiche che sono mostrate anche dal modello viscoelastico.

Il terzo capitolo è costituito dall'analisi di stabilità del flusso di Kolmogorov, oggetto di questo studio. L'analisi lineare, effettuata con le tecniche multiscale sviluppate nel precedente capitolo, mostra che la dinamica del flusso può essere descritta in termini del numero di Reynolds e del numero di Deborah \mathcal{De} (il parametro che controlla l'effetto dei polimeri sul flusso). L'analisi lineare permette quindi di

suddividere lo spazio delle fasi in zone stabili e non (figura 1), individuando così le regioni di interesse per la successiva analisi non lineare degli stati instabili.

L'analisi non lineare può essere condotta solo nelle immediate vicinanze della curva di stabilità. L'analisi dimensionale permette in questa regione di ottenere il rapporto tra i parametri perturbativi dei vari campi. Ottenuto questo si può applicare il metodo multiscala anche nel caso non lineare. I conti, gravosi, sono stati effettuati principalmente mediante manipolatori algebrici.³ Si ottengono in questo modo le espressioni esplicite per la dinamica dei campi ai primi quattro ordini perturbativi, tutti dipendenti dalla sola dinamica della perturbazione trasversale del flusso. Per essa ho ricavato un'equazione differenziale (l'equazione di Cahn-Hilliard) che è possibile integrare numericamente. Il resto del capitolo è dedicato allo studio della dinamica della perturbazione trasversale e al controllo del sostanziale accordo dei risultati teorici con simulazioni numeriche dirette dell'intero sistema.

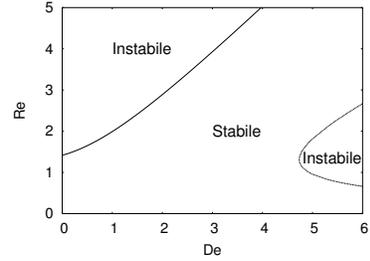


Figura 1: Curva marginale di stabilità nello spazio delle fasi.

Il quarto capitolo si basa sull'osservazione dell'esistenza di un valore critico del parametro $\mathcal{D}e$, il numero di Deborah, oltre il quale la soluzione ricavata nel terzo capitolo è sicuramente non corretta. Viene quindi preso in considerazione un termine non lineare di grado superiore a quello considerato precedentemente. Si studia quindi il sistema nell'intorno del punto critico, individuando quattro zone nello spazio delle fasi dalle caratteristiche differenti. Mentre una di queste è totalmente stabile (e quindi di scarso interesse), le tre rimanenti mostrano caratteri di instabilità differenti. Dopo aver ottenuto il rapporto di scala tra i campi nei tre casi si può effettuare l'analisi multiscala ottenendo le nuove equazioni della dinamica. Si individua in questo modo la presenza di instabilità elastiche, dovute al carattere viscoelastico del fluido in esame.

L'analisi portata avanti nei capitoli tre e quattro permette lo studio teorico e numerico del fenomeno della drag reduction. Il quinto capitolo mostra tali risultati; esso discute inoltre l'utilizzo dell'equazione di Cahn-Hilliard per lo studio della drag reduction in simulazioni dirette anche a una certa distanza dalla curva di stabilità lineare, quando non sono più valide le condizioni di applicabilità dell'analisi multiscala (figura 2).

³È stato usato a questo scopo il manipolatore simbolico MAPLE.

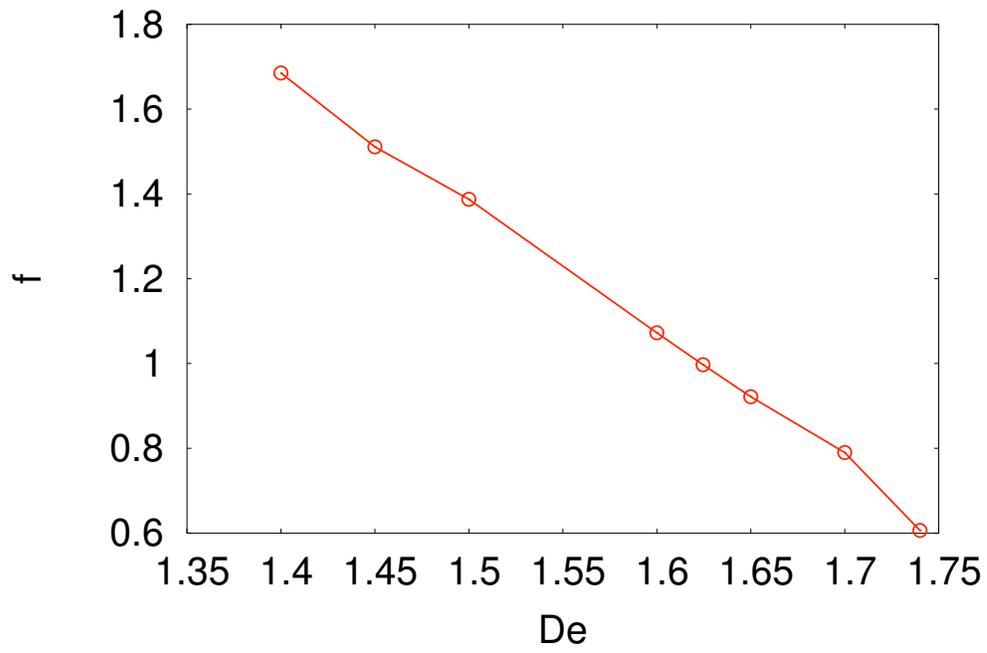


Figura 2: Risultati di simulazioni numeriche dirette del sistema viscoelastico. Il coefficiente di drag diminuisce con l'aumentare del numero di Deborah, il parametro che controlla l'effetto dei polimeri sul flusso.

Capitolo 1

Meccanica dei fluidi viscoelastici

Questo primo capitolo è dedicato all'introduzione del modello fluidodinamico che verrà analizzato nei prossimi capitoli. Dopo aver ricordato le principali equazioni dell'idrodinamica, descrivo brevemente i polimeri e i fluidi viscoelastici. Introduco quindi il modello *dumbbell* nell'approssimazione di Oldroyd e ricavo le equazioni con cui descriverò la dinamica del flusso viscoelastico.

1.1 Richiami di meccanica dei fluidi

Il punto di partenza per la costituzione di una meccanica dei continui¹ è la scelta del metodo di rappresentazione del fenomeno fisico. Due strumenti si presentano a questo scopo: la rappresentazione Euleriana e quella Lagrangiana.

Il formalismo Lagrangiano immagina di dividere il fluido in piccoli volumi infinitesimi e descrive il loro moto al variare del tempo. Le coordinate di queste “particelle” di fluido sono quindi funzione del tempo e della loro posizione a un istante di riferimento: $x_i = x_i(\xi_k, t)$ e $\xi_i = x_i(\xi_k, t_0)$. Il formalismo Euleriano consiste invece nel descrivere, in ogni punto dello spazio, la variazione temporale dei campi di interesse: la velocità, la pressione, ecc. La scelta del metodo di rappresentazione dipende fondamentalmente dal tipo di problema che ci si pone. Mentre spesso è il formalismo Euleriano quello più comodo, altre volte è più semplice sfruttare gli strumenti del formalismo Lagrangiano.

In rappresentazione Lagrangiana, la derivata parziale rispetto al tempo di una qualche funzione rappresenta quanto velocemente cambia la funzione per una certa particella di fluido. In particolare, $v_i = \partial x_i / \partial t$ e $\partial v_i / \partial t$ sono rispettivamente velocità e accelerazione della particella. In rappresentazione Euleriana invece le derivate parziali spaziali e temporali sono le componenti del gradiente e il tasso di crescita del corrispondente campo. La derivata $\partial \mathbf{v}(x_k, t) / \partial t$ non è l'accelerazione della particella

¹Questo paragrafo vuole brevemente ricordare le più importanti equazioni dell'idrodinamica. Per una trattazione dettagliata si veda ad esempio [1].

di fluido nel punto x_k, t , perché all'istante $t + \Delta t$ in quel punto sarà presente un'altra particella.

È fondamentale l'espressione della derivata *convettiva* o *Lagrangiana*, il tasso di crescita di una grandezza relativa a una particella in rappresentazione Euleriana:

$$\frac{d}{dt} = \partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla \quad .$$

La meccanica dei continui soddisfa ovviamente le leggi della fisica classica. Imponendo per esempio che la massa di un volume contenente le stesse particelle sia costante, si ha $\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = 0$. Il volume però in coordinate Euleriane varia col tempo; tenendo conto della trasformazione tra coordinate Lagrangiane ed Euleriane² si ha:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = \int_V \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} \right) dV = 0 \quad .$$

Poiché questo deve essere vero per un arbitrario volume di integrazione si arriva all'equazione di continuità:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad \text{o} \quad \frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad . \quad (1.1)$$

Per un fluido *incompressibile*³ la densità è ovunque costante ($\frac{d\rho}{dt} = 0$) e l'equazione di continuità può essere scritta più semplicemente $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$.

Per ottenere le equazioni del moto dovremo scrivere la seconda legge di Newton per i continui:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV = \mathbf{F} + \mathbf{F}_S \quad ,$$

dove \mathbf{F} è la forza esterna che agisce sul fluido e \mathbf{F}_S è la forza esercitata dal fluido circostante il volume V . Trascurando effetti viscosi possiamo scrivere questo contributo come l'opposto della forza esercitata dal volume sul fluido circostante e ricondurci a un integrale di volume:

$$\mathbf{F}_S = - \int_S p d\mathbf{S} = - \int_V \nabla p dV \quad .$$

Se insieme a queste utilizziamo la (1.1) ricaviamo l'equazione di Eulero

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = - \frac{\nabla p}{\rho} + \mathbf{f} \quad , \quad (1.2)$$

²La variazione nel tempo dell'integrale di volume di un campo va fatta in coordinate Lagrangiane, affinché il volume di integrazione sia sempre lo stesso. La valutazione della derivata coinvolge perciò lo Jacobiano della trasformazione tra le coordinate e la sua variazione nel tempo. Una trattazione più completa di questi argomenti può essere trovata in [1].

³L'approssimazione di incompressibilità è quasi sempre ottimamente soddisfatta, anche nel caso di flussi turbolenti.

dove \mathbf{f} è la forza esterna per unità di volume.

Interessiamoci ora alla quantità di moto trasportata per unità di volume $\rho\mathbf{v}$. Sfruttando la (1.2) e la (1.1) si ottiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \rho v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + f_i - v_i \frac{\partial(\rho v_k)}{\partial x_k} = -\frac{\partial}{\partial x_k}(p\delta_{ik} + \rho v_i v_k) + f_i \quad (1.3)$$

Questa equazione è però valida solo per fluidi non viscosi; la si generalizza aggiungendo a $\Pi_{ij} = p\delta_{ik} + \rho v_i v_k$ il tensore degli sforzi viscosi $-\Sigma_{ij}$.

A priori la forma che esso assume è sconosciuta. Conosciamo però alcune sue caratteristiche:

- Σ_{ij} può dipendere solo dai gradienti di velocità
- consideriamo solo i termini lineari
- Σ_{ij} deve essere zero se il corpo ruota come un corpo rigido

Il tensore degli sforzi nella sua forma più generale è dunque [1]:

$$\Sigma_{ij} = a\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right) + b\frac{\partial v_k}{\partial x_k}\delta_{ij} \quad (1.4)$$

Se ora sfruttiamo la conservazione della massa per fluidi incompressibili insieme alle equazioni (1.4) e (1.3) otteniamo la più importante equazione della meccanica dei fluidi: l'equazione di Navier-Stokes:

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}^{(V)} \quad (1.5)$$

avendo identificato il coefficiente a della (1.4) con la *viscosità*⁴ η del fluido e con $\mathbf{f}^{(V)}$ le forze di volume agenti sul fluido.

L'accelerazione puntuale del fluido è quindi dovuta alla somma di vari contributi. Al variare del valore dei parametri in gioco ci saranno situazioni in cui predominerà l'effetto di uno o dell'altro termine. Per capire come questo influisca sul comportamento del fluido si ricorre all'analisi dimensionale. Supponiamo che esista solo una tipica scala di lunghezza L e una tipica scala di velocità V_0 ; un esempio è un flusso di velocità V_0 all'infinito costante che incontra un ostacolo di dimensioni di ordine L . Riscrivendo tutte le grandezze in funzione di questi parametri si trova:

$$\begin{cases} \mathbf{r} = L\mathbf{r}' \\ \mathbf{v} = V_0\mathbf{v}' \\ t = L/V_0 t' \\ p = \rho V_0^2 p' \\ \mathbf{f}^{(V)} = \rho V_0/L \mathbf{f}'^{(V)} \end{cases} \quad (1.6)$$

⁴La viscosità di un fluido si definisce osservando la forza necessaria a mantenere costante la velocità relativa tra due lastre che vengano fatte scorrere separate solo da uno strato di liquido. Per molti liquidi la forza richiesta per unità di superficie è proporzionale alla velocità divisa per la distanza tra le lastre. Questo in condizioni stazionarie e per i flussi cosiddetti Newtoniani. Parleremo di questa distinzione più avanti introducendo i fluidi viscoelastici.

Essendo le variabili adimensionali, tali dovranno essere pure le derivate. Sostituendo le (1.6) nella (1.5) si ottiene una forma particolare dell'equazione di Navier-Stokes, dipendente da un solo parametro: il numero di Reynolds $\mathcal{R}e = \rho V_0 L / \eta$:

$$\frac{d\mathbf{v}'}{dt'} = -\nabla' p' + \frac{1}{\mathcal{R}e} \nabla'^2 \mathbf{v}' + \mathbf{f}'^{(V)} \quad . \quad (1.7)$$

1.2 Fluidi viscoelastici e loro modelli

Lo studio del comportamento della materia sottoposta a deformazione e movimento è compito della *reologia*. Il suo principale obiettivo è lo studio della risposta del materiale a sollecitazioni. I materiali per cui la deformazione del corpo è proporzionale allo sforzo sono detti elastici e seguono la legge di Hooke. I fluidi i cui sforzi viscosi sono descritti dalla (1.4), in cui cioè la deformazione è proporzionale alle variazioni dello sforzo, sono detti Newtoniani. L'acqua è in ottima approssimazione un fluido Newtoniano.

L'equazione di Navier-Stokes riportate nello scorso paragrafo non sono però in grado di spiegare molti dei fenomeni che si osservano nei fluidi in natura. In parte ciò può essere dovuto al fenomeno della turbolenza, che ancora non si è in grado di comprendere completamente [2]. In parte la risposta può giacere nella nostra incapacità di risolvere le equazioni della fluidodinamica in situazioni che non presentino grandi semplificazioni e simmetrie. Esiste però la possibilità che si stia cercando di descrivere alcune situazioni con le equazioni sbagliate, con un troppo elevato grado di semplificazione. In particolare abbiamo per ora solo considerato fluidi Newtoniani; non è però detto che tutti i fluidi in natura siano tali, e non è detto che non sia in questo la chiave per spiegare almeno alcuni dei fenomeni la cui comprensione ancora ci sfugge.

A titolo di esempio, è noto da circa cinquant'anni che l'aggiunta di piccole quantità di polimeri in un fluido che scorre in un canale riduce la potenza necessaria a mantenere costante il flusso nel canale (fenomeno noto come “drag reduction”). Sebbene la fenomenologia sia largamente conosciuta [5] e siano stati proposti molti modelli [3, 6–8], non si è mai giunti a una soddisfacente comprensione del fenomeno. La spiegazione più semplice ed elegante di questo meccanismo sembra risiedere nell'ipotesi che i fluidi viscoelastici non siano Newtoniani. Sono stati elaborati modelli che descrivono il tensore degli sforzi viscosi Σ_{ij} e che, vedremo, evidenziano la presenza di drag reduction senza ricorrere a interazioni del fluido con i bordi fisici del canale, meccanismi molecolari a livello dei polimeri o una redistribuzione della viscosità dovuta ai polimeri per effetto del moto turbolento del fluido.

1.2.1 I polimeri

I polimeri sono composti di molte piccole molecole (i monomeri) che possono essere unite per formare lunghe catene; sono per questo detti macromolecole. Un tipico

polimero può contenere decine di migliaia di monomeri. In pratica molto di ciò che ci circonda è formato di polimeri: cotone, lana, Teflon, tutte le plastiche, le resine, la gomma, gli olii. Noi però ci limiteremo al caso di macromolecole a catena semplice di dimensioni caratteristiche molto superiori a quelle delle molecole di fluido (per poter considerare il fluido come un continuo e tralasciare eventuali interazioni molecolari) e nel contempo piccole a sufficienza da permetterci di descrivere la loro distribuzione spaziale in termini di densità, senza dover descrivere la posizione relativa di ogni molecola. Imporremo cioè $nL^3 \ll 1$, indicando con n il numero di molecole per unità di volume e con L la loro lunghezza tipica.

Questo genere di polimeri è quindi estremamente lungo e sottile. Se si può ipotizzare che la macromolecola non interagisca molecularmente con il fluido, lo stesso non si può dire dei singoli monomeri che la compongono. Ognuno di essi subirà una forza di tipo Browniano il cui effetto sarà di chiudere la catena in una configurazione “raggomitolata” con dimensioni caratteristiche molto inferiori alla lunghezza che avrebbe la catena completamente svolta. L’effetto di questo raggomitolamento è l’accumulo di energia elastica nella molecola, dipendentemente dalla forma che essa assume. La grande elasticità dei polimeri, la facilità con cui possono essere distesi a opera di gradienti di velocità, la loro capacità di accumulare energia pone un problema: è possibile che essi, che sono chiaramente modificati dal fluido, ne modifichino a loro volta la dinamica? Ed è possibile che questo sia alla base della spiegazione del fenomeno della drag reduction?

Per poter rispondere a queste domande sono stati fatti dei modelli che tentano di descrivere i fluidi viscoelastici, per poter procedere a una loro analisi teorica e numerica.

1.2.2 Il modello dumbbell e l’approssimazione Oldroyd-B

Lo scopo di ogni modello fisico è quello di essere il più semplice possibile, pur mantenendo la capacità di descrivere le principali caratteristiche dell’oggetto in questione. In particolare vogliamo poter descrivere i polimeri con il minimo numero di parametri, pur tenendo conto della loro capacità di allungamento e di immagazzinamento dell’energia.

In questo senso il modello *dumbbell* è tra i più utilizzati [9]. Esso consiste nello schematizzare un polimero come due soli monomeri collegati fra loro. Ipotizzando una forza di richiamo tra i due monomeri possiamo sperare di essere in grado di descrivere i polimeri e l’energia elastica immagazzinata con due soli parametri: la densità dei polimeri e l’allungamento delle molecole in ogni punto dello spazio. Dobbiamo però essere in grado di descrivere con questi parametri gli effetti del fluido sulle molecole e viceversa.

Le approssimazioni che sono alla base del modello dumbbell sono così riassumibili:

- Consideriamo una soluzione di polimeri in un solvente Newtoniano, tale da non

avere gradienti di concentrazione e che la loro densità sia bassa a sufficienza da poter trascurare le interazioni tra polimeri.

- All'interno del solvente i monomeri subiscono una forza idrodinamica data dalla legge di Stokes; la forza è cioè proporzionale alla velocità relativa tra flusso e monomero⁵.
- I dumbbell sono soggetti a una forza di tipo browniano legata al rumore termico.

Il modello tiene conto delle interazioni tra flusso e polimero sia quando esiste un gradiente di velocità parallelamente alla direzione del polimero (tensione e compressione) sia quando esiste un trasferimento di momento dovuto a gradienti di velocità perpendicolari all'asse di allungamento della molecola.

Il risultato finale del modello è la scrittura di un'equazione per il tensore degli sforzi dei polimeri

$$\sigma_{ij} = -\frac{n}{\rho} \langle R_i F_j \rangle + \frac{n}{\rho} k_B T \delta_{ij} \quad , \quad (1.8)$$

dove n è il numero di polimeri per unità di volume, ρ la densità di massa, R l'allungamento della molecola, F la forza di richiamo e $k_B T$ l'energia associata al rumore termico. Il tensore degli sforzi dei polimeri è la nostra modifica del tensore degli sforzi viscosi Σ_{ij} definito dalla relazione (1.4). Esso era stato inizialmente scelto perché descrivesse un fluido Newtoniano. Ora che vogliamo descrivere un fluido viscoelastico sostituiamo a Σ_{ij} il nuovo tensore degli sforzi viscosi

$$\Sigma_{ij} \rightarrow \Sigma_{ij} + \sigma_{ij} \quad . \quad (1.9)$$

Con questa scelta possiamo scrivere l'equazione di Navier-Stokes per il fluido viscoelastico

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}^{(V)} + \eta_p \nabla \Pi \quad . \quad (1.10)$$

Il comportamento dei polimeri dipende dalla caratterizzazione della forza di richiamo F . Essa potrà dipendere dalla distanza tra i monomeri o da una sua funzione, ma anche per esempio dalla temperatura (generando un accoppiamento tra la forza di richiamo e il termine di moto browniano). Il modello Oldroyd-B consiste proprio nel supporre la forza di richiamo tra i monomeri di tipo Hookeano [10]

$$\mathbf{F} = K_0 \mathbf{R} \quad , \quad (1.11)$$

che fornisce:

$$\Pi_{ij} = -\frac{nK_0}{\rho} \langle R_i R_j \rangle + \frac{n}{\rho} k_B T \delta_{ij} \quad , \quad (1.12)$$

⁵Per applicare la legge di Stokes dovremmo ipotizzare che il flusso non viene modificato dalla presenza dei dumbbell, cosa che invece richiediamo accadere. Stiamo perciò ipotizzando che il flusso sia modificato nella sua dinamica di grande scala ma non localmente accanto a ogni monomero.

da cui la necessità di una equazione per $\langle R_i R_j \rangle$.

Una scelta così semplice porta importanti limitazioni; si osserva per esempio che un fluido viscoelastico possiede un intero spettro di tempi di rilassamento tipici dei polimeri, mentre scegliere K_0 costante corrisponde a descriverne uno solo. Inoltre la scelta lineare permette al polimero di allungarsi indefinitamente, cosa in generale non vera. Poco prima di raggiungere la loro elongazione massima, poi, ci aspettiamo che i polimeri rispondano al fluido con una forza di richiamo maggiore. Ci aspettiamo cioè che K_0 sia una funzione di R . Un tentativo in questo senso è costituito dal modello FENE (Finitely Extendable Nonlinear Elastic) [9]. Esso ipotizza

$$\mathbf{F} = \frac{K_0}{1 - \left(\frac{R}{R_{max}}\right)^2} \mathbf{R} \quad . \quad (1.13)$$

Questa scelta tiene conto la finitezza dei polimeri e della dipendenza di k da R . La (1.13) è però un'equazione non lineare, dai calcoli gravosi e che comunque non conduce a un'equazione chiusa per il tensore degli sforzi. Questo non accade neppure nell'approssimazione di Peterlin, e cioè nel valutare $R^2 \approx \langle R^2 \rangle$ (modello FENE-P). Tale modello non sarà quindi considerato nel caso della presente tesi.

1.3 Le equazioni costitutive del fluido viscoelastico

Rappresentando i monomeri uniti da una molla ideale, possiamo scrivere l'equazione per l'elongazione R

$$\partial_t R_i - R_j \nabla_j v_i + \Gamma F_i = \zeta_i \quad , \quad (1.14)$$

che è il bilancio delle forze per la molecola sottoposta al rumore termico ζ , alla forza di richiamo interna \mathbf{F} (mediante il coefficiente cinetico Γ) e a un fattore di stretching dovuto all'interazione tra fluido e dumbbell. La approssimazione di Oldroyd rende così

$$\partial_t R_i - R_j \nabla_j v_i + R_i / \tau = \zeta_i \quad , \quad (1.15)$$

dove $\tau = (\Gamma K_0)^{-1}$ è il tempo di rilassamento della molecola. Va evidenziato che questa equazione si riferisce alla singola molecola e che quindi le derivate vanno valutate nel punto in cui si trova. Si sta ipotizzando che i molti gradi di libertà interni del polimero possano essere descritti da un unico parametro: l'elongazione R . In realtà sono stati osservati sperimentalmente molti diversi gradi di libertà deformazionali [5]; bisognerebbe dunque considerare non solo un modo τ , ma un intero spettro. È però vero che il modo più eccitato è quello corrispondente al massimo tempo di rilassamento del polimero. La (1.15) va dunque intesa come l'equazione per il modo principale.

Lo studio della soluzione a scale macroscopiche (molto maggiori della distanza tra polimeri) viene fatto comunemente in termini del tensore di conformazione media

$$A_{ij} = \langle R_i R_j \rangle \quad , \quad (1.16)$$

dove la media va intesa in un volume contenente un grande numero di molecole ma di dimensioni caratteristiche inferiori alla scala a cui tipicamente avvengono i processi considerati. Si può anche interpretare la media sulla statistica del rumore termico ζ .

1.3.1 La derivazione dell'equazione per il tensore degli sforzi

Dalla (1.15) si ottiene facilmente l'equazione:

$$\partial_t(R_i R_k) = R_k R_j \nabla_j v_i + R_i R_j \nabla_j v_k - \frac{2}{\tau} R_i R_j + R_k \zeta_i + R_i \zeta_k \quad . \quad (1.17)$$

Qui si sta ancora valutando la singola molecola perché ∂_t è valutata nella posizione della molecola. Sostituendo la derivata parziale con quella Lagrangiana e mediando si ottiene

$$\partial_t A_{ik} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) A_{ik} = A_{jk} \nabla_j v_i + A_{ij} \nabla_j v_k - \frac{2}{\tau} A_{ik} + \langle R_j \zeta_i \rangle + \langle R_i \zeta_k \rangle \quad . \quad (1.18)$$

La valutazione dei termini associati al rumore termico è fatta utilizzando il teorema di Furutsu-Novikov, che non dimostro qui; per la dimostrazione si veda ad esempio [11].

Dato un campo vettoriale gaussiano centrato $\zeta(\mathbf{r}, t)$ e un suo funzionale $R_j[\mathbf{v}]$ dal teorema di Furutsu-Novikov si ha:

$$\langle \zeta_i(\mathbf{r}, t) R_j[\zeta(\mathbf{r}, t')] \rangle = \int d^d r'' \int dt'' \langle \zeta_i(\mathbf{r}, t) \zeta_k(\mathbf{r}'', t'') \rangle \left\langle \frac{\delta R_j[\zeta(\mathbf{r}, t')]}{\delta \zeta_k(\mathbf{r}'', t'')} \right\rangle \quad . \quad (1.19)$$

Per valutare la derivata funzionale che compare in questa equazione si integra formalmente la (1.15) rispetto al tempo. Sebbene tutti i termini dipendano da ζ , la δ -correlazione del rumore termico ci dice che tutti quelli in cui ζ non compare direttamente ne dipendono per ordini superiori. Otteniamo così

$$\begin{aligned} \frac{\delta R_j[\zeta(\mathbf{r}, t')]}{\delta \zeta_k(\mathbf{r}'', t'')} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{-\infty}^{t'} d\tau R_j[\zeta(\mathbf{r}, t')] + \epsilon \delta(\tau - t'') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') + \\ &- \int_{-\infty}^{t'} d\tau R_j[\zeta(\mathbf{r}, t')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \Theta_H(t' - t'') \quad . \end{aligned} \quad (1.20)$$

Con Θ_H si è indicato qui la *funzione Theta di Heaviside* definita dalla

$$\Theta_H(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \delta(y) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ 1/2 & \text{se } x = 0 \\ 1 & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad . \quad (1.21)$$

Sotto l'ipotesi che ζ sia δ -correlato si ha

$$\langle \zeta_i(\mathbf{r}, t) R_j[\zeta(\mathbf{r}, t')] \rangle = 2k_B T \Gamma \delta_{ij} \delta(t - t') \quad . \quad (1.22)$$

La sostituzione dei risultati (1.22) e (1.20) nella (1.19) porta alla

$$\langle \zeta_i(\mathbf{r}, t) R_j[\zeta(\mathbf{r}, t')] \rangle = 2k_B T \Gamma \delta_{ij} \quad (1.23)$$

per ogni $t > t'$.

La valutazione del termine associato al rumore termico contenuta nella (1.23), sostituita nella (1.18), conduce all'equazione

$$\partial_t A_{ij} + (\mathbf{v} \nabla) A_{ij} = A_{kj} \nabla_k v_i + A_{ik} \nabla_k v_j - \frac{2}{\tau} (A_{ij} - A_0 \delta_{ij}) \quad . \quad (1.24)$$

dove $A_0 = k_B T / K_0$ è il termine originato dal rumore termico. La (1.24) e la (1.12) con l'identificazione $A_{ij} = \langle R_i R_j \rangle$ danno l'equazione cercata per la dinamica del tensore degli sforzi

$$\partial_t \sigma_{ij} + (v_k \nabla_k) \sigma_{ij} = \sigma_{kj} \nabla_k v_i + \sigma_{ik} \nabla_k v_j - \frac{2}{\tau} (\sigma_{ij} - \sigma_0 \delta_{ij}) \quad , \quad (1.25)$$

in cui σ_0 è il termine collegato alle fluttuazioni termiche della conformazione dei polimeri.

L'equazione (1.25) e l'equazione di Navier-Stokes viscoelastica (1.10) costituiscono un sistema chiuso per la descrizione della dinamica di una soluzione polimerica; utilizzeremo tale sistema per lo studio delle proprietà di flussi bidimensionali in assenza di pareti.

Capitolo 2

Il metodo multiscala

Lo scopo di questo capitolo è discutere alcuni metodi di analisi che verranno poi sfruttati per lo studio dei flussi viscoelastici. Dopo un breve cenno all'utilizzo della trasformata di Fourier nella soluzione dei sistemi di equazioni differenziali e alle tecniche di linearizzazione, descrivo in dettaglio il metodo multiscala, alla base dell'analisi dei prossimi capitoli. Un esempio molto generale mostrerà la potenza di questo metodo e spiegherà quale tipo di problemi è in grado di gestire.

2.1 Sistemi lineari e linearizzazione

L'estrema ricchezza e complessità dei moderni sviluppi della fisica classica che si è rivelata negli ultimi decenni è dovuta quasi esclusivamente alla migliore comprensione dei fenomeni non lineari. Il panorama della fisica (e della matematica) si è arricchito di nuovi concetti, come il caos deterministico, la cui origine è dovuta a effetti non lineari. Proprio però a causa delle difficoltà che comporta lo studio di questi sistemi si cerca spesso di trovare situazioni lineari o quasi lineari in cui studiare il fenomeno. Questi primi risultati fondano poi le basi su cui costruire un'analisi del sistema più approfondita e necessariamente non lineare.

La principale differenza tra sistemi lineari e non è matematicamente contenuta nel principio di sovrapposizione. Supponiamo di voler studiare un sistema lineare di cui conosciamo due soluzioni f_1 e f_2 . Sappiamo allora che anche $af_1 + bf_2$ sarà soluzione, qualunque siano a e b . Questo significa anche che possiamo costruire le soluzioni di un sistema fisico lineare sovrapponendo le soluzioni delle sue parti più semplici.

2.1.1 Sistemi lineari e analisi di Fourier

Consideriamo un sistema lineare di equazioni di campo, riscritto nella forma

$$\mathcal{L}f(t, \mathbf{r}) = 0 \quad . \quad (2.1)$$

Se conosciamo due soluzioni f_1 e f_2 di questo sistema, anche una qualunque loro combinazione lineare soddisferà (2.1). Supponiamo che esista la trasformata di Fourier di f_1 e f_2 . Possiamo allora descrivere il campo $f(t)$ come

$$f(t, \mathbf{r}) = \int \int \hat{f}(\omega, \mathbf{k}) e^{-i[\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t]} d\omega d^3k \quad , \quad (2.2)$$

con

$$\hat{f}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int \int f(t, \mathbf{r}) e^{i[\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}]} dt d^3r \quad . \quad (2.3)$$

L'integrale di Fourier è sempre lo stesso, ma la scelta dei segni e del posizionamento dei fattori 2π fanno in modo che la funzione sia scritta come sovrapposizione di *onde piane sinusoidali* in tre dimensioni. Le onde hanno ampiezza $\hat{f}(\omega, \mathbf{k})$ e si propagano nella direzione del vettore d'onda \mathbf{k} . Stiamo in pratica dicendo che possiamo riscrivere le soluzioni come somma di onde piane. Allora *ogni* soluzione può essere riscritta come sovrapposizione di onde piane. Se dunque conosciamo le proprietà di queste onde nel mezzo (la risposta del sistema), conosciamo il comportamento dei campi in ogni situazione per cui valgono le ipotesi finora fatte.

In generale l'operatore \mathcal{L} sarà una combinazione lineare di operatori lineari. In particolare in molte situazioni di interesse saranno presenti gli operatori ∇ e $\partial/\partial t$. La scelta di rappresentare i campi $f(t, \mathbf{r})$ con la loro trasformata $\mathcal{F}f(t, \mathbf{r}) = \hat{f}(\omega, \mathbf{k})$ mostra qui tutta la sua potenza. Si è osservato che per conoscere la risposta del sistema a un qualunque segnale basta studiare come gli operatori che compongono \mathcal{L} agiscono su onde piane del tipo

$$u(t, \mathbf{r}) = u_0 e^{-i[\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t]} \quad (2.4)$$

per quantità scalari e del tipo

$$\mathbf{w}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{w}_0 e^{-i[\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t]} \quad (2.5)$$

per quantità vettoriali. Nel caso degli operatori di derivazione spaziale e temporale si vede che

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u_0 \frac{\partial}{\partial t} e^{-i[\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t]} = -i\omega u_0 e^{-i[\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t]} = -i\omega u \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \dots = -i\omega \mathbf{w} \quad (2.7)$$

$$\nabla u = u_0 \left(\hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} \right) e^{-i[\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t]} = \quad (2.8)$$

$$i(k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}} + k_z \hat{\mathbf{z}}) u_0 e^{-i[\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t]} = i\mathbf{k} u \quad (2.9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{w} = \dots = i\mathbf{k} \cdot \mathbf{w} \quad (2.10)$$

$$\nabla \times \mathbf{w} = \dots = i\mathbf{k} \times \mathbf{w} \quad . \quad (2.11)$$

Davanti a un sistema formato di combinazioni lineari di operatori ∇ e $\partial/\partial t$ basta sostituire i campi con le rispettive trasformate e

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega \quad (2.12)$$

$$\nabla \rightarrow i\mathbf{k} \quad , \quad (2.13)$$

fatto che trasforma il sistema differenziale in un sistema algebrico.

Per un esempio di analisi di sistemi linearizzati si veda l'appendice A.

2.2 Il metodo multiscala

Molto spesso in fluidodinamica si cerca di semplificare l'oggetto dello studio attraverso la ricerca di soluzioni asintotiche del problema; si cerca cioè di descrivere il comportamento della grandezza fisica in esame nel limite di grandi scale spaziali e temporali. Si spera così di rendere accessibile la ricerca della soluzione. Esistono però casi in cui i metodi perturbativi standard falliscono e si dimostrano incapaci di cogliere la dinamica per tempi arbitrariamente lunghi. In particolare questo succede quando si trovano termini secolari nella ricerca delle soluzioni del sistema.

Questo problema non è confinato a problemi di idrodinamica, ma è presente in svariati sistemi dinamici non lineari. Tra questi, particolarmente illuminante è il caso di un oscillatore debolmente non lineare, l'oscillatore di Duffing. Ne riporterò alcuni dettagli nel prossimo paragrafo visto che l'essenza dei meccanismi che emergono saranno presenti anche in situazioni più complicate affrontate in questa tesi.

2.2.1 Oscillatori debolmente non lineari: l'oscillatore di Duffing

Supponiamo di dover studiare equazioni della forma

$$\ddot{x} + x + \epsilon h(x, \dot{x}) = 0 \quad , \quad (2.14)$$

dove $0 \leq \epsilon \ll 1$ e $h(x, \dot{x})$ è una funzione qualunque, liscia. Queste equazioni rappresentano piccole perturbazioni dell'oscillatore lineare $\ddot{x} + x = 0$ e descrivono quindi gli oscillatori debolmente non lineari.

Un esempio classico di questo genere di problemi è l'oscillatore di Duffing

$$\ddot{x} + x + \epsilon x^3 = 0 \quad . \quad (2.15)$$

Supponiamo di voler risolvere la (2.15) con le condizioni iniziali $x(0) = 1$ e $\dot{x}(0) = 0$. Cerchiamo la soluzione attraverso uno sviluppo in serie nella forma

$$\begin{cases} x(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n x_n(t) \\ x_0(0) = 1 \\ x_n(0) = 0 \quad \forall n \geq 1 \\ x'_n(0) = 0 \quad \forall n \end{cases} \quad . \quad (2.16)$$

Sostituendo la (2.16) nella (2.15) otteniamo ai primi ordini

$$\mathcal{O}(1) : \quad \ddot{x}_0 + x_0 = 0 \quad (2.17)$$

$$\mathcal{O}(\epsilon) : \quad \ddot{x}_1 + x_1 = -y_0^3, \quad (2.18)$$

da cui, tenendo conto delle condizioni al contorno (2.16), $x_0 = \cos(t)$. Risolviamo ora la (2.18).

$$\ddot{x} + x = -\cos^3(t) = -\frac{1}{4}\cos(3t) - \frac{3}{4}\cos(t) \quad (2.19)$$

La soluzione della omogenea associata è $a \cos(t) + b \sin(t)$. Una soluzione particolare della (2.19) può essere cercata nella forma $\alpha \cos(3t) + \beta \cos(t)$, ma poiché $\cos(t)$ è anche soluzione dell'equazione omogenea va cercata, come ben noto, una soluzione del tipo $\alpha \cos(3t) + \beta t \sin(t)$. La sostituzione di questa nella (2.19) e l'imposizione delle condizioni al contorno per il primo ordine forniscono la soluzione completa al primo ordine della (2.15)

$$x(t) \sim \cos(t) + \epsilon \left(\frac{1}{32} \cos(3t) - \frac{1}{32} \cos(t) - \frac{3}{8} t \sin(t) \right) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (2.20)$$

È qui che si manifesta il limite dell'approccio perturbativo standard: basta notare che la soluzione della (2.15) è sicuramente limitata¹, mentre il termine $t \sin(t)$ cresce indefinitamente. In particolare quando $t \sim 1/\epsilon$ lo sviluppo perturbativo perde di significato. Potremmo quindi sperare di ottenere la soluzione asintotica (valida cioè anche per $t \rightarrow \infty$) solo a patto di sommare tutti i termini secolari della soluzione ad ogni ordine perturbativo. In questo caso particolare tale risommazione si può fare (cosa decisamente rara). Si trova [12] che tale somma, oltre che limitata, è proporzionale al coseno del tempo, ma con periodo variato di un fattore $\epsilon 3/8$ rispetto a quello della soluzione dell'oscillatore armonico (e cioè la soluzione al primo ordine):

$$\sum_{n=1}^{\infty} \epsilon^n x_n^{sec} \propto \cos\left[t\left(1 + \epsilon \frac{3}{8}\right)\right]$$

¹Infatti

$$\ddot{x} + x + \epsilon x^3 = 0 \Rightarrow \ddot{x}\dot{x} + x\dot{x} + \epsilon x^3\dot{x} = 0 \Rightarrow \left(\frac{\dot{x}^2}{2}\right)' + \left(\frac{x^2}{2}\right)' + \frac{\epsilon}{2}\left(\frac{x^4}{2}\right)' = 0 \quad (2.21)$$

La linearità dell'operatore di derivazione ci permette di dire

$$\frac{d}{dt}(\dot{x}^2 + x^2 + \frac{\epsilon}{2}x^4) = 0 \Rightarrow \dot{x}^2 + x^2 + \frac{\epsilon}{2}x^4 = \text{const} = 1 + \frac{\epsilon}{2}, \quad (2.22)$$

e cioè la costante valutata per $t = 0$. Poiché tutti i termini della (2.22) sono maggiori di 0 possiamo concludere che x^2 , e quindi x , è sicuramente limitata. Potevamo anche considerare il fatto che nell'equazione di Duffing la nonlinearità ha lo stesso segno dello spostamento x ad ogni istante, e quindi stiamo considerando un oscillatore classico (e dunque limitato) smorzato.

In generale si riesce raramente a calcolare la somma dei termini secolari; per ovviare a questo problema si possono usare delle tecniche che comprendano implicitamente la trattazione di tali termini, senza che sia richiesto di sommarli esplicitamente.

Dove il metodo perturbativo fallisce è evidente procedendo a ritroso dalla soluzione corretta. Abbiamo visto

$$y \propto \cos\left[t\left(1 + \epsilon \frac{3}{8}\right)\right] = \frac{e^{i(t + \frac{3}{8}\epsilon t)} + e^{-i(t + \frac{3}{8}\epsilon t)}}{2} = \frac{e^{it} e^{i\frac{3}{8}\epsilon t} + e^{-it} e^{-i\frac{3}{8}\epsilon t}}{2} . \quad (2.23)$$

Ora sviluppiamo in serie di ϵ i termini che ne dipendono:

$$e^{i\frac{3}{8}\epsilon t} \simeq 1 + i\frac{3}{8}\epsilon t \quad (2.24)$$

$$e^{-i\frac{3}{8}\epsilon t} \simeq 1 - i\frac{3}{8}\epsilon t \quad (2.25)$$

e ricaviamo

$$y \simeq \frac{e^{it} + e^{-it}}{2} + \frac{e^{it}(i\frac{3}{8}\epsilon t) - e^{-it}(i\frac{3}{8}\epsilon t)}{2i} = \cos(t) - \frac{3}{8}\epsilon t \sin(t) . \quad (2.26)$$

Ricaviamo cioè il termine secolare $t \sin(t)$ che compariva nella (2.20). Non possiamo sperare di scrivere una funzione periodica attraverso una somma di esponenziali sviluppati in serie, perché la convergenza si avrà solo dopo una somma infinita di termini.

2.2.2 La soluzione asintotica dell'oscillatore di Duffing

Supponiamo di avere un sistema con due ben definite scale temporali. Si potrà poi estendere questo schema a un sistema dotato di un qualunque numero di scale tipiche per ogni variabile. È questo il caso dell'oscillatore di Duffing, che è caratterizzato da una dinamica “veloce” con tempo caratteristico di ordine 1 e da una dinamica “lenta” con tempo caratteristico $1/\epsilon \gg 1$ indotta dal termine non lineare.

Indichiamo con T la variabile temporale che descrive la dinamica *lenta* e con t la variabile che descrive la dinamica *veloce*. Queste variabili sono legate dalla ovvia relazione

$$T = \epsilon t \quad (2.27)$$

con $0 < \epsilon \ll 1$ e dove si ha quindi che $T = \mathcal{O}(1)$ quando $t \sim 1/\epsilon$.

Le variabili veloce e lenta verranno nel prosieguo considerate indipendenti. La definizione di due scale temporali distinte porta necessariamente alla ridefinizione dell'operatore di derivazione temporale. Per una generica grandezza $\mathfrak{G}(t)$

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}(t) &\rightarrow \mathfrak{G}(t, T) \\ \frac{d}{dt} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial T}{\partial t} \frac{\partial}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial}{\partial T} \\ \frac{d^2}{dt^2} &\rightarrow \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2\epsilon \frac{\partial^2}{\partial t \partial T} + \epsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial T^2} . \end{aligned} \quad (2.28)$$

Possiamo ora sviluppare in serie di ϵ la grandezza \mathfrak{G} , tenendo conto che ogni funzione \mathfrak{G}_n è priori funzione di entrambe le variabili.

$$\mathfrak{G}(t, T) = \mathfrak{G}_0(t, T) + \epsilon \mathfrak{G}_1(t, T) + \epsilon^2 \mathfrak{G}_2(t, T) + \dots \quad (2.29)$$

Ora possiamo sostituire nelle equazioni che compongono il problema la (2.28) e la (2.29) e ottenere una gerarchia di equazioni in ϵ . La soluzione a grande scala per la variabile \mathfrak{G} sarà data dalla media sulle scale veloci della somma delle soluzioni per \mathfrak{G}_n .²

Nel caso specifico dell'oscillatore di Duffing si espande dunque la variabile x in serie di ϵ e si costruisce il nuovo operatore di derivazione

$$\begin{aligned} x(t) &\rightarrow \kappa(t, T) \\ \kappa(t, T) &= \kappa_0(t, T) + \epsilon \kappa_1(t, T) + \dots \\ \frac{\partial}{\partial t} &\rightarrow \partial_t + \epsilon \partial_T \quad . \end{aligned} \quad (2.30)$$

Sostituendo nella (2.15) si trova ai vari ordini

$$\mathcal{O}(1) : \quad \partial_t^2 \kappa_0 + \kappa_0 = 0 \Rightarrow \kappa_0 = A(T)e^{it} + B(T)e^{-it} \quad (2.31)$$

$$\mathcal{O}(\epsilon) : \quad \partial_t^2 \kappa_1 + 2\partial_t \partial_T \kappa_0 + \kappa_1 = -\kappa_0^3 \quad . \quad (2.32)$$

Le costanti di integrazione $A(T)$ e $B(T)$ devono soddisfare anche le condizioni iniziali

$$\begin{aligned} \kappa_0(0, 0) = 1 &\Rightarrow A(0) + B(0) = 1 \\ (\partial_t + \epsilon \partial_T) \kappa_0(0, 0) = 0 &\Rightarrow iA(0) - iB(0) + \epsilon(A'(0) + B'(0)) = 0 \\ &\dots \end{aligned} \quad (2.33)$$

La sostituzione della soluzione (2.31) nella (2.32) rende

$$\begin{aligned} \partial_t^2 \kappa_1 + \kappa_1 = \\ - (2iA'e^{it} - 2iB'e^{-it} + A^3e^{3it} - B^3e^{-3it} - 3A^2Be^{it} + 3AB^2e^{-it}) \quad . \end{aligned} \quad (2.34)$$

I termini di destra proporzionali a $e^{\pm it}$ sono quelli che danno origine ai termini secolari. Le funzioni $A(T)$ e $B(T)$ possono essere scelte a piacere, a patto che soddisfino le (2.33). A seconda di come questa funzioni sono scelte, l'approssimazione al primo ordine della soluzione dell'equazione di Duffing sarà più o meno precisa. Visto che i metodi classici sbagliavano proprio la stima dei termini secolari, si può sperare di ottenere una migliore soluzione scegliendo $A(T)$ e $B(T)$ in modo da rendere nulli proprio i termini secolari. Si può porre per semplicità $B = A^*$ e scrivere

$$2iA'e^{it} + 3A|A|^2e^{it} + \text{c.c.} = 0 \Rightarrow A' = i\frac{3}{2}A|A|^2 \quad . \quad (2.35)$$

²In realtà in molti casi la media può essere anche fatta direttamente sulle equazioni, con la possibilità di renderle più facili e di più immediata risoluzione.

Perchè A soddisfi contemporaneamente la (2.35) e le (2.33), tenuto conto che $B = A^*$, deve essere

$$A = \frac{1}{2}e^{i\frac{3}{8}T} \Rightarrow \kappa_0 = \frac{1}{2}e^{i(t+\frac{3}{8}T)} + \text{c.c.} \quad , \quad (2.36)$$

da cui

$$x \simeq \cos\left(t + \frac{3}{8}T\right) = \cos\left[t\left(1 + \frac{3}{8}\epsilon\right)\right] \quad . \quad (2.37)$$

Il metodo multiscala è quindi stato in grado di rendere la variazione asintotica del periodo dell'oscillatore fin dal primo ordine.

Capitolo 3

Analisi lineare e non lineare

In questo capitolo mostro i risultati dell'applicazione del metodo multiscala al modello di Oldroyd accoppiato con l'equazione di Navier-Stokes per il flusso viscoelastico. L'analisi lineare e non lineare compiuta in questo capitolo permette la descrizione dell'evoluzione del sistema in termini di un'equazione unidimensionale per il campo perturbazione trasversa, l'equazione di Cahn-Hilliard. Il confronto tra i risultati di simulazioni numeriche Navier-Stokes-Oldroyd e Cahn-Hilliard mostra la bontà del metodo analitico utilizzato e permette lo studio della dinamica a grandi scale del flusso offrendo un metodo di simulazione estremamente più veloce rispetto all'integrazione diretta del sistema originario.

3.1 Il formalismo multiscala nell'analisi di flussi viscoelastici

Come si è visto nel capitolo 2, il formalismo multiscala è in grado di gestire quei problemi in cui la presenza di battimenti tra onde con frequenze simili genera una dinamica non banale a due scale spaziali ben separate. È perciò importante capire se questo sia il caso per i flussi viscoelastici che stiamo studiando, anche se solo con argomenti qualitativi.

Come visto, la dinamica dei flussi viscoelastici è regolata da una generalizzazione dell'equazione di Navier-Stokes. La intrinseca non linearità del sistema rende difficile la ricerca di una soluzione generale per questo problema. Una possibile strada per la semplificazione dell'analisi consiste nel considerare perturbazioni da un flusso base stazionario; si potranno così utilizzare tecniche di linearizzazione e sviluppi in serie.

Supponiamo dunque di avere un flusso base v_0 a un scala¹ ben definita, 1 per fissare le idee, e di introdurre una perturbazione w a una scala molto maggiore,

¹Per un'onda la scala spaziale caratteristica è $L = k^{-1}$. Una perturbazione a grande scala ha perciò un vettore d'onda k con modulo piccolo; le piccole scale saranno invece contraddistinte da numeri d'onda più elevati.

diciamo di numero d'onda $\epsilon \ll 1$. La presenza di diverse scale spaziali si è resa evidente in vari studi sui flussi viscoelastici. La linearizzazione del termine avvevativo nell'equazione di Navier-Stokes darà origine a termini del genere $w\partial_i v_0$ e $v_0\partial_i w$. Se sia il flusso base che la perturbazione sono sinusoidali possiamo sostituire $v_0 \propto (e^{ix \cdot 1} + \text{C.C.})$ e $w \propto (e^{ix \cdot \epsilon} + \text{C.C.})$. Immaginiamo ora di integrare (così come fa un calcolatore) l'equazione di Navier-Stokes. Dopo un tempo dt i termini avvevativi linearizzati fanno interagire le due onde generando perturbazioni proporzionali a $(e^{ix(1+\epsilon)})$ e $(e^{ix(1-\epsilon)})$. A un tempo infinitesimo successivo questi nuovi modi interagiranno con il flusso base, generando perturbazioni del tipo $(e^{ix(1+\epsilon-1)})$, cioè nuovi modi *a scala* ϵ . È questo il meccanismo attraverso cui perturbazioni a grande scala possono estrarre energia da un flusso a più piccola scala e, possibilmente, crescere.

Come abbiamo visto nel paragrafo 2.2.1, la presenza di shift di fase di ordine ϵ nelle soluzioni suggerisce la presenza di singolarità nel sistema in studio. Sulla base di quanto trattato nel paragrafo 2.2.2, il metodo multiscale appare ideale per trattare le singolarità presenti in questo problema e quindi fornire uno strumento per dedurre equazioni per la descrizione delle perturbazioni a grande scala.

3.2 Analisi di stabilità lineare

Il sistema di equazioni studiato è composto dalla equazione di Navier-Stokes modificata per flussi viscoelastici, dall'equazione di continuità, dalla condizione di incompressibilità del fluido e dall'equazione per il tensore di conformazione dei polimeri σ_{ij} . Sinteticamente

$$\partial_t u_i + u_j \partial_j u_i = -\partial_j p + \nu \partial^2 u_i + \frac{\eta\nu}{\tau} \partial_j (\sigma_{ji} - \delta_{ji}) + \nu F_i \quad (3.1)$$

$$\partial_t \sigma_{ij} + u_k \partial_k \sigma_{ij} = \partial_k u_i \sigma_{kj} + \sigma_{ik} \partial_k u_j - \frac{1}{\tau} (\sigma_{ij} - \delta_{ij}) \quad (3.2)$$

con la condizione $\partial_i u_i = 0$. Un'opportuna scelta del flusso base è fondamentale per la massima semplificazione del sistema (3.1)-(3.2). In questo caso si è scelto un campo diretto solo lungo la direzione x ma dipendente solo dalla coordinata z : $\mathbf{U} = (U(z), 0)$. Sostituendo questa espressione nella (3.2) troviamo una soluzione stazionaria per il tensore di conformazione dei polimeri:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 + 2\tau(\partial_z U_x)^2 & \tau \partial_z U_x \\ \tau \partial_z U_x & 1 \end{pmatrix} \cdot \quad (3.3)$$

Sostituendo ora questo risultato nella (3.1) si ottiene un'equazione che lega il profilo di velocità e la forzante.

$$(1 + \eta) \partial_z^2 U_x(z) + F_x(z) = \text{costante} \quad (3.4)$$

La scelta di considerare flussi a media nulla sulla periodicità della forzante pone a zero la costante che compare nella (3.4). Un flusso particolarmente importante

capace di soddisfare queste condizioni è il *flusso di Kolmogorov* $\mathbf{U} = (V \cos(\frac{z}{L}), 0)$ con la forzante $\mathbf{F} = (\frac{V}{L^2} \cos(\frac{z}{L}), 0)$. La scelta operata nella (3.1), riscaldare la forzante con la viscosità, rende la forzante indipendente dai parametri polimerici.

I campi U , σ , p così costruiti sono soluzioni stazionarie della (3.1) e della (3.2). Lo studio della stabilità di queste soluzioni può essere fatto considerando piccole perturbazioni rispetto ai campi all'equilibrio.

$$U'_i = U_i + w_i, \quad p' = p + q, \quad \sigma'_{ij} = \sigma_{ij} + \zeta_{ij} \quad . \quad (3.5)$$

Anche il flusso perturbato deve soddisfare le (3.1)-(3.2); in particolare, tenendo conto del fatto che U_i , p e σ_{ij} sono per costruzione soluzioni del sistema si ottiene:

$$\partial_i w_i = 0 \quad (3.6)$$

$$\partial_t w_i + \partial_j (u_i w_j + u_j w_i) + \partial_j w_j w_i = -\partial_i q + \nu \partial^2 w_i + \frac{\eta \nu}{\tau} \partial_j \zeta_{ji} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} \partial_i \zeta_{ij} + u_k \partial_k \zeta_{ij} + w_k \partial_k \sigma_{ij} + w_k \partial_k \zeta_{ij} &= \partial_k u_i \zeta_{kj} + \partial_k w_i \sigma_{kj} + \partial_k w_i \zeta_{kj} + \\ &+ \zeta_{ik} \partial_k u_j + \sigma_{ik} \partial_k w_j + \zeta_{ik} \partial_k w_j - \frac{1}{\tau} \zeta_{ij} \quad . \end{aligned} \quad (3.8)$$

Una tipica operazione che si compie in fluidodinamica consiste nell'adimensionalizzazione delle equazioni. Come si è visto nel capitolo , l'equazione di Navier-Stokes può in questo modo essere ridotta alla dipendenza da un solo parametro, il numero di Reynolds. Alla base di questo metodo c'è la supposizione che esista una velocità caratteristica e che ci sia una sola lunghezza caratteristica. Per un flusso viscoelastico però si deve tenere conto di almeno due scale spaziali differenti. Poiché la velocità caratteristica è una sola (la velocità del flusso stazionario non perturbato) ci saranno anche due differenti scale temporali.

Si introducono quindi due classi di variabili, veloci e lente. Sia ϵ la separazione tra le variabili spaziali a grande e piccola scala ($X = \epsilon x$); si sceglie di conservare la struttura sostanzialmente diffusiva della (3.7) imponendo la separazione di scala temporale pari a ϵ^2 ($T = \epsilon^2 t$)². L'espansione in serie dei campi viene fatta secondo il parametro ϵ , che è proprio la separazione di scala. Questo perché voglio che la scala della perturbazione (ϵ) diventi di ordine 1.

Le classi di variabili lente e veloci e i corrispondenti operatori di derivazione sono

²Se vogliamo che a grande scala $|\partial_T w| \approx |\nabla^2 w|$ e abbiamo scelto $\nabla_i \rightarrow \epsilon^{-1} \partial_i$ risulta $\partial_T[w] \approx \epsilon^{-2} \partial_t^2[w]$. Poiché alla piccola scala $\partial_t[w] \approx \partial_i^2[w]$ deve essere $\partial_T \rightarrow \epsilon^{-2} \partial_t$.

quindi:

$$\begin{aligned}
\mathbf{X} &= \epsilon \mathbf{x} & T &= \epsilon^2 t \\
\tilde{\partial}_i &= \frac{\partial}{\partial X_i} & \partial_i &= \frac{\partial}{\partial x_i} \\
\frac{d}{dx_i} &\rightarrow \partial_i + \epsilon \tilde{\partial}_i \\
\partial_T &= \frac{\partial}{\partial T} & \partial_t &= \frac{\partial}{\partial t} \\
\frac{d}{dt} &\rightarrow \partial_t + \frac{\partial t}{\partial T} \partial T = \partial_t + \epsilon^2 \partial T \\
&\vdots & & .
\end{aligned}$$

Le perturbazioni possono ora essere espresse in serie di ϵ .

$$\begin{aligned}
\mathbf{w} &= \mathbf{w}^{(0)}(z, t, \tilde{x}, \tilde{z}, \tilde{t}) + \epsilon \mathbf{w}^{(1)}(z, t, \tilde{x}, \tilde{z}, \tilde{t}) + \epsilon^2 \mathbf{w}^{(2)}(z, t, \tilde{x}, \tilde{z}, \tilde{t}) + \dots \\
q &= q^{(0)}(z, t, \tilde{x}, \tilde{z}, \tilde{t}) + \epsilon q^{(1)}(z, t, \tilde{x}, \tilde{z}, \tilde{t}) + \epsilon^2 q^{(2)}(z, t, \tilde{x}, \tilde{z}, \tilde{t}) + \dots \\
\zeta &= \zeta^{(0)}(z, t, \tilde{x}, \tilde{z}, \tilde{t}) + \epsilon \zeta^{(1)}(z, t, \tilde{x}, \tilde{z}, \tilde{t}) + \epsilon^2 \zeta^{(2)}(z, t, \tilde{x}, \tilde{z}, \tilde{t}) + \dots
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Si sostituisce ora la scomposizione (3.9) nelle (3.6)-(3.8). Lo scopo di questa prima analisi è la scrittura di un'equazione per la curva di stabilità lineare del sistema. Ci interessiamo quindi a perturbazioni infinitesime rispetto ai campi non perturbati; considereremo nulli tutti i termini non lineari prodotto di due termini perturbativi. Raccogliendo i termini ai vari ordini in ϵ , si trova all'ordine zero:

$$\partial_z w_z^{(0)} = 0 \tag{3.10}$$

$$\partial_t w_x^{(0)} + \partial_z (w_z^{(0)} U) = \nu \partial_z^2 w_x^{(0)} + \eta \nu \tau^{-1} \partial_z \zeta_{zx}^{(0)} \tag{3.11}$$

$$\partial_t w_z^{(0)} = -\partial_z q^{(0)} + \nu \partial_z^2 w_z^{(0)} + \eta \nu \tau^{-1} \partial_z \zeta_{zz}^{(0)}$$

$$\partial_t \zeta_{xx}^{(0)} + \partial_z (w_z^{(0)} \sigma_{xx}) = 2 \zeta_{xz}^{(0)} \partial_z U + 2 \sigma_{xz} \partial_z w_x^{(0)} - \tau^{-1} \zeta_{xx}^{(0)}$$

$$\partial_t \zeta_{xz}^{(0)} + \partial_z (w_z^{(0)} \sigma_{xz}) = \zeta_{zz}^{(0)} \partial_z U + \sigma_{xz} \partial_z w_z^{(0)} + \sigma_{zz} \partial_z w_x^{(0)} - \tau^{-1} \zeta_{xz}^{(0)} \quad . \tag{3.12}$$

$$\partial_t \zeta_{zz}^{(0)} + \partial_z (w_z^{(0)} \sigma_{zz}) = 2 \sigma_{zz} \partial_z w_z^{(0)} - \tau^{-1} \zeta_{zz}^{(0)}$$

La (3.10) mostra che $w_z^{(0)}$ non dipende da alcuna variabile a piccola scala; indicando con $\langle \dots \rangle$ la media sulla periodicità spaziale si può scrivere $w_z^{(0)} = \langle w_z^{(0)} \rangle$.

La soluzione della (3.12) è

$$\begin{aligned}
\zeta_{xx}^{(0)} &= -6\tau^3 \langle w_z^{(0)} \rangle (\partial_z U) \partial_z^2 U + 4\tau^2 (\partial_z w_x^{(0)}) \partial_z U \\
\zeta_{xz}^{(0)} &= -\tau^2 \langle w_z^{(0)} \rangle \partial_z^2 U + \tau \partial_z w_x^{(0)} \\
\zeta_{zz}^{(0)} &= 0
\end{aligned} \tag{3.13}$$

e, sostituita nella (3.11), permette di trovare

$$\begin{aligned}\partial_t w_x^{(0)} + \langle w_z^{(0)} \rangle \partial_z U &= \nu(1 + \eta) \partial_z^2 w_x^{(0)} - \eta \nu \tau \langle w_z^{(0)} \rangle \partial_z^3 U \\ \partial_z q^{(0)} &= 0 \quad .\end{aligned}\tag{3.14}$$

Sostituendo l'espressione per U possono essere scritte le soluzioni all'ordine zero

$$\begin{aligned}q^{(0)} &= \langle q^{(0)} \rangle \\ w_x^{(0)} &= \langle w_x^{(0)} \rangle + \frac{V(L^2 - \eta \nu \tau)}{\nu(1 + \eta)L} \sin(z/L) \langle w_z^{(0)} \rangle \\ w_z^{(0)} &= \langle w_z^{(0)} \rangle \\ \zeta_{xx}^{(0)} &= -\frac{V^2 \tau^2 [2L^2 + \nu \tau(3 + \eta)]}{\nu(1 + \eta)L^3} \sin(2z/L) \langle w_z^{(0)} \rangle \\ \zeta_{xz}^{(0)} &= \frac{V \tau (L^2 + \nu \tau)}{\nu(1 + \eta)L^2} \cos(z/L) \langle w_z^{(0)} \rangle \\ \zeta_{zz}^{(0)} &= 0 \quad .\end{aligned}\tag{3.15}$$

All'ordine uno le equazioni sono

$$\partial_z w_z^{(1)} + \tilde{\partial}_x w_x^{(0)} + \tilde{\partial}_z w_z^{(0)} = 0\tag{3.16}$$

$$\begin{aligned}\partial_t w_x^{(1)} + \partial_z (w_z^{(1)} U) + 2\tilde{\partial}_x (w_x^{(0)} U) + \tilde{\partial}_z (w_z^{(0)} U) &= -\tilde{\partial}_x q^{(0)} + \nu \partial_z^2 w_x^{(1)} + \\ + 2\nu \partial_z \tilde{\partial}_z w_x^{(0)} + \eta \nu \tau^{-1} \partial_z \zeta_{zx}^{(1)} + \eta \nu \tau^{-1} \tilde{\partial}_x \zeta_{xx}^{(0)} + \eta \nu \tau^{-1} \tilde{\partial}_z \zeta_{zx}^{(0)} & \\ & \\ \partial_t w_z^{(1)} + \tilde{\partial}_x (U w_z^{(0)}) &= -\partial_z q^{(1)} - \tilde{\partial}_z q^{(0)} + \nu \partial_z^2 w_z^{(1)} + \\ + 2\nu \partial_z \tilde{\partial}_z w_z^{(0)} + \eta \nu \tau^{-1} \partial_z \zeta_{zz}^{(1)} + \eta \nu \tau^{-1} \tilde{\partial}_x \zeta_{xz}^{(0)} + \eta \nu \tau^{-1} \tilde{\partial}_z \zeta_{zz}^{(0)} & \\ & \\ \partial_t \zeta_{xx}^{(1)} + \partial_z (w_z^{(1)} \sigma_{xx}) + \tilde{\partial}_x (U \zeta_{xx}^{(0)}) + \tilde{\partial}_x (w_x^{(0)} \sigma_{xx}) + \tilde{\partial}_z (w_z^{(0)} \sigma_{xx}) &= \\ 2\zeta_{xz}^{(1)} \partial_z U + 2\sigma_{xz} \partial_z w_x^{(1)} + 2\sigma_{xx} \tilde{\partial}_x w_x^{(0)} + 2\sigma_{xz} \tilde{\partial}_z w_x^{(0)} - \tau^{-1} \zeta_{xx}^{(1)} & \\ & \\ \partial_t \zeta_{xz}^{(1)} + \partial_z (w_z^{(1)} \sigma_{xz}) + \tilde{\partial}_x (U \zeta_{xz}^{(0)}) + \tilde{\partial}_x (w_x^{(0)} \sigma_{xz}) + \tilde{\partial}_z (w_z^{(0)} \sigma_{xz}) &= \\ \zeta_{zz}^{(1)} \partial_z U + \sigma_{xz} \partial_z w_z^{(1)} + \sigma_{zz} \partial_z w_x^{(1)} + & \\ + \sigma_{xz} \tilde{\partial}_x w_x^{(0)} + \sigma_{zz} \tilde{\partial}_z w_x^{(0)} + \sigma_{xx} \tilde{\partial}_x w_z^{(0)} + \sigma_{xz} \tilde{\partial}_z w_z^{(0)} - \tau^{-1} \zeta_{xz}^{(1)} & \\ & \\ \partial_t \zeta_{zz}^{(1)} + \partial_z (w_z^{(1)} \sigma_{zz}) + \tilde{\partial}_x (U \zeta_{zz}^{(0)}) + \tilde{\partial}_x (w_x^{(0)} \sigma_{zz}) + \tilde{\partial}_z (w_z^{(0)} \sigma_{zz}) &= \\ 2\sigma_{zz} \partial_z w_z^{(1)} + 2\sigma_{xz} \tilde{\partial}_x w_z^{(0)} + 2\sigma_{zz} \tilde{\partial}_z w_z^{(0)} - \tau^{-1} \zeta_{zz}^{(1)} & .\end{aligned}\tag{3.17}$$

Come visto nel capitolo 2, il metodo multiscale è in grado di gestire quei problemi che danno origine a termini secolari. La (3.17) può essere vista a ogni ordine come un'equazione lineare con un termine noto F

$$(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla - \nu \nabla^2) \mathbf{w}^{(n)} = \mathcal{L} \mathbf{w}^{(n)} = F(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \quad .\tag{3.19}$$

Perché non si originino termini secolari F non deve essere soluzione della omogenea associata $\mathcal{L}\mathbf{w}^{(n)} = 0$. In particolare F deve essere ortogonale a qualunque funzione appartenente alla spazio delle soluzioni dell'equazione omogenea associata. Una qualunque funzione $N(X)$ delle sole coordinate lente fa parte di tale spazio, per cui deve essere $\int F(x, X) \cdot N(X) dx = 0$ e quindi $\langle F \rangle = 0$. Si impone perciò che la media delle (3.16)-(3.17) sia nulla. Imporre questa condizione, detta di risolubilità, significa riassumere i termini secolari; è perciò questo il cuore del formalismo multiscala.

A questo ordine si ha

$$\begin{aligned}\tilde{\partial}_x \langle w_x^{(0)} \rangle + \tilde{\partial}_z \langle w_z^{(0)} \rangle &= 0 \\ \tilde{\partial}_x \langle q^{(0)} \rangle &= 0 \\ \tilde{\partial}_z \langle q^{(0)} \rangle &= 0\end{aligned}\quad . \quad (3.20)$$

Possiamo allora porre $q^{(0)} = 0$. La soluzione all'ordine ϵ si ottiene similmente a prima. Le espressioni esplicite non sono particolarmente informative e sono qui state omesse.

La media delle equazioni all'ordine ϵ^2 dà un'equazione per $\langle \mathbf{w}^{(0)} \rangle$

$$\begin{aligned}\tilde{\partial}_t \langle w_x^{(0)} \rangle + 2\tilde{\partial}_x \langle U w_x^{(1)} \rangle + \tilde{\partial}_z \langle w_z^{(1)} U \rangle &= -\tilde{\partial}_x \langle q^{(1)} \rangle + \nu(\tilde{\partial}_x^2 + \tilde{\partial}_z^2) \langle w_x^{(0)} \rangle \\ &\quad + \eta\nu\tau^{-1}(\tilde{\partial}_x \langle \zeta_{xx}^{(1)} \rangle + \tilde{\partial}_z \langle \zeta_{xz}^{(1)} \rangle) \\ \tilde{\partial}_t \langle w_z^{(0)} \rangle + \tilde{\partial}_x \langle U w_z^{(1)} \rangle &= -\tilde{\partial}_z \langle q^{(1)} \rangle + \nu(\tilde{\partial}_x^2 + \tilde{\partial}_z^2) \langle w_z^{(0)} \rangle \\ &\quad + \eta\nu\tau^{-1}(\tilde{\partial}_x \langle \zeta_{xz}^{(1)} \rangle + \tilde{\partial}_z \langle \zeta_{zz}^{(1)} \rangle)\end{aligned}\quad , \quad (3.21)$$

dove le medie che compaiono nella (3.21) possono essere calcolate

$$\begin{aligned}\langle U w_x^{(1)} \rangle &= -3 \frac{V^2(L^2 - \eta\nu\tau)}{2\nu(1+\eta)} \tilde{\partial}_x \langle w_x^{(0)} \rangle \\ \langle U w_z^{(1)} \rangle &= \frac{V^2(L^2 - \eta\nu\tau)}{2\nu(1+\eta)} \tilde{\partial}_x \langle w_z^{(0)} \rangle \\ \langle \zeta_{xx}^{(1)} \rangle &= 2\tau \tilde{\partial}_x \langle w_x^{(0)} \rangle - \frac{4V^2\tau^2(L^2 - \eta\nu\tau)}{\nu(1+\eta)L^2} \tilde{\partial}_x \langle w_x^{(0)} \rangle \\ \langle \zeta_{xz}^{(1)} \rangle &= \tau(\tilde{\partial}_x \langle w_z^{(0)} \rangle + \tilde{\partial}_z \langle w_x^{(0)} \rangle) + \frac{V^2\tau^2(2L^2 + (3+\eta)\nu\tau)}{2\nu(1+\eta)L^2} \tilde{\partial}_x \langle w_z^{(0)} \rangle \\ \langle \zeta_{zz}^{(1)} \rangle &= -2\tau \tilde{\partial}_x \langle w_x^{(0)} \rangle\end{aligned}\quad . \quad (3.22)$$

Si è così ottenuta un'equazione chiusa per i campi medi a grande scala

$$\tilde{\partial}_x \langle w_x^{(0)} \rangle + \tilde{\partial}_z \langle w_z^{(0)} \rangle = 0 \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\partial}_t \langle w_x^{(0)} \rangle &= -\tilde{\partial}_x \langle q^{(1)} \rangle + \nu(1+\eta)(\tilde{\partial}_x^2 + \tilde{\partial}_z^2) \langle w_x^{(0)} \rangle \\ &\quad + \frac{V^2\{7L^2 + \eta\nu\tau[-17 + (7\eta-3)(\nu\tau/L^2)]\}}{2\nu(1+\eta)} \tilde{\partial}_x^2 \langle w_x^{(0)} \rangle\end{aligned}\quad (3.24)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\partial}_t \langle w_z^{(0)} \rangle &= -\tilde{\partial}_z \langle q^{(1)} \rangle + \nu(1+\eta)(\tilde{\partial}_x^2 + \tilde{\partial}_z^2) \langle w_z^{(0)} \rangle \\ &\quad + \frac{V^2\{-L^2 + \eta\nu\tau[3 + (3+\eta)(\nu\tau/L^2)]\}}{2\nu(1+\eta)} \tilde{\partial}_x^2 \langle w_z^{(0)} \rangle\end{aligned}\quad . \quad (3.25)$$

L'incompressibilità del campo di velocità garantisce l'esistenza di una funzione di corrente ψ tale che

$$\langle w_x^{(0)} \rangle = \frac{1}{V} \tilde{\partial}_Z \psi \quad \langle w_z^{(0)} \rangle = -\frac{1}{V} \tilde{\partial}_X \psi \quad . \quad (3.26)$$

In termini della funzione di corrente le (3.24)-(3.25) possono essere riscritte come

$$\begin{aligned} \tilde{\partial}_t [(\tilde{\partial}_x^2 + \tilde{\partial}_z^2) \psi] &= \nu(1 + \eta)(\tilde{\partial}_x^2 + \tilde{\partial}_z^2)^2 \psi \\ &+ \frac{V^2 \{7L^2 + \eta\nu\tau[-17 + (7\eta - 3)(\nu\tau/L^2)]\}}{2\nu(1 + \eta)} \tilde{\partial}_x^2 \tilde{\partial}_z^2 \psi \\ &+ \frac{V^2 \{-L^2 + \eta\nu\tau[3 + (3 + \eta)(\nu\tau/L^2)]\}}{2\nu(1 + \eta)} \tilde{\partial}_x^4 \psi \quad . \end{aligned} \quad (3.27)$$

Va notato che la (3.27) può essere riscritta come

$$\partial_t((\partial_i^2 + \partial_j^2)\psi) = \mathfrak{D}_{ij}^{eddy} \partial_i \partial_j ((\partial_i^2 + \partial_j^2)\psi) \quad . \quad (3.28)$$

È questa una equazione diffusiva non isotropa³, in cui cioè la diffusione non avviene in tutte le direzioni allo stesso modo. Per esprimere questa dipendenza si è introdotto il tensore viscosità turbolenta \mathfrak{D}_{ij}^{eddy} , il cui valore è funzione dei parametri viscosi.

La stabilità del flusso può essere studiata in termini dei modi normali $\psi(\mathbf{k}) = e^{ik_x X + ik_z Z}$; una zona instabile è caratterizzata da una viscosità turbolenta *negativa*, in cui le instabilità col tempo crescono anziché diminuire. La condizione di stabilità per la (3.27) è

$$\begin{aligned} &[2(1 + \eta)^2 - (1 + \eta)^2 \mathcal{R}e^2 + 3\eta(1 + \eta) \mathcal{D}e \mathcal{R}e + \eta(3 + \eta) \mathcal{D}e^2] s^2 \\ &+ [4(1 + \eta)^2 + 7(1 + \eta)^2 \mathcal{R}e^2 - 17\eta(1 + \eta) \mathcal{D}e, \mathcal{R}e + \eta(7\eta - 3) \mathcal{D}e^2] s \\ &+ 2(1 + \eta)^2 > 0 \quad , \end{aligned} \quad (3.29)$$

in cui si sono introdotti i parametri $\mathcal{R}e = VL/[(\nu(1 + \eta))]$ e $\mathcal{D}e = \tau V/L$, il numero di Reynolds e il numero di Deborah per il flusso viscoelastico. Da soli sono in grado di descrivere completamente la dinamica del flusso. In questa equazione $s^{1/2} = \frac{k_x}{k_z} = \tan \theta$, dove θ è l'angolo tra il flusso base e la perturbazione ($\theta = 0$ per perturbazioni longitudinali e $\theta = \pi/2$ per perturbazioni trasverse). Questo significa che $s = \tan^2 \theta$ e quindi dobbiamo interessarci solo a valori di s positivi. Per ottenere la curva di stabilità marginale ricordiamo che una forma quadratica $Q(s) = as^2 + bs + c$ è maggiore di zero per ogni $s > 0$ se e solo se:

$$\left\{ \begin{array}{l} a > 0 \\ \Delta = b^2 - 4ac < 0 \end{array} \right. \quad \circ \quad \left\{ \begin{array}{l} a > 0 \\ b > 0 \\ c > 0 \\ \Delta > 0 \end{array} \right. \quad . \quad (3.30)$$

Il corrispondente diagramma di stabilità è rappresentato in figura 3.1.

³La (3.28) sarebbe isotropa se fosse $\mathfrak{D}_{ij}^{eddy} = D_0 \delta_{ij}$; questo nel nostro caso non può accadere.

I cerchi in blu indicano la misure della curva di stabilità da me compiute attraverso simulazioni numeriche dirette del sistema (3.1)-(3.2). Si veda in particolare il paragrafo 3.5. I simboli rossi rappresentano invece i risultati ottenuti nel corso di una precedente tesi tramite integrazione numerica dell'equazione di Orr-Sommerfeld. Per valori di De maggiori di circa 2.2 le simulazioni dirette del sistema viscoelastico danno risultati inaccettabili⁴, che è esattamente il punto in cui le simulazioni dell'equazione di Orr-sommerfeld iniziano a discostarsi dalla curva di stabilità.

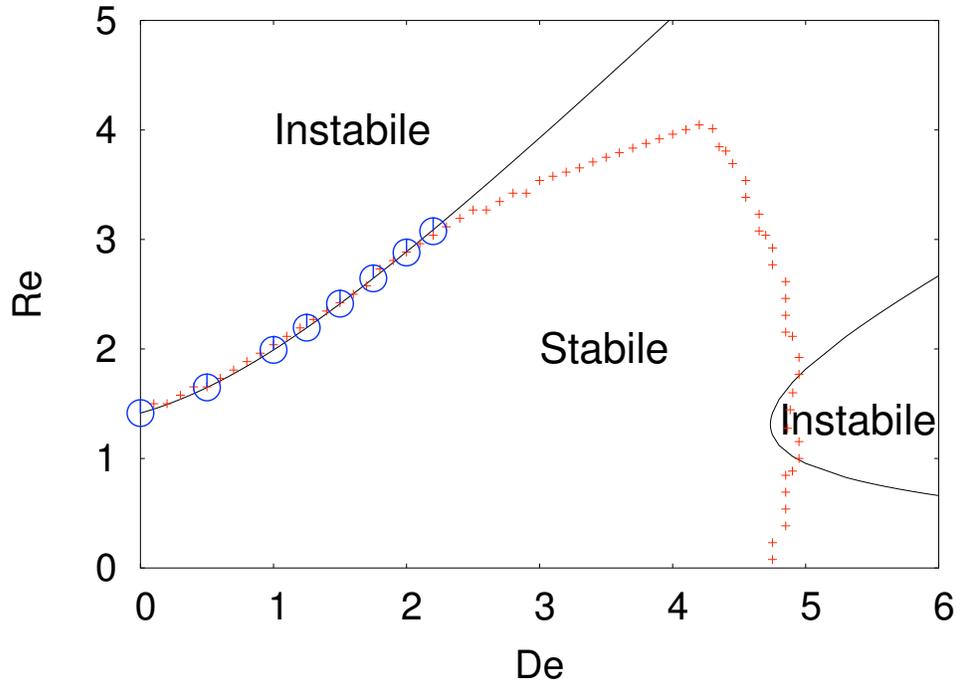


Figura 3.1: Diagramma di stabilità lineare del modello Oldroyd-B.

3.3 Analisi di stabilità non lineare

L'analisi di stabilità compiuta nel paragrafo precedente ha permesso l'individuazione di zone nello spazio delle fasi in cui la perturbazione è *instabile* e tende, per quanto piccola, a crescere indefinitamente. Il meccanismo di crescita è legato al fatto che la soluzione (3.27) nel limite di grandi scale spaziali è sostanzialmente un'equazione diffusiva, il cui tensore viscosità turbolenta è però negativo.

⁴In particolare il tensore di conformazione dei polimeri è rappresentato da una matrice con determinante negativo, mentre si può dimostrare che essa deve essere invece definita positiva.

Non va trascurato che l'analisi fin ora fatta supponeva le perturbazioni molto minori dei corrispondenti campi relativi al flusso base. Per flussi instabili questa condizione sarà sicuramente violata col tempo. La ricerca della soluzione asintotica per tali stati deve necessariamente essere non lineare.

L'analisi delle (3.1)-(3.2) nel regime *debomente* non lineare, per numeri di Reynolds vicini alla curva di stabilità, può essere compiuta con tecniche multiscala. Per fare questo è però necessario arguire la forma generale che l'equazione assumerà. Dall'analisi lineare si nota che la perturbazione trasversa è quella che ha il massimo tasso di crescita, fatto che spinge a eseguire l'analisi non lineare in presenza di perturbazioni trasversa. Il problema sarà così quasi unidimensionale.

La nuova equazione per la perturbazione trasversa conterrà sicuramente il termine $\partial^2 w_z$ responsabile della instabilità lineare. Sarà poi presente un termine proporzionale a $\partial^4 w_z$ responsabile della stabilità delle grandi scale (termine che rende il problema ben posto). Il segno dei coefficienti di questi termini sarà tale da riflettere la loro natura stabilizzante o instabilizzante. Deve poi essere presente un termine non lineare capace di stabilizzare la crescita esponenziale del regime lineare.

La forma che assumerà il termine non lineare può essere dedotta da considerazioni generali sulla dinamica del flusso. Saranno sicuramente presenti due operatori di derivazione, uno per la conservazione della quantità di moto⁵ e uno per la conservazione della parità⁶. La direzione in cui il campo cresce maggiormente è quella in cui il tensore viscosità turbolenta è massimo in valore assoluto; l'esistenza di una tale direzione porterà a un'equazione sostanzialmente unidimensionale per la dinamica della perturbazione. Questo fatto porta alla scomparsa dei termini di tipo avvevivo $(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v}$, dipendenti dal quadrato del campo di velocità. Le nonlinearità si presenteranno allora attraverso termini contenenti il campo di velocità al terzo grado; il più generale campo soddisfacente le condizioni descritte è $\partial(w_z^2 \partial w_z)$.

Il formalismo multiscala introdurrà, come visto, due set di variabili legate dalla separazione di scala ϵ : $\mathbf{x} = \epsilon \mathbf{X}$. Resta da capire come debbano essere scalate le variabili temporali e come vadano espansi i campi perturbazione.

Abbiamo visto che l'equazione cercata dovrà essere della forma

$$\partial_T w_z = A \partial_X^2 w)_z + B \partial_X (w_z^2 \partial_X w_z) + C \partial_X^4 w_z \quad . \quad (3.31)$$

Si richiede che siano confrontabili tutti i termini al primo ordine perturbativo perché la dinamica sia regolata dall'equazione scelta. La trasformazione da variabili lente X a variabili veloci x riscalda ogni derivata spaziale con un termine ϵ . Indichiamo invece con ϵ_w il parametro (per ora incognito) attraverso cui si espande la perturbazione w_z .

⁵L'equazione di Navier-Stokes è in sostanza un'equazione per la quantità di moto. Se i termini che compaiono nel fattore di destra sono divergenze di altri campi (qualunque), l'integrale di volume di tutti questi fattori è nullo e quindi la variazione nel tempo della quantità di moto è nulla.

⁶La dinamica non lineare di un flusso può essere modificata profondamente dalle proprietà di simmetria del sistema. In particolare esse possono portare alla scomparsa di alcuni termini nell'equazione per la perturbazione. Per una trattazione più approfondita si vedano [13, 14].

Lo studio della dinamica non lineare è stato compiuto, come visto, nel regime debolmente non lineare. Questo significa che si considerano sistemi aventi viscosità poco inferiore alla viscosità critica per cui esistono modi a grande scala linearmente instabili. In queste condizioni, per costruzione, il coefficiente A è nullo al prim'ordine.

$$A = A_{crit} + \left. \frac{\partial A}{\partial \nu} \right|_{\nu_c} (\nu - \nu_c) = \left. \frac{\partial A}{\partial \nu} \right|_{\nu_c} (\nu - \nu_c) \quad .$$

Il confronto tra il termine non lineare e il termine diffusivo implica che

$$B\epsilon^2\epsilon_w^3 \sim \left. \frac{\partial A}{\partial \nu} \right|_{\nu_c} (\nu - \nu_c)\epsilon^2\epsilon_w \quad . \quad (3.32)$$

Il confronto tra il termine non lineare e la derivata quarta del campo invece impone

$$\left. \frac{\partial A}{\partial \nu} \right|_{\nu_c} (\nu - \nu_c)\epsilon^2\epsilon_w \sim C\epsilon^4\epsilon_w \quad . \quad (3.33)$$

La (3.32) e la (3.33) quindi fissano lo scaling della perturbazione e della distanza dal numero di Reynolds critico:

$$\begin{aligned} \epsilon &= \epsilon_w \\ \frac{\nu - \nu_c}{\nu} &\sim \epsilon^2 \Rightarrow \nu = \nu_c(1 - \epsilon^2) \quad . \end{aligned} \quad (3.34)$$

Va ancora deciso lo scaling per le perturbazioni al tensore di conformazione dei polimeri e al campo di pressione. Per questo basta notare che nella (3.8) compaiono i termini $\frac{1}{\tau}\zeta$ e $(\partial w_z) \cdot \sigma$. Affinché questi termini possano bilanciarsi lo scaling della perturbazione della velocità e dei polimeri deve essere uguale. Similmente si trova che anche lo scaling del campo di pressione è ϵ .

Resta da valutare il comportamento dell'operatore di derivata temporale. Questo termine deve essere comparabile con un termine contenente la derivata quarta del campo di velocità; lo scaling per questo operatore sarà quindi $\partial_T \rightarrow \epsilon^4\partial_t$.

3.3.1 Risoluzione del sistema non lineare

Si procede dunque come nel caso lineare, senza più trascurare i termini derivanti dal prodotto di due perturbazioni. Una semplificazione necessaria a limitare la complessità del sistema è la scelta di considerare solo regimi debolmente non lineari. In questo modo consideriamo la dinamica solo sulla curva marginale di stabilità, per poi estenderla a punti poco al di sopra di tale curva. I calcoli sono lunghi e ricalcano lo stile dell'analisi lineare. Si vede subito che la dinamica del campo w_z deve comparire risolvendo le equazioni fino al *quarto* ordine perturbativo e imponendo la condizione di risolubilità al *quint'*ordine. Ciò discende dal fatto che il termine $\tilde{\partial}_T \langle w_z^{(1)} \rangle$ è preceduto da ϵ^5 (quattro ϵ provenienti dalla derivata e uno dal campo).

Non riporto qui per brevità i calcoli. Si veda l'appendice B per le soluzioni dei primi due ordini. Più interessante è il metodo di risoluzione. Ad ogni ordine le operazioni da compiersi sono:

- Soluzione dell'equazione di continuità. Il risultato è l'espressione esplicita di $w_z^{(n)}(z, X)$ in termini di espressioni note.
- Soluzione dell'equazione per $\zeta_{zz}^{(n)}$; si riesce sempre a risolvere algebricamente.
- Soluzione dell'equazione per la componente trasversa del campo di velocità. Questo campo è già stato ottenuto dalla soluzione dell'equazione di continuità; questa equazione restituisce la perturbazione al campo di pressione.
- Soluzione del sistema accoppiato per $\zeta_{xz}^{(n)}$ e $w_x^{(n)}$. Si ottengono le espressioni per i relativi campi.
- Soluzione dell'equazione per $\zeta_{xx}^{(n)}$; la soluzione è ottenuta algebricamente.
- Imposizione della condizione di risolubilità all'equazione di continuità e all'equazione per la velocità all'ordine $n + 1$. La corrispondente condizione sulle equazioni per il tensore di conformazione dei polimeri è automaticamente soddisfatta perché i campi sono determinati univocamente dagli ordini precedenti e dal campo di velocità.

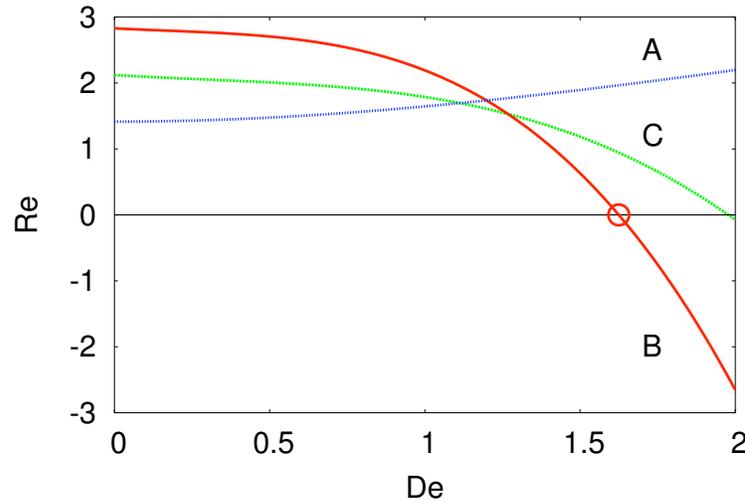


Figura 3.2: Il valore dei parametri A, B e C al variare del numero di Deborah per $L = V = 1$ e $\eta = 0.3$.

L'ultima operazione è quella che incorpora la maggior parte dei calcoli e rappresenta il fulcro del metodo multiscala. Procedendo in questo modo dall'ordine 1 all'ordine 4 si trovano le espressioni per i campi a tutti gli ordini. La soluzione della condizione di risolubilità all'ordine 5 ha come risultato un'equazione chiusa per la dinamica di grande scala del campo $\langle w_z^{(1)} \rangle$, che assume la forma dell'equazione di Cahn-Hilliard [[15]- [20]]:

$$\tilde{\partial}_t \langle w_z^{(1)} \rangle = \tilde{\partial}_x \left[(-A + B \langle w_z^{(1)} \rangle^2) \tilde{\partial}_x \langle w_z^{(1)} \rangle \right] - C \tilde{\partial}_x^4 \langle w_z^{(1)} \rangle \quad . \quad (3.35)$$

I coefficienti A, B e C sono funzioni note dei parametri del flusso $\mathcal{Re}, \mathcal{De}$ e η . La loro forma esplicita è riportata in appendice B, così come le soluzioni agli ordini più bassi. In figura 3.2 riporto il loro andamento per $\eta = 0.3$. Le soluzioni ai vari ordini di tutti i campi perturbazione così ottenute sono dipendenti solo da potenze e derivate di $\langle w_z^{(1)} \rangle$ o funzioni esplicite di z .

3.4 La dinamica dell'equazione di Cahn-Hilliard

È noto [18, 21] che l'equazione di Cahn-Hilliard possiede una formulazione variazionale in termini di un funzionale di Lyapunov. La (3.35) può cioè essere riscritta come⁷

$$\begin{aligned} \tilde{\partial}_T w(X, T) &= \tilde{\partial}_X^2 \frac{\delta F[w]}{\delta w} \\ F[w] &\equiv \int dx \left[\frac{1}{12} B w^4 - \frac{1}{2} A w^2 + \frac{1}{2} C (\tilde{\partial}_X w)^2 \right] \quad . \end{aligned}$$

Per provare questo basta calcolare espressamente la derivata funzionale. Infatti si trova:

$$\begin{aligned} \frac{\delta F[w(x)]}{\delta w(y)} &= \int \left(\frac{-A}{2} \cdot 2w(x) \delta(x-y) + \frac{B}{12} \cdot 4w(x)^3 \delta(x-y) + \right. \\ &\quad \left. C \tilde{\partial}_X w(x) \tilde{\partial}_X \delta(x-y) \right) dx = \\ &= -A w(y) + \frac{B}{3} w(y)^3 + C \int \tilde{\partial}_X [\tilde{\partial}_X w(x) \delta(x-y)] dx + \\ &= -A w(y) + \frac{B}{3} w(y)^3 - C \tilde{\partial}_X^2 w(y) \quad , \quad (3.36) \end{aligned}$$

dopo un'integrazione per parti.

L'esistenza del funzionale implica [19, 22] l'esistenza di uno stato asintotico; con condizioni al contorno periodiche in X il campo tende asintoticamente allo stato stazionario che minimizza il funzionale di Lyapunov $F[w]$.

⁷Considero ora per chiarezza solo campi medi: con $w(X, T)$ intendo $\langle w_z(X, T) \rangle$.

Localmente si trovano [21] soluzioni stazionarie o quasi stazionarie con struttura a tangente iperbolica, dette *kink* e *antikink* (a seconda del segno). La loro forma esplicita dipende non banalmente dalla dinamica della perturbazione trasversa w_z , tranne che al raggiungimento dello stato asintotico. In questo caso infatti deve essere $\frac{\delta F}{\delta w} = 0$. Definendo $I = -\frac{A}{2}w^2 - \frac{B}{12}w^4$, deve essere:

$$\frac{\delta F}{\delta w} = \frac{\delta}{\delta w} \int dx [I + \frac{C}{2}(\tilde{\partial}_X w)^2] = I'(w) - C\tilde{\partial}_X^2 w = 0 \Rightarrow I'(w) = C\tilde{\partial}_X^2 w$$

La $I(w)$ è una funzione di w , a sua volta funzione di X . Si può quindi scrivere:

$$\tilde{\partial}_X I = \frac{\tilde{\partial} I}{\tilde{\partial} w} \frac{\tilde{\partial} w}{\tilde{\partial} X} = C\tilde{\partial}_X^2 w \frac{\tilde{\partial} w}{\tilde{\partial} X} = \frac{C}{2}\tilde{\partial}_X(\tilde{\partial}_X w)^2 \Rightarrow I = \frac{C}{2}(\tilde{\partial}_X w)^2 + \text{const} \quad .$$

Si osserva che, in presenza di un massimo (o un minimo) di w , deve essere $I(w_{max}) = \text{const}$. Data la natura di I , un massimo di w corrisponde a un massimo di I . Si ottiene quindi w_{max} risolvendo la $\frac{d}{dw}I = 0$. Si ottiene così $\text{const} = \pm \frac{3A^2}{4B}$. Sostituendo questo risultato e la definizione di I nella (3.37) si ottiene una equazione differenziale, la cui soluzione è nota: sono le strutture *kink* e *antikink*

$$v = \pm \left(\frac{3A}{B}\right)^{1/2} \tanh \left[\left(\frac{A}{2C}\right)^{1/2} (X - X_0) \right] \quad . \quad (3.37)$$

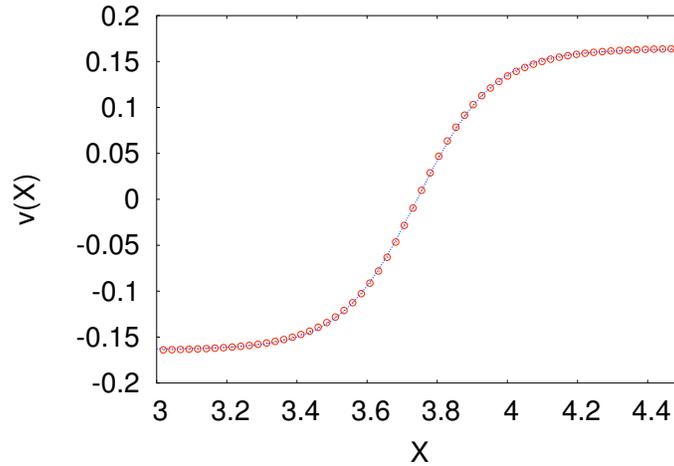


Figura 3.3: Localmente la struttura della perturbazione trasversa del campo di velocità è data dalla (3.37). L'intero campo può essere espresso come somma di soluzioni a tangente iperbolica confinate.

Non si conoscono metodi analitici per studiare come il sistema tenda allo stato finale (3.37), il che obbliga la ricerca di soluzioni numeriche tramite integrazione numerica della (3.35). Un caso particolare è costituito dall'approssimazione di piccole perturbazioni. Se il campo w_z è sufficientemente piccolo, ci si può aspettare di poter trascurare il termine non lineare dipendente da w_z^3 . Sotto questa condizione le soluzioni per l'energia associata ad ogni modo sono di tipo esponenziale.

Come discusso precedentemente, per piccoli k la soluzione deve essere instabile, mentre sarà stabile nel limite di grandi k . Il più elevato modo per cui la (3.35) è linearmente instabile si ricava imponendo nulla la crescita dell'energia corrispondente al modo k . Applicando l'operatore trasformata di Fourier alla (3.35) e trascurando il termine non lineare si trova:

$$-i\omega T\hat{w}(k) = Ak^2\hat{w}(k) - Ck^4\hat{w}(k) \quad . \quad (3.38)$$

Moltiplicando per $\hat{w}^*(k)$ e valutando la corrispondente equazione coniugata di giunge alla

$$\frac{1}{2}\omega_{Im}T|\hat{w}^2(k)| = Ak^2|\hat{w}^2(k)| - Ck^4|\hat{w}^2(k)| \quad (3.39)$$

$$0 = -Ck^4 + \epsilon^2 Ak^2 \Rightarrow k_{banda} = \sqrt{\frac{\epsilon^2 A}{C}} \quad . \quad (3.40)$$

Tutti i modi minori di k_{banda} sono linearmente instabili. Il modo di questa banda che cresce più velocemente è invece quello per cui $\frac{\partial}{\partial k}\omega_{Im} = 0$. Si ottiene quindi $k_{max} = \sqrt{\frac{\epsilon^2 A}{2C}}$; il modo più energetico è quindi quello più vicino a k_{max} ⁸.

Se quindi alcuni modi sono destinati a decadere nel tempo e a non prendere più parte nella dinamica del flusso, altri crescono fino a che non si può più trascurare il termine non lineare della (3.35). Ho quindi studiato l'analisi della dinamica per lunghi tempi o grandi perturbazioni con l'aiuto di un codice numerico in grado di integrare l'equazione di Cahn-Hilliard. Alcuni dettagli sul programma sono contenuti nell'appendice D . I risultati che ho ottenuto mostrano la correttezza dell'analisi lineare fatta e ricalcano i risultati di She [18]. Data una perturbazione sufficientemente piccola al sistema, tutti i k minori di k_{banda} cresceranno esponenzialmente. Supponendo la perturbazione iniziale uniformemente distribuita su tutti i modi, il primo a raggiungere un'ampiezza tale da non rendere più trascurabile il termine non lineare sarà k_{max} . Il sistema quindi raggiungerà una situazione apparentemente stabile bilanciando i termini instabilizzanti ($-A\partial^2 w$) e stabilizzanti ($\frac{B}{3}\partial^2 w^3$). Quando però il modo⁹ $q_{max} - 1$ diventa a sua volta sufficientemente grande e raggiunge il bilanciamento tra il termine stabilizzante e quello instabilizzante, l'energia del modo q_{max} crolla [16]; é questo il risultato di un'interazione di tipo kink-antikink.

⁸Indicherò d'ora in poi con k_{banda} il massimo modo instabile e con k_{max} il modo a crescita massima, scelti tra quelli realmente presenti nel sistema. Un discorso più approfondito sui modi che siamo in grado di descrivere è contenuto nell'appendice ??

⁹Intendo con q_{max} l'intero corrispondente al modo k_{max} . Per la descrizione del loro legame si veda l'appendice D.

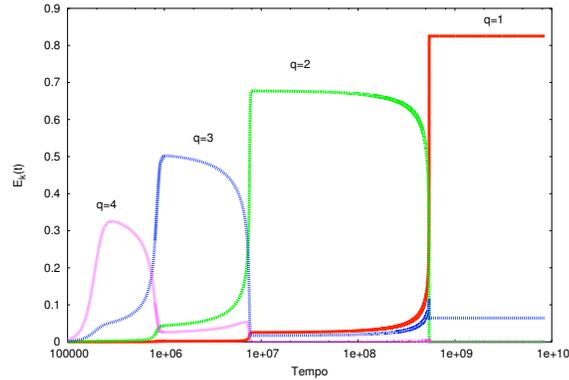


Figura 3.4: Dinamica Cahn-Hilliard per $r = 64$, $\mathcal{D}e = 1.4$, $\epsilon = 0.08$. Il modo a crescita lineare massima è $q = 4$. Seguono quindi gli stati metastabili corrispondenti ai modi 3, 2 e 1. Quest'ultimo è lo stato finale stabile che corrisponde al minimo del funzionale di Lyapunov $F[w]$. Per maggiori dettagli sulle simulazioni numeriche si veda l'appendice D.

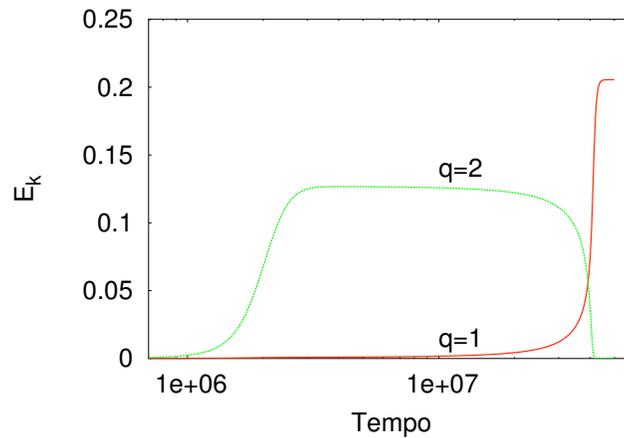


Figura 3.5: Risultati di una simulazione a $\mathcal{D}e = 1.4$, $\epsilon = 0.04$. La transizione dal flusso da uno stato con periodicità $q = 2$ a un altro con periodicità $q = 1$ può essere vista come un'annichilazione tra un *kink* e un *antikink*.

Lo stessa cosa avviene per i modi successivi, fino al minimo disponibile. Si assiste perciò alla successione di soluzioni metastabili, ciascuna dominata da una perturbazione a periodicità definita, che si alternano fino al raggiungimento del modo $q = 1$ (figura 3.4) [18]. Poiché non è in grado di trasferire energia a modi inferiori, lo stato finale stabile che minimizza il funzionale di Lyapunov $F(w)$ è proprio quello corrispondente a $q = 1$.

La figura 3.6 mostra uno stato metastabile corrispondente a $q = 2$. Con l'andare del tempo il modo $q = 1$ cresce fino a che il sistema non raggiunge lo stato stabile corrispondente (figura 3.8). Un'immagine della transizione è rappresentata in figura 3.7.

La successione di stati metastabili di periodo L/q (con q intero positivo uguale a $q_{max}, q_{max} - 1, q_{max} - 2, \dots$) che si osservano nelle simulazioni (figura 3.4) può essere interpretata in termini di dinamica dei kink con successive annichilazioni di coppie *kink-antikink*.

Ciascuna soluzione stabile o metastabile, di periodo $2\pi/n$, corrisponde a un sistema di n vortici con vorticità concorde. La transizione di stato corrisponde a una redistribuzione che coinvolge l'eliminazione di un vortice. Questo processo è detto *arithmetic pairing cascade*, per distinguerlo da meccanismi di pairing tipici di alcuni layer di mescolamento, in cui il numero di vortici si dimezza ad ogni passaggio. Questo processo di cascata è anche detto *inverso*, perchè l'energia viene trasferita da *eddy*¹⁰ a piccola scala a *eddy* a grande scala, contrariamente a quanto avviene nel caso di turbolenza tridimensionale.

3.4.1 Limiti di validità dell'equazione di Cahn-Hilliard

I risultati fin ora ottenuti sono validi finché siamo nelle immediate vicinanze della curva marginale di stabilità. Se il numero di Reynolds diventa troppo grande cade l'ipotesi $\epsilon \ll 1$; in realtà il confronto tra le simulazioni dirette e le simulazioni Cahn-Hilliard danno un buon accordo anche per valori di ϵ non piccolissimi (0.15).

Più interessante è la situazione per quanto riguarda il numero di Deborah. Il coefficiente A dell'equazione di Cahn-Hilliard è il responsabile della crescita delle piccole scale ed è positivo per costruzione (abbiamo infatti scelto di essere al di sopra della curva di stabilità). Il coefficiente C è responsabile della stabilità della perturbazione a piccola scala. Per k abbastanza elevati infatti questo termine predomina sugli altri e stabilizza le perturbazioni. Osservando la dipendenza di C dal numero di Deborah (figura 3.2) si può osservare che, oltre un certo valore, il coefficiente cambia segno. In questo regime non si avrebbero termini in grado di stabilizzare le piccole scale; in questo modo la perturbazione sarebbe presente per qualunque k , facendo cadere l'ipotesi di separazione di scala necessaria all'introdu-

¹⁰Un *eddy* è una zona di flusso in cui la funzione di autocorrelazione $\langle v_\alpha v_\beta \rangle$ è sensibilmente diversa da zero. In particolare sono strutture di flusso tipicamente turbolente che comprendono i vortici, ma più generali.

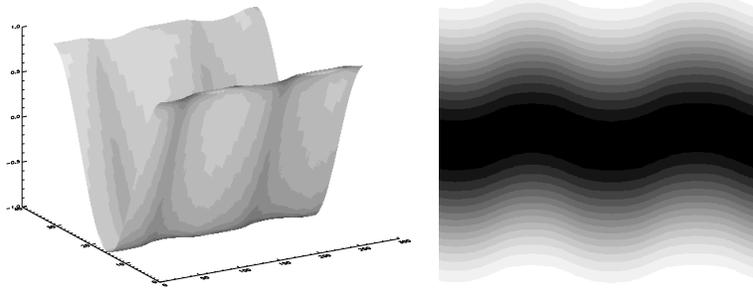


Figura 3.6: Uno snapshot della velocità longitudinale u del flusso a $t = 10^7$. La dipendenza del flusso da z è concentrata sul modo $k_y = 1$ (e cioè il flusso di Kolmogorov), mentre la perturbazione a grande scala dipendente da X è sul modo $q = 2$ (si confronti con la figura 3.5).

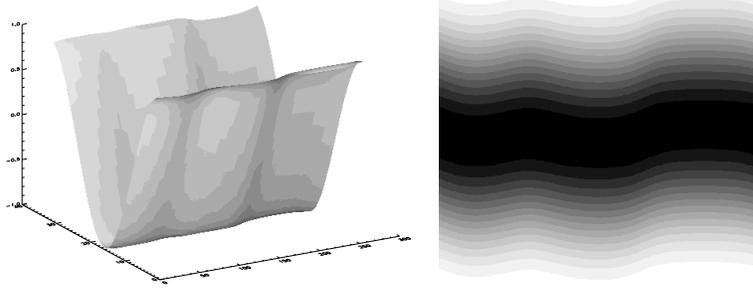


Figura 3.7: A $t = 4 \cdot 10^7$ la perturbazione, dipendente da X , non ha una ben definita periodicità. Come si vede dalla figura 3.5, il sistema è nel pieno della transizione dallo stato metastabile concentrato su $q = 2$ allo stato finale stabile a $q = 1$.

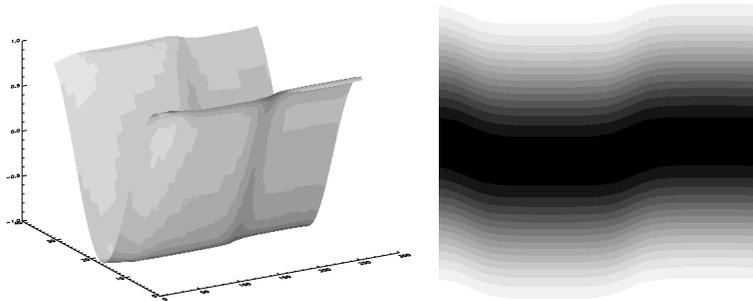


Figura 3.8: A $t = 5 \cdot 10^7$ tutta l'energia della perturbazione è sul primo modo. È questo lo stato finale su cui si assesta il sistema.

zione del metodo multiscale. Il termine più importante è però quello non lineare. Per valori di B positivi esso permette di stabilizzare le perturbazioni che sono cresciute troppo; è quindi uno dei motori principali della dinamica Cahn-Hilliard. Se però il numero di Deborah è sufficientemente alto (figura 3.2) il coefficiente B cambia segno. Indicheremo il valore del numero di Deborah per cui questo succede con $\mathcal{D}e^*$. L'equazione di Cahn-Hilliard non è più in grado di limitare le perturbazioni, la cui ampiezza è libera di crescere indefinitamente. Non è però verosimile che questo sia il comportamento reale di un fluido viscoelastico.

Simulazioni dirette mostrano che l'ampiezza delle perturbazioni, avvicinandosi al valore critico $\mathcal{D}e^*$ cresce, ma non diverge mai. Questo fatto può essere spiegato ipotizzando che il termine contenente il cubo della perturbazione vada effettivamente a zero, ma che la perturbazione cresca fino a raggiungere un valore per cui non può più essere trascurato il termine non lineare successivo. Per la conservazione di momento angolare e parità è necessaria la presenza di due operatori di derivazione e della potenza *quinta* del campo di velocità. In queste condizioni cambierà, insieme alla forma, la dinamica del flusso.

Lo studio del sistema di equazioni nella nuova situazione è compiuto nel capitolo 5 e porta all'enucleazione di una generalizzazione della equazione di Cahn-Hilliard in grado di descrivere anche la dinamica del campo di velocità nell'intorno del punto per cui B è nullo, nell'ipotesi che C sia ancora positivo.

3.5 Simulazioni numeriche dirette

Come discusso, il metodo multiscale può essere applicato a un sistema dotato di scale spazio-temporale ben distinte. Questa condizione può solo essere verificata a posteriori attraverso il confronto tra i risultati di simulazioni numeriche dirette del sistema viscoelastico (3.1)-(3.2) e i risultati analitici dell'analisi multiscale.¹¹ La teoria predice la crescita di modi trasversali a scala molto maggiore della tipica scala del flusso di Kolmogorov L_{Kolm} . Ho perciò integrato le equazioni in un box rettangolare con $L_{Kolm} = L_z = 2\pi$ e $L_x = 128\pi$. Questo mi ha permesso di investigare modi trasversali fino al $k = 1/64$. Un modo più immediato per caratterizzare i modi consiste nel riscaldare tutte le lunghezze sulla dimensione longitudinale del box di integrazione. Un'oscillazione con $k = 1/64$ su una lunghezza $L_x = 128\pi$ corrisponde a un'oscillazione completa su L_x . È allora comodo descrivere i modi dipendenti da x con $q_i = k_i \frac{L_x}{2\pi}$, che assumono solo valori interi.

Il controllo più semplice da fare riguarda l'esponente di crescita lineare delle instabilità. Come visto, per perturbazioni sufficientemente piccole la crescita dei modi a grande scala è determinata univocamente dalla (3.39). È perciò noto il rate di crescita teorico per ogni k , che può essere confrontato con quello sperimentale

¹¹Per una descrizione particolareggiata del codice numerico utilizzato si veda l'appendice D.

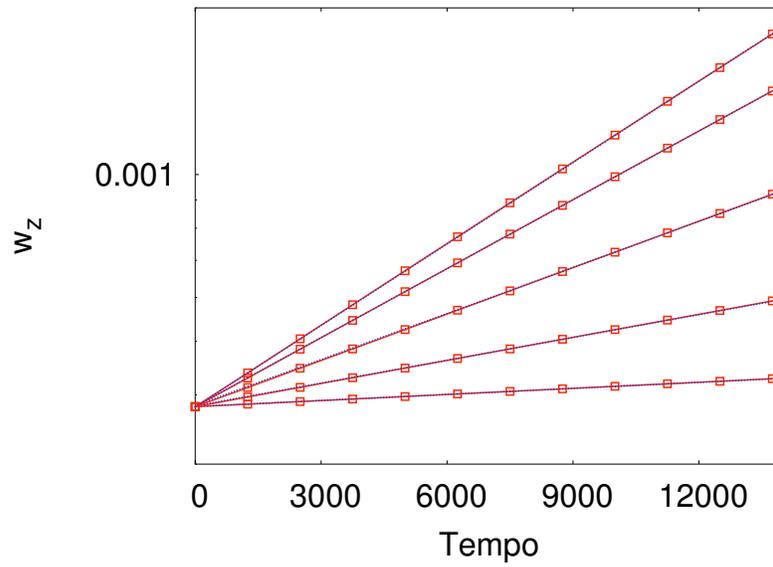


Figura 3.9: Crescita dei modi $q = 1, \dots, 5$ per $De = 1.4$, $\epsilon = 0.0975$. Nel regime lineare la crescita è chiaramente esponenziale.

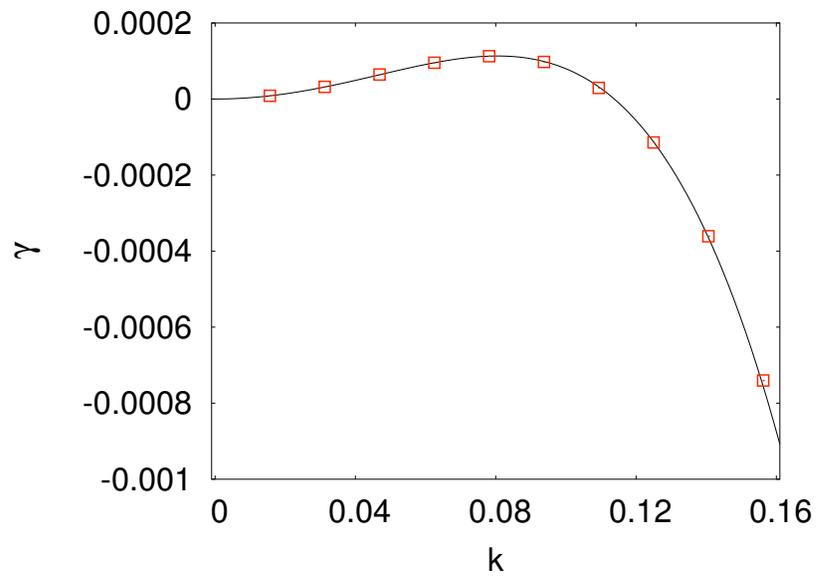


Figura 3.10: Rate di crescita dei modi trasversi k . I dati si riferiscono a una simulazione con $De = 1.4$, $\epsilon = 0.0975$. La curva continua rappresenta la previsione ottenuta attraverso l'analisi lineare a scale multiple (3.39).

(figura 3.10) dopo aver controllato che la crescita sia effettivamente esponenziale (figura 3.9).

Dopo aver controllato il range lineare possiamo portare avanti le simulazioni e verificare che la dinamica dei vari k sia ben rappresentata dalla dinamica Cahn-Hilliard. Ci aspettiamo quindi una crescita iniziale esponenziale per tutti i modi; il modo con la crescita massima sale poi fino ad essere saturato dal termine non lineare. L'energia viene quindi ceduta al modo seguente, che inizia a salire fino a raggiungere un'ampiezza tale da bilanciare i termini lineare e non lineare. La dinamica dovrebbe continuare così fino al raggiungimento dello stato finale con il numero d'onda minimo disponibile. Ho riportato i risultati di questa prova nella figura 3.11. Qualitativamente è chiaro che il risultato concorda con le osservazioni fin ora fatte.

Per controllare che il formalismo multiscale dia risultati anche quantitativamente

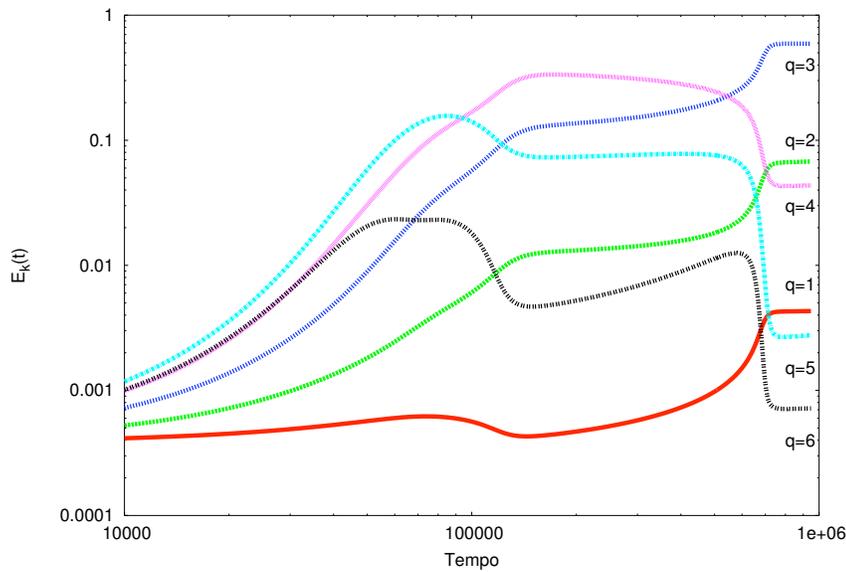


Figura 3.11: Evoluzione temporale dello spettro di energia per i primi modi trasversali. I dati si riferiscono a una simulazione diretta con $r = 1/64$, $De = 1.4$, $\epsilon = 0.0975$.

corretti possiamo confrontare i risultati delle simulazioni numeriche dirette con i risultati di una integrazione numerica della (3.35). Noto il valore dei parametri di flusso Re, De, η (per calcolare il valore dei coefficienti A, B, C) e la condizione iniziale¹² si è in grado di verificare l'accuratezza con cui le soluzioni teoriche multiscale predicono i risultati dell'integrazione diretta. Si confrontino a questo proposito le figure 3.11 e 3.12.

¹²La condizione iniziale è in questo caso la semplice media su z della condizione iniziale della simulazione diretta.

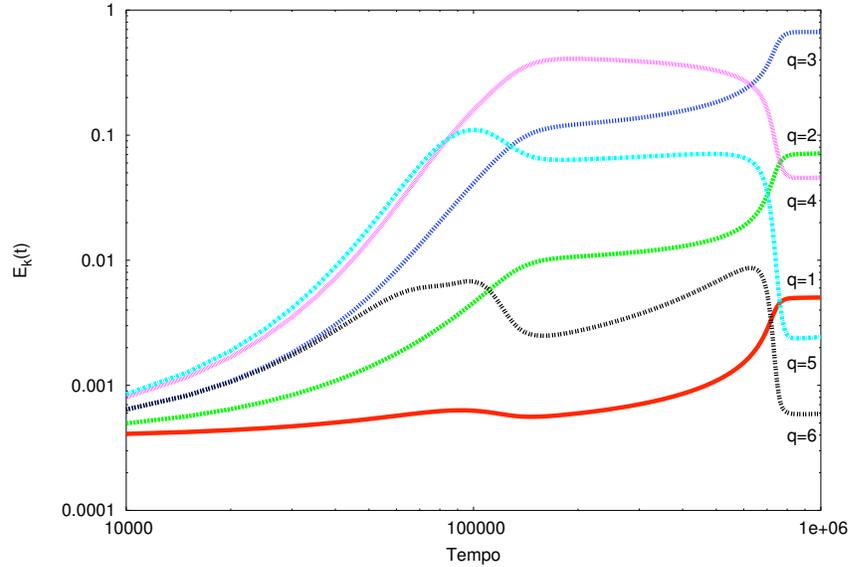


Figura 3.12: Evoluzione temporale dello spettro di energia per i primi modi trasversali. I dati si riferiscono a una simulazione dell'equazione di Cahn-Hilliard con $r = 1/64$, $De = 1.4$, $\epsilon = 0.0975$.

La grande importanza che l'equazione di Cahn-Hilliard riveste nel contesto dell'analisi numerica consiste nella sua semplicità. Una volta dimostrata la sostanziale bontà dei risultati ottenuti col metodo multiscala possiamo applicare i risultati così ottenuti allo studio delle proprietà dei flussi viscoelastici. È importante notare che la risoluzione numerica dell'equazione di Cahn-Hilliard è circa 130000 volte più veloce che la soluzione del sistema completo di equazioni per il flusso. Questo miglioramento non può essere spiegato con l'aver ridotto il numero di equazioni da integrare da quattro a una; molto più importante è l'essere passati dall'integrazione di un sistema con una dinamica non banale a tutte le scale a un'equazione dipendente dalle sole grandi scale. Qualunque equazione si voglia integrare, va usato un passo di integrazione temporale molto più piccolo della minima scala temporale in gioco nel sistema; il modello di Oldroyd ha dinamica sia a piccola che a grande scala e va perciò integrato con un passo temporale minore del tempo caratteristico della dinamica a piccola scala t . L'equazione di Cahn-Hilliard invece va integrata con passo più piccolo di T , il tempo caratteristico della dinamica a grande scala. Questo permette di scegliere passo temporale fino a quattro ordini di grandezza più grandi che nel caso delle simulazioni dirette. L'integrazione diretta del sistema non è perciò nella pratica in grado di dare risultati in tempi ragionevoli, mentre l'equazione di Cahn-Hilliard può essere utilizzata per studiare le proprietà del flusso anche su tempi molto lunghi.

I risultati di una simulazione diretta particolarmente lunga sono mostrati nella figura 3.13, insieme ai risultati di una simulazione Cahn-Hilliard. Sebbene l'integrazione numerica ottenuta dalle simulazioni numeriche dirette (DNS) sia stata eseguita per un tempo relativamente breve (corrispondente a 15 giorni di tempo macchina su un calcolatore ALPHA XP100 della Compaq), si può notare un ottimo accordo con i risultati ottenuti dall'integrazione numerica dell'equazione di Cahn-Hilliard. L'analisi multiscala compiuta in questo capitolo è quindi pienamente supportata dalle simulazioni; l'enorme semplificazione del sistema viscoelastico Oldroyd-B che si ottiene permette uno studio *analitico* del problema della drag reduction (che ho descritto nel capitolo 5).

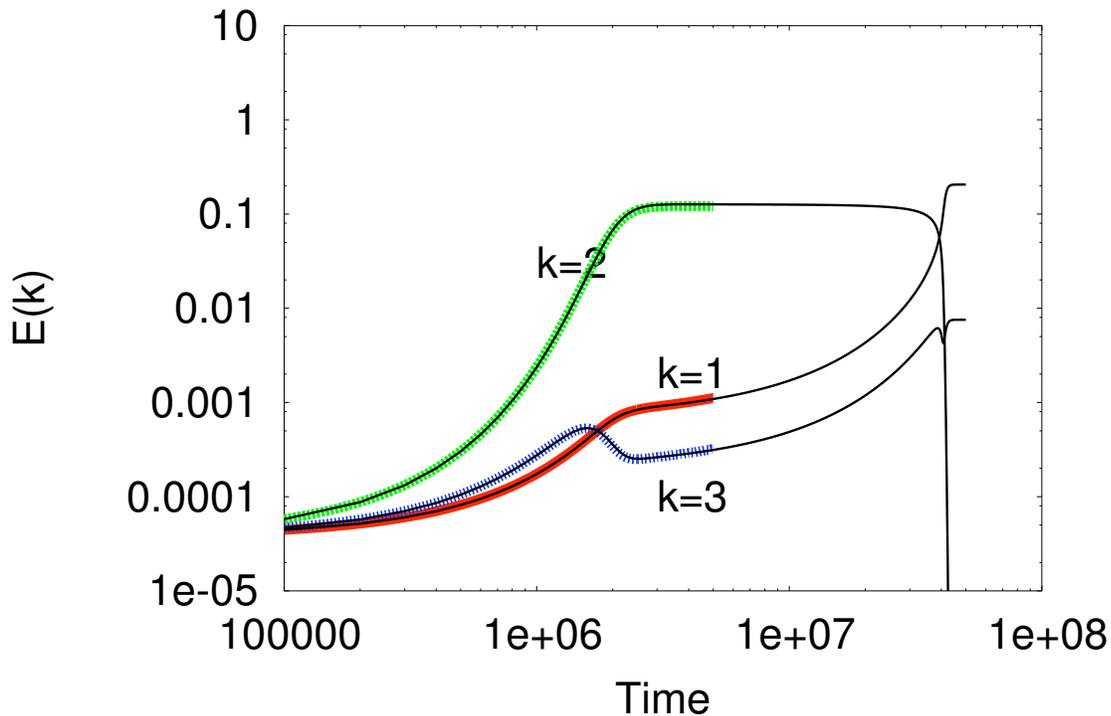


Figura 3.13: Evoluzione temporale dello spettro di energia per i primi modi trasversali. Le curve colorate rappresentano la dinamica dei modi $q = 1, 2, 3$ per una simulazione a $De = 1.4$ e $\epsilon = 0.04$. In nero sono riportate le curve ottenute con una simulazione Cahn-Hilliard con gli stessi parametri, condotta su tempi molto più lunghi fino al raggiungimento dello stato finale stabile.

Capitolo 4

L'equazione di Cahn-Hilliard generalizzata

Nel paragrafo 3.4.1 si è notato che esiste un valore del numero di Deborah (per $\eta = 0.3$ si ha $De^* \simeq 1.6246$) per cui il coefficiente del termine non lineare dell'equazione di Cahn-Hilliard cambia segno.¹ Tale termine da stabilizzante diventa instabilizzante, così come fa il termine lineare. La soluzione dell'equazione di Cahn-Hilliard diverge quindi nel tempo, cosa non fisicamente accettabile in quanto sappiamo che la soluzione del problema viscoelastico è sempre finita. La risoluzione dell'apparente paradosso è da ricercarsi nel fatto che un nuovo termine non lineare entrerà in gioco per stabilizzare la crescita (lineare e non lineare) della perturbazione.

In questo capitolo mostro i calcoli che ho compiuto cercando una generalizzazione dell'equazione di Cahn-Hilliard che permettesse l'estensione della sua validità anche nell'intorno del punto critico De^* . L'ipotesi che in questo caso si debba considerare un termine non lineare di grado superiore comporta la scelta di uno scaling differente per i campi perturbazione. Nell'intorno di De^* cambiano segno sia il coefficiente del termine lineare A che quello del termine non lineare B . Al variare del segno dei coefficienti si individuano quattro situazioni di interesse: $A > 0$ e $B > 0$, $A > 0$ e $B < 0$, $A < 0$ e $B > 0$ (il nuovo coefficiente non lineare è considerato sempre stabilizzante), più una zona completamente stabile. Mi concentrerò in particolare modo sul primo caso, in cui entrambi i coefficienti sono instabilizzanti, e sul terzo. Quest'ultimo è di particolare interesse perché apre la strada alla spiegazione di un fenomeno dai meccanismi ancora sconosciuti: le *extrusions*. Il metodo multiscale può venire applicato a tutti questi casi per giungere all'espressione esplicita dell'equazione di Cahn-Hilliard generalizzata.

	I	II	III	IV
A	+	-	-	+
B	+	+	-	/
C	+	/	/	+
D	+	+	+	+

Tabella 4.1: I segni dei coefficienti nelle diverse zone dello spazio delle fasi.

¹A questo valore corrisponde naturalmente un valore critico della viscosità sopra il quale il sistema è linearmente stabile. Chiamerò nel prosieguo questo valore ν^* . A esso corrisponde un

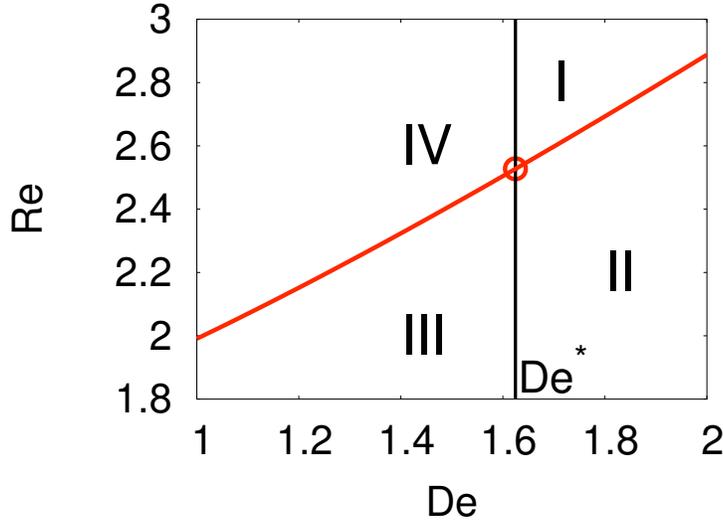


Figura 4.1: La suddivisione nelle quattro zone intorno al punto critico P^* .

4.1 Generalità del problema

Esiste, come visto, una zona nello spazio dei parametri $(\mathcal{R}e, \mathcal{D}e)$ in cui sia il termine lineare $A \partial^2 w$ che quello non lineare $B \partial^2 w^3$ hanno carattere instabilizzante. In queste condizioni la perturbazione trasversale tenderebbe a crescere indefinitamente. Si può quindi ipotizzare che la perturbazione raggiunga col tempo un'ampiezza tale da far intervenire termini non lineari di grado superiore; se il loro effetto fosse stabilizzante avremmo ottenuto la generalizzazione dell'equazione di Cahn-Hilliard cercata.

L'analisi compiuta nel paragrafo 3.3 ha mostrato che il primo termine non lineare che poteva essere preso in considerazione, $\mathbf{w} \cdot \partial \mathbf{w}$, non poteva influire sulla dinamica della perturbazione. Similmente, le simmetrie del flusso portano alla scomparsa di un eventuale termine del tipo $\partial(w^2 \mathbf{w} \cdot \partial \mathbf{w})$.² Bisogna quindi considerare la non linearità all'ordine successivo: $\partial(w^4 \partial w)$.

Si sta dunque cercando un'equazione della forma

$$\partial_T w = A \partial_X^2 w + B \partial_X(w^2 \partial_X w) + C \partial_X^4 w + D \partial_X(w^4 \partial_X w) \quad . \quad (4.1)$$

Al variare dei parametri $\mathcal{D}e$ e ν i coefficienti A e B cambieranno segno; a queste diverse situazioni corrisponderanno diverse scelte dello scaling dei campi perturbazione.

valore critico del numero di Reynolds $\mathcal{R}e^* \simeq 2.5277$.

²Si ricordi che sono necessari due operatori di derivazione, uno necessario alla conservazione della quantità di moto e uno in grado di conservare la parità del campo.

4.2 Il caso sopra soglia

Riferiamoci a condizioni debolmente non lineari, in cui la viscosità è appena inferiore alla viscosità critica e in cui il numero di Deborah è appena superiore al numero di Deborah critico $\mathcal{D}e^*$. Per costruzione i parametri A e B sono nulli al primo ordine:

$$\begin{aligned} A &= A_{crit} + \left. \frac{\partial A}{\partial \mathcal{D}e} \right|_{P^*} (\mathcal{D}e - \mathcal{D}e^*) + \left. \frac{\partial A}{\partial \nu} \right|_{P^*} (\nu - \nu^*) \\ &= \left. \frac{\partial A}{\partial \mathcal{D}e} \right|_{P^*} (\mathcal{D}e - \mathcal{D}e^*) + \left. \frac{\partial A}{\partial \nu} \right|_{P^*} (\nu - \nu^*) \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} B &= B_{crit} + \left. \frac{\partial B}{\partial \mathcal{D}e} \right|_{P^*} (\mathcal{D}e - \mathcal{D}e^*) + \left. \frac{\partial B}{\partial \nu} \right|_{P^*} (\nu - \nu^*) \\ &= \left. \frac{\partial B}{\partial \mathcal{D}e} \right|_{P^*} (\mathcal{D}e - \mathcal{D}e^*) + \left. \frac{\partial B}{\partial \nu} \right|_{P^*} (\nu - \nu^*) \quad , \end{aligned} \quad (4.3)$$

avendo indicato con P^* il punto critico $(\mathcal{D}e^*, \nu^*)$. Potremo quindi scrivere³

$$\nu = \nu_c (1 - x\epsilon_\nu) \quad (4.4)$$

$$\mathcal{D}e = \mathcal{D}e^* (1 + \epsilon_{\mathcal{D}e}) \quad . \quad (4.5)$$

Perché la dinamica sia regolata da un'equazione del tipo (4.1) dobbiamo imporre che tutti i termini siano confrontabili all'ordine perturbativo dominante. Bisogna quindi capire quale sia la relazione tra il rapporto di scala $\epsilon = \frac{X}{x}$, lo scaling dell'espansione per il campo di velocità ϵ_w e i parametri $\epsilon_\nu, \epsilon_{\mathcal{D}e}$ che descrivono nel piano $(\mathcal{D}e, \nu)$ la distanza del punto considerato dal punto critico $(\mathcal{D}e^*, \nu^*)$.

Gli scaling devono essere tali da rendere confrontabili al primo ordine perturbativo tutti i termini. Dal confronto tra il termine proporzionale a D e il termine proporzionale a C si ottiene:

$$D \epsilon^2 \epsilon_w^5 \sim C \epsilon^4 \epsilon_w \Rightarrow \epsilon_w = \epsilon^{1/2} \quad . \quad (4.6)$$

Il confronto tra i restanti termini è il più delicato, perché porta tutte le informazioni su $\epsilon_{\mathcal{D}e}$ e ϵ_ν . In particolare, tenendo conto delle relazioni (4.4-4.5-4.6):

$$D \epsilon^2 \epsilon^{5/2} \sim \left[\left. \frac{\partial A}{\partial \mathcal{D}e} \right|_{P^*} (\epsilon_{\mathcal{D}e} \mathcal{D}e^*) - \left. \frac{\partial A}{\partial \nu} \right|_{P^*} (x\epsilon_\nu \nu^*) \right] \epsilon^2 \epsilon^{1/2} \quad (4.7)$$

$$D \epsilon^2 \epsilon^{5/2} \sim \left[\left. \frac{\partial B}{\partial \mathcal{D}e} \right|_{P^*} (\epsilon_{\mathcal{D}e} \mathcal{D}e^*) - \left. \frac{\partial B}{\partial \nu} \right|_{P^*} (x\epsilon_\nu \nu^*) \right] \epsilon^2 \epsilon^{3/2} \quad (4.8)$$

La scelta $\epsilon_\nu = \epsilon_{\mathcal{D}e} = \epsilon^2$ permetterebbe il bilanciamento della (4.7), ma renderebbe impossibile quello della (4.8). La soluzione si basa su un'opportuna scelta del parametro x . Se infatti si sceglie di soddisfare la (4.8) e si pone $\epsilon_\nu = \epsilon_{\mathcal{D}e} = \epsilon$, x può

³Vogliamo muoverci lungo una curva sul piano $(\nu, \mathcal{D}e)$, utilizzando ϵ come parametro libero. Il valore del coefficiente x fisserà la pendenza iniziale di questa curva.

essere scelto tale da annullare il coefficiente $[\frac{\partial A}{\partial \mathcal{D}e} \Big|_{P^*} \mathcal{D}e^* + \frac{\partial A}{\partial \nu} \Big|_{P^*} x\nu_c]$. In questo modo A è dominato dal *secondo* ordine dell'espansione in $(\mathcal{D}e, \nu)$, proporzionale a ϵ^2 , che può quindi bilanciare la (4.7). Perché questo succeda deve essere:

$$0 = \left[\frac{\partial A}{\partial \mathcal{D}e} \Big|_{P^*} \mathcal{D}e^* - \frac{\partial A}{\partial \nu} \Big|_{P^*} x\nu^* \right] \Rightarrow$$

$$x = \frac{\frac{\partial A}{\partial \mathcal{D}e} \mathcal{D}e^*}{\frac{\partial A}{\partial \nu} \nu^*} \Big|_{P^*} \quad (4.9)$$

L'interpretazione geometrica di questa scelta è chiara: in P^* la derivata prima della curva descritta dalle (4.4)-(4.5) è uguale alla derivata della curva $A = 0$.

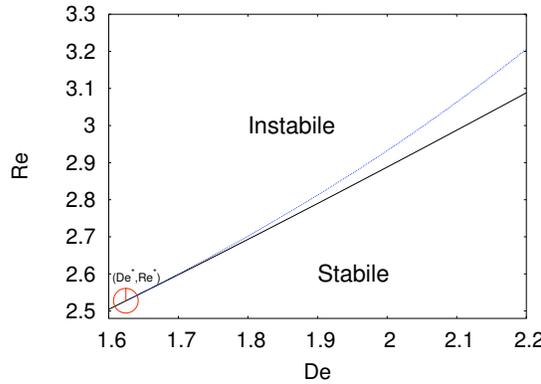


Figura 4.2: La scelta (4.9) impone che le derivate prime delle curve (4.4)-(4.5) e $A = 0$ siano uguali.

Lo scaling dell'operatore di derivata temporale e delle espansioni dei campi di perturbazione di polimeri e pressione sono determinati similmente a quanto fatto nel paragrafo 3.3 e sono rispettivamente $\epsilon^4, \epsilon^{1/2}, \epsilon^{1/2}$.

4.2.1 Soluzione multiscale nel caso $\mathcal{D}e > \mathcal{D}e^*$

La soluzione del sistema (3.1)-(3.2) in questo contesto viene cercata in modo molto simile a quello descritto nel paragrafo 3.3.1. La differenza più evidente è il diverso scaling dei campi di perturbazione; dobbiamo nuovamente raggiungere la soluzione dell'ordine ϵ^4 , ma questa volta considerando anche gli ordini $\epsilon^{1/2}, \epsilon^{3/2}, \epsilon^{5/2}, \epsilon^{7/2}$. L'imposizione della condizione di risolubilità all'ordine $\epsilon^{9/2}$ porta a un'equazione chiusa per la dinamica del campo di velocità trasversa $w_z^{(1/2)}(X, T)$.

I calcoli sono, come nel caso precedente, lunghi e complessi. Per le soluzioni dei primi ordini perturbativi si veda l'appendice C, in cui mostro che il metodo risolutivo descritto nel paragrafo 3.3.1 può ancora essere applicato con successo. Le

poche differenze che emergono riguardano soprattutto il campo di pressione: esso è fissato dalle condizioni di risolubilità ai soli ordini $\epsilon^{2/2}$, $\epsilon^{4/2}$, $\epsilon^{6/2}$, $\epsilon^{8/2}$.

Il risultato finale è l'equazione della dinamica del campo trasverso, che in variabili multiscala ha la forma:

$$\begin{aligned} \tilde{\partial}_t \langle w_z^{(1/2)} \rangle = \tilde{\partial}_x \left[\left(-A - B' \langle w_z^{(1/2)} \rangle^2 \right. \right. \\ \left. \left. + D \langle w_z^{(1/2)} \rangle^4 \right) \tilde{\partial}_x \langle w_z^{(1/2)} \rangle \right] - C \tilde{\partial}_x^4 \langle w_z^{(1/2)} \rangle \quad . \quad (4.10) \end{aligned}$$

Per punti appartenenti alla curva descritta dalle (4.4)-(4.5) (e per ϵ piccoli a sufficienza) il valore esplicito dei coefficienti ottenuto dal conto multiscala è:

$$\left\{ \begin{array}{l} A = 0.5106 \\ B' = 8.979 \\ C = 0.9439 \\ D = -23.11 \\ x = 0.5974 \end{array} \right. \quad . \quad (4.11)$$

Dato un punto nello spazio delle fasi nell'intorno del punto critico, i coefficienti A , B e C calcolati attraverso l'analisi multiscala nel caso generalizzato assumono lo stesso valore che risultava dalla soluzione dell'equazione di Cahn-Hilliard. Questo conferma l'ipotesi che il passaggio da un regime all'altro è "liscio" e che l'andamento dei coefficienti non presenti discontinuità.

4.3 Il caso $De < De^*$

Lo studio compiuto nel precedente paragrafo mi ha permesso di studiare la dinamica del sistema viscoelastico in studio per valori del numero di Deborah appena superiori al valore critico per cui il coefficiente B cambia segno. Una soluzione simile deve però esistere anche per B positivi e molto piccoli. In questo caso il coefficiente è talmente piccolo che la stabilità del sistema è dovuta unicamente al termine proporzionale a w^5 .

La ricerca degli scaling per la soluzione di questo problema si basa sull'assunto che il termine dipendente dal coefficiente B sia sottodominante rispetto agli altri. Andranno quindi confrontati i restanti termini:

$$\begin{aligned} A \partial^2 w &\sim C \partial^4 w \\ A \partial^2 w &\sim D \partial^2 w^5 \quad . \end{aligned}$$

Con la notazione usata nel paragrafo precedente:

$$\left[\frac{\partial A}{\partial De} \Big|_{P^*} (De - De^*) + \frac{\partial A}{\partial \nu} \Big|_{P^*} (\nu - \nu^*) \right] \epsilon^2 \epsilon_w \sim \epsilon^4 \epsilon_w \quad (4.12)$$

$$\left[\frac{\partial A}{\partial De} \Big|_{P^*} (De - De^*) + \frac{\partial A}{\partial \nu} \Big|_{P^*} (\nu - \nu^*) \right] \epsilon^2 \epsilon_w \sim \epsilon^2 \epsilon_w^5 \quad . \quad (4.13)$$

La (4.12) impone $(De - De^*) \sim (\nu - \nu^*) \sim \epsilon^2$. Si possono quindi espandere il numero di Deborah e la viscosità:

$$\begin{aligned} De &= De^*(1 - \epsilon^2) \\ \nu &= \nu^*(1 - \epsilon^2) \end{aligned}$$

I segni, così scelti, identificano la corretta zona di piano: il sistema è linearmente instabile ed entrambe le nonlinearità sono stabilizzanti

La (4.13) impone lo scaling per la perturbazione del campo di velocità: $\epsilon_w = \epsilon^{1/2}$. Similmente al caso precedente sono determinati gli scaling per la derivata temporale ($\partial_t \rightarrow \epsilon^4 \partial_T$) e per la perturbazione del campo di pressione e delle componenti del tensore di conformazione dei polimeri (uguali a ϵ_w).

Rimane da verificare che il termine non lineare di ordine minimo sia sottodominante rispetto agli altri. Perchè ciò sia vero deve essere:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(C\partial^4 w) &< \mathcal{O}(B\partial^2 w^3) \\ \Rightarrow \mathcal{O}(\epsilon^{9/2}) &< \mathcal{O}(\epsilon^{11/2}) \end{aligned}$$

La condizione è chiaramente soddisfatta e la scelta degli scaling è dunque corretta. Il metodo multiscale può essere applicato similmente a quanto fatto precedentemente. Non riporto i calcoli per brevità; il risultato è una dinamica regolata da un'equazione di tipo Cahn-Hilliard generalizzato (equazione (4.10)), senza il termine $B \tilde{\partial}_x^2 \langle w_z^{(1/2)} \rangle^3$. Il valore dei coefficienti A, C, D è invece lo stesso calcolato nel paragrafo precedente.

4.4 Extrusions: il caso sotto soglia per $De > De^*$

Alcune fibre polimeriche sono prodotte forzando il passaggio di una soluzione di polimeri attraverso un foro cilindrico [23]; tale processo è detto *extrusion*. La velocità di produzione in qualunque processo di extrusion di plastiche è limitata dalla formazione di ondulazioni a grande scala della superficie del filato. Tale fenomeno può anche condurre alla rottura del filato ed è per questo chiamato *melt fracture*.

La presenza di irregolarità di questo genere può in alcuni casi essere ricondotta a condizione non uniformi del foro o del tubo che genera il filato. Recenti studi hanno però mostrato sperimentalmente la presenza di irregolarità *intrinseche* ai fluidi viscoelastici. È noto da molto tempo che il modello Oldroyd-B descrive fluidi con flussi

di Poiseuille linearmente stabili [25]. Si pensava che tali irregolarità fossero dunque dovute a particolari condizioni al contorno. È invece stato proposto recentemente un modello in grado di mostrare che tali flussi possiedono almeno una instabilità intrinseca [23, 24].

Lo studio da me condotto mostra la presenza di tali instabilità non lineari anche nel caso del flusso di Kolmogorov. Questo fatto supporta l'evidenza dell'esistenza di instabilità elastiche intrinseche alle soluzioni polimeriche anche in casi linearmente stabili; in più, questo risultato pone le basi per lo studio della *dinamica* di tali fenomeni, problema che non era ancora stato studiato.

4.4.1 Lo scaling nel caso linearmente stabile

L'equazione di Cahn-Hilliard generalizzata nel caso linearmente stabile presenta importanti differenze dai casi precedentemente trattati. La più evidente è la mancanza del termine $-C\tilde{\partial}_x^4\langle w_z \rangle$. Se infatti il termine $A\tilde{\partial}_x^2\langle w_z \rangle$ ha effetto stabilizzante, è facile aspettarsi che alle grandi scale (piccoli numeri d'onda) sia esso quello dominante.⁴

In regime non lineare la dinamica del sistema sarà determinata dai termini B e D . Al primo ordine dello sviluppo perturbativo essi dovranno perciò essere comparabili. Poiché si stanno studiando le vicinanze del punto critico $(\mathcal{D}e^*, \nu^*)$ i coefficienti A e B sono al primo ordine nulli. Si scrive perciò nuovamente:

$$A = \left. \frac{\partial A}{\partial \mathcal{D}e} \right|_{P^*} (\mathcal{D}e - \mathcal{D}e^*) + \left. \frac{\partial A}{\partial \nu} \right|_{P^*} (\nu - \nu^*) \quad (4.14)$$

$$B = \left. \frac{\partial B}{\partial \mathcal{D}e} \right|_{P^*} (\mathcal{D}e - \mathcal{D}e^*) + \left. \frac{\partial B}{\partial \nu} \right|_{P^*} (\nu - \nu^*) \quad . \quad (4.15)$$

Bilanciando i tre termini A , B e D , similmente a quanto fatto precedentemente, si ottiene:

$$\epsilon_w^2 \sim \left[\left. \frac{\partial B}{\partial \mathcal{D}e} \right|_{P^*} (\mathcal{D}e - \mathcal{D}e^*) - \left. \frac{\partial B}{\partial \nu} \right|_{P^*} (\nu - \nu^*) \right] \quad (4.16)$$

$$\epsilon_w^4 \sim \left[\left. \frac{\partial A}{\partial \mathcal{D}e} \right|_{P^*} (\mathcal{D}e - \mathcal{D}e^*) - \left. \frac{\partial A}{\partial \nu} \right|_{P^*} (\nu - \nu^*) \right] \quad . \quad (4.17)$$

Nel paragrafo 4.2 ho fatto notare che la scelta (4.4,4.5) permetteva di scegliere una curva sul piano $(\mathcal{D}e, \nu)$ nella porzione linearmente instabile. Per analizzare la zona a numeri di Reynolds inferiori alla curva di stabilità ho ipotizzato:

$$\nu = \nu_c (1 + x\epsilon_\nu + y\epsilon_\nu^2) \quad (4.18)$$

$$\mathcal{D}e = \mathcal{D}e^* (1 + \epsilon_{\mathcal{D}e}) \quad . \quad (4.19)$$

⁴Il termine D possiede due derivate aggiuntive; operata una trasformazione di Fourier questo termine viene quindi moltiplicato per k^2 .

L'introduzione del parametro y , opportunamente scelto, permette di investigare la corretta zona di piano (linearmente stabile). Il bilanciamento delle (4.16-4.17) è possibile rendendo nulla l'espansione al primo ordine del coefficiente A , esattamente come fatto nel paragrafo 4.2. Si pone quindi nuovamente

$$x = \left. \frac{\frac{\partial A}{\partial De} De^*}{\frac{\partial A}{\partial \nu} \nu^*} \right|_{P^*} .$$

Va ora scelto y in modo che il segno del termine lineare sia *stabilizzante*. Poiché il primo ordine è per costruzione nullo deve essere (intendendo tutte le derivate calcolate in P^*):

$$\begin{aligned} A &\simeq \frac{\partial^2 A}{\partial De^2} De^{*2} + \frac{\partial^2 A}{\partial \nu^2} x^2 \nu^{*2} + 2 \frac{\partial^2 A}{\partial De \partial \nu} De^* x \nu^* + \frac{\partial A}{\partial \nu} y \nu^* > 0 \\ &\Rightarrow y > 0.2241 . \end{aligned}$$

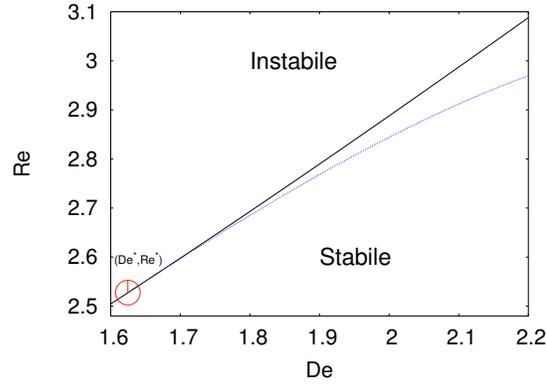


Figura 4.3: Scegliendo y superiore al valore critico 0.2241 si investiga la zona di piano linearmente stabile. In figura è riportata la curva che si segue scegliendo $y = 0.5$.

Rimane da controllare che il termine lineare dipendente da C sia sottodominante rispetto a tutti gli altri. Deve cioè essere:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(C \partial^4 w) &> \mathcal{O}(D \partial^2 w^5) \\ &\Rightarrow \mathcal{O}(\epsilon^2) > \mathcal{O}(\epsilon_w^4) . \end{aligned}$$

Perché questa condizione sia soddisfatta ho scelto $\epsilon_w = \epsilon^{1/3}$. Questo permette di minimizzare il numero di ordini che è necessario risolvere perché appaia l'equazione della dinamica.

Sono a questo punto determinati anche gli scaling per la derivata temporale ($\partial_t \rightarrow \epsilon^{11/3} \partial_T$) e per i campi perturbazione (sempre uguali a ϵ_w).

Il formalismo multiscala può ora essere applicato con successo alle extrusions. La dinamica è regolata dall'equazione di Cahn-Hilliard generalizzata (4.10), in cui viene trascurato il termine $C \tilde{\partial}_x^4 \langle w_z \rangle$.

4.5 La dinamica dell'equazione generalizzata

Parte di ciò che sappiamo della dinamica dell'equazione di Cahn-Hilliard, analizzata nel paragrafo 3.4, può essere esteso alla nuova equazione. In particolare si trova facilmente la formulazione variazionale:

$$\begin{aligned} \tilde{\partial}_T w(X, T) &= \tilde{\partial}_X^2 \frac{\delta F[w]}{\delta w} \\ F[w] &\equiv \int dx \left[\frac{1}{30} D w^6 + \frac{1}{12} B w^4 - \frac{1}{2} A w^2 + \frac{1}{2} C (\tilde{\partial}_X w)^2 \right] . \end{aligned}$$

Nuovamente, l'esistenza di tale funzionale implica l'esistenza di uno stato asintotico a cui il sistema tende. Quale sia la forma di tale stato può essere ricavato con ragionamenti simili a quelli fatti nel capitolo 3. Bisogna in questo caso definire $I = -\frac{A}{2} w^2 + \frac{B}{12} w^4 - \frac{D}{30} w^6$. Deve essere:

$$\frac{\delta F}{\delta w} = \frac{\delta}{\delta w} \int dx \left[I + \frac{C}{2} (\tilde{\partial}_X w)^2 \right] = I'(w) - C \tilde{\partial}_X^2 w = 0 \Rightarrow I'(w) = C \tilde{\partial}_X^2 w$$

La $I(w)$ è una funzione di w , a sua volta funzione di X . Si può quindi scrivere nuovamente:

$$\tilde{\partial}_X I = \frac{\tilde{\partial} I}{\tilde{\partial} w} \frac{\tilde{\partial} w}{\tilde{\partial} X} = C \tilde{\partial}_X^2 w \frac{\tilde{\partial} w}{\tilde{\partial} X} = \frac{C}{2} \tilde{\partial}_X (\tilde{\partial}_X w)^2 \Rightarrow I = \frac{C}{2} (\tilde{\partial}_X w)^2 + \text{const} .$$

Si può ottenere la soluzione analitica dell'equazione differenziale risultante, a patto di imporre un valore definito alle costanti A, B, C, D . Non riporto la forma esplicita perché poco indicativa. Lo stato asintotico è descritto da funzioni che ho chiamato *kink generalizzati*, la cui forma è simile ai kink descritti nel capitolo 3, ma con un'inclinazione più pronunciata; si veda a questo proposito la figura 4.4, in cui ho riportato un kink generalizzato e un kink "standard".

Lo studio condotto in questo capitolo mostra l'estensione dei risultati del capitolo 3 a numeri di Deborah superiori al valore critico $\mathcal{D}e^*$. L'applicazione del metodo multiscale permette lo studio analitico delle equazioni della dinamica e delle soluzioni asintotiche del sistema nei differenti regimi che si trovano nell'intorno del punto critico $(\mathcal{D}e^*, \mathcal{R}e^*)$.

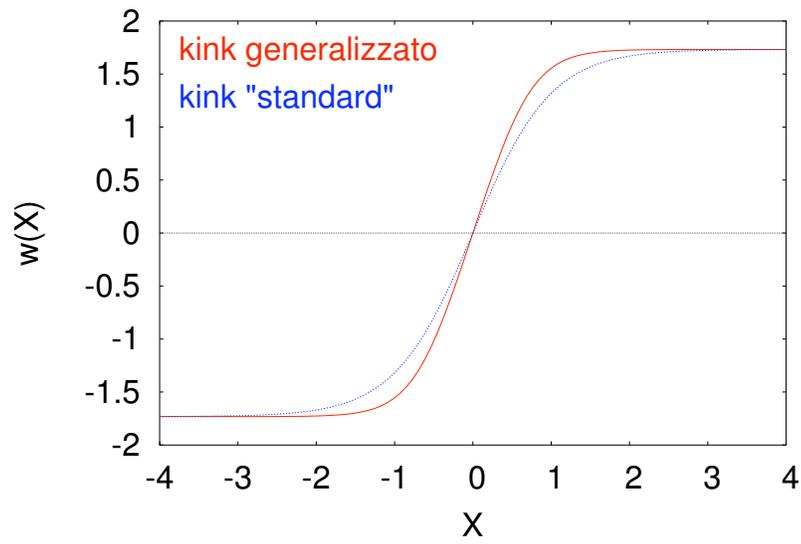


Figura 4.4: Per $A = B = 1$, $C = 1/2$ e $D = 10/9$ i due kink (generalizzato e non) hanno la stessa altezza.

Capitolo 5

La drag reduction

È noto da almeno cinquant'anni che l'aggiunta di polimeri a un fluido che scorre in un canale permette di ridurre la differenza di pressione necessaria a mantenere costante il flusso (o alternativamente permette di aumentare il flusso, tenendo costante la differenza di pressione). Questo fatto, evidentemente importante anche dal punto di vista applicativo, non ha ancora trovato una spiegazione completamente convincente.

In questo capitolo mostro i risultati che ho ottenuto attraverso il modello sviluppato nei capitoli precedenti e mostro che, nel caso considerato, si evidenzia la presenza di drag reduction. Questo risultato indica che il fenomeno è dovuto alla sola natura viscoelastica del flusso e pone le basi per lo studio della drag reduction in flussi tridimensionali.

5.1 Fenomenologia

Un flusso viscoso che scorre in un canale, spinto da una forza esterna costante, raggiunge col tempo un flusso medio stazionario. Si definisce *coefficiente di drag* il rapporto tra l'energia fornita al sistema tramite la forzante e l'energia cinetica trasportata dal flusso. Esso caratterizza perciò la potenza che va fornita al flusso per mantenere costante il flusso. Per flussi laminari questo coefficiente è inversamente proporzionale al numero di Reynolds; all'aumentare della velocità, al raggiungimento dello stadio turbolento, esso cresce sostanzialmente e diventa approssimativamente indipendente dal numero di Reynolds.

Nel 1949 Toms scoprì che l'aggiunta di piccole quantità di polimeri (poche parti per milione in peso) a un fluido che scorre in un canale permette di ridurre (fino all'80%) la potenza che è necessario fornire per mantenere il flusso costante. Le potenzialità applicative del fenomeno hanno immediatamente spinto molti studiosi a cercarne una soddisfacente caratterizzazione. Se i dati a disposizione sono cresciuti velocemente, non altrettanto proficua è stata la ricerca di una teoria della drag reduction. I primi modelli proposti in questo senso sono stati il modello temporale

di Lumley [3] e il modello energetico di Tabor e De Gennes [7,8]. Sebbene si facesse sempre più chiara l'idea che il meccanismo fosse legato alle proprietà elastiche del soluto, si riconduceva il fenomeno all'inerazione tra i polimeri e strutture caratteristiche del canale (il profilo logaritmico di velocità) o a poco chiari meccanismi molecolari. In entrambi i casi, la soluzione andrebbe cercata in funzione delle particolari condizioni al contorno presenti in ciascun caso. Questo non solo renderebbe il fenomeno estremamente difficile da studiare, ma gli attribuirebbe anche caratteri così poco generali da fargli perdere molto del suo interesse. Ancora pochi anni fa si pensava che la drag reduction fosse legata all'interazione tra i polimeri e le strutture turbolente generate dal canale vicino alle pareti.

Una differente prospettiva per l'approccio al problema è stata data dall'osservazione di drag reduction in simulazioni numeriche di flussi turbolenti in canale di fluidi viscoelastici [26,27]. Questo tipo di simulazioni sono però talmente complesse già nel caso Newtoniano [28] da rendere di fatto impossibile lo studio della drag reduction.

Per semplificare lo studio delle proprietà dei flussi viscoelastici si è cercato di semplificare la geometria del problema investigando il flusso di Kolmogorov viscoelastico. Questa scelta presenta molti vantaggi:

- il flusso avviene in assenza di pareti e delle sue tipiche strutture
- può essere definito il coefficiente di drag similmente a quanto fatto nel caso del canale
- il flusso laminare si instabilizza a numeri di Reynolds molo bassi, semplificando lo studio numerico della fase turbolenta
- il profilo del flusso è semplicemente proporzionale alla forzante; esso è perciò molto meno strutturato che nel caso del flusso di canale

In particolare, l'assenza di pareti permette di semplificare notevolmente sia l'approccio sperimentale che quello teorico; la presenza di drag reduction in queste condizioni, inoltre, mostra come essa sia una proprietà intrinseca dei flussi viscoelastici e perciò estremamente generale.

Lo studio compiuto nei capitoli precedenti permette ora di studiare l'effettiva presenza di drag reduction nel flusso in condizioni di instabilità, all'inizio cioè dalla fase di turbolenza. I risultati ottenuti dall'applicazione del metodo multiscala permettono non solo la verifica della presenza di drag reduction per numeri di Reynolds appena superiori al numero di Reynolds critico, ma permettono anche uno studio a livello *analitico* della drag reduction. Essi forniscono inoltre uno strumento per lo studio del fenomeno in condizioni in cui non si può essere certi della validità dei risultati multiscala.

5.2 Risultati teorici

Un utile parametro per caratterizzare la drag reduction è, come visto, il coefficiente di drag f . Nel caso di flussi liberi la forma che esso assume è leggermente diversa da quella che si usa per descrivere flussi nei canali. Il coefficiente deve dipendere dai soli parametri di flusso F, L, U . L'analisi dimensionale permette di definire

$$f = \frac{FL}{U^2} \quad (5.1)$$

Per piccoli numeri di Reynolds (inferiori al numero di Reynolds critico per il dato valore del numero di Deborah) il flusso è laminare con velocità media $U = FL^2/\nu$. In questo caso il valore del coefficiente di drag è $f = \mathcal{R}e^{-1}$. Per numeri di Reynolds superiori a circa 50 il sistema è già in uno stato avanzato di turbolenza.

In generale la forma di U nel caso turbolento non è nota. Sono invece note le soluzioni asintotiche del campo di velocità per numeri di Reynolds poco superiori al valore critico, perché sono le equazione risolte per ottenere l'equazione di Cahn-Hilliard. I risultati che seguono sono validi perciò nel caso *non* generalizzato, per numeri di Deborah inferiori al valore critico $\mathcal{D}e^*$.

$$\begin{aligned} U_x = & U_x^{Kolm} + \frac{V(L^2 - \eta\nu\tau)}{\nu(1 + \eta)L} \sin\left(\frac{z}{L}\right) \langle w_z^{(1)} \rangle + \\ & + \left(-5\eta^2 \mathcal{D}e^2 - \mathcal{D}e\eta \sqrt{13\eta^2 \mathcal{D}e^2 + 16\eta + 8 + 8\eta^2 + 12\eta \mathcal{D}e^2} + \right. \\ & \left. -8\eta - 4 - 4\eta^2 - 4\eta \mathcal{D}e^2 \right) \left(V(2\eta + \eta^2 + 1) \right)^{-1} (\langle w_z^{(1)} \rangle)^2 \cos\left(\frac{z}{L}\right) + \\ & \frac{(\eta \mathcal{D}e^2 LV + \eta^2 \mathcal{D}e^2 LV)}{2V(2\eta + \eta^2 + 1)} \left(\frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \right) \sin\left(\frac{2z}{L}\right) \end{aligned} \quad (5.2)$$

Ho qui inteso con U_x^{Kolm} il flusso di Kolmogorov stazionario. Per studiare la presenza o meno di drag reduction dobbiamo studiare come viene modificato il flusso rispetto a quello stazionario generato dalla forzante. Mediamo perciò sulla periodicità della forzante e troviamo che tutti i termini proporzionali a $\sin(z/L)$ non danno effetti di drag reduction. La (5.2) mantiene perciò solo il termine proporzionale a $\cos(z/L)$, oltre al flusso base di Kolmogorov.

La dinamica della perturbazione trasversa $w_z^{(1)}$ è determinata, come visto, dall'equazione di Cahn-Hilliard.

$$\partial_t \langle w_z^{(1)} \rangle = -\partial_x^2 \langle w_z^{(1)} \rangle A\epsilon^2 + \frac{B}{3} \partial_x^2 \langle w_z^{(1)} \rangle^3 - C \partial_x^4 \langle w_z^{(1)} \rangle \quad (5.3)$$

Si cerca un'espressione per l'ampiezza della sua soluzione asintotica nel limite di piccoli numeri d'onda; asintoticamente la perturbazione avrà l'energia concentrata quasi unicamente sul modo con numero d'onda minimo; il termine dipendente dalla

derivata quarta è perciò trascurabile rispetto agli altri. Si può scrivere

$$0 = -\partial_x^2 \langle w_z^{(1)} \rangle A \epsilon^2 + \frac{B}{3} \partial_x^2 \langle w_z^{(1)} \rangle^3 \quad (5.4)$$

In termini di ampiezza della perturbazione possiamo allora dire

$$0 = -A \epsilon^2 + \frac{B}{3} \max(\langle w_z^{(1)} \rangle)^2 \quad (5.5)$$

Si può quindi stimare l'ampiezza della perturbazione $\langle w_z^{(1)} \rangle$ in $\sqrt{\frac{3\epsilon^2 A}{B}}$. Visto che le espressioni di A e B sono note, è possibile studiare la dipendenza dal numero di Deborah del flusso e verificare quindi la presenza di drag reduction.

Scelto un valore del numero di Reynolds superiore a $\sqrt{2}$ (perché il sistema sia instabile) ma minore di 2.5 (per rimanere sempre nella zona in cui è valida la (5.3)), il valore di ϵ è una funzione di De e di Re :

$$\epsilon^2 = 1 - \frac{3/2 De \eta + 1/2 \sqrt{13 De^2 \eta^2 + 16 \eta + 12 De^2 \eta + 8 \eta^2 + 8}}{(1 + \eta) Re} \quad (5.6)$$

Il coefficiente di drag può dunque essere valutato come

$$f = \frac{V^2}{Re U^2} = \frac{V^2}{Re (V + w_x^{(2)})^2} \quad (5.7)$$

Sostituendo nella (5.2) l'espressione per $\langle w_z^{(1)} \rangle$ si trova

$$\begin{aligned} w_x^{(2)} = & \left(-5 \eta^2 De^2 - De \eta \sqrt{13 \eta^2 De^2 + 16 \eta + 8 + 8 \eta^2 + 12 \eta De^2} + \right. \\ & \left. -8 \eta - 4 - 4 \eta^2 - 4 \eta De^2 \right) \left(V(2 \eta + \eta^2 + 1) \right)^{-1} \frac{3A}{B} \times \\ & \left(1 - \frac{3/2 De \eta + 1/2 \sqrt{13 De^2 \eta^2 + 16 \eta + 12 De^2 \eta + 8 \eta^2 + 8}}{(1 + \eta) Re} \right) \end{aligned} \quad (5.8)$$

Scelto quindi il valore di η (0.3) e il numero di Reynolds a cui effettuare il controllo (per esempio 2) possiamo graficare il valore del coefficiente di drag f al variare del numero di Deborah (figura 5.1).

5.3 Risultati numerici

Un modo per caratterizzare la presenza di drag reduction è lo studio del coefficiente di drag al variare del numero di Deborah e del numero di Reynolds. Sappiamo infatti che la dissipazione di energia aumenta con il numero di Reynolds; vogliamo mostrare che invece essa diminuisce con il numero di Deborah. Siamo sicuri di poter

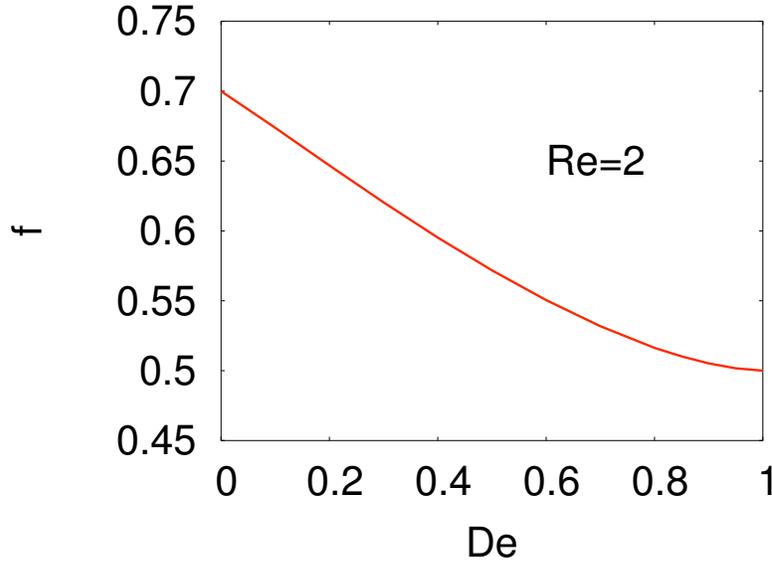


Figura 5.1: Il coefficiente di drag f a $\mathcal{R}e = 2$, $\eta = 0.3$. Si vede che il drag diminuisce fino a raggiungere il valore $1/\mathcal{R}e$ al raggiungimento della marginale di stabilità.

utilizzare l'equazione di Cahn-Hilliard solo quando vicini alla curva marginale di stabilità. Per questo motivo dobbiamo scegliere coppie di valori del numero di Deborah abbastanza¹ vicini e studiare l'andamento del coefficiente di drag all'aumentare del numero di Reynolds.

Come si vede nella figura 5.2, all'aumentare del numero di Reynolds il valore del coefficiente di drag aumenta, ma le curve corrispondenti a numeri di Deborah inferiori mostrano sempre coefficiente di drag più elevato: i fluidi viscoelastici studiati mostrano dunque effetti di drag reduction.

5.3.1 Simulazioni numeriche dirette

Il formalismo multiscala ha permesso di evidenziare la presenza di drag reduction in flussi viscoelastici in stati vicini alla curva di stabilità marginale. Ci si può chiedere se questo risultato sia un artefatto della scomposizione multiscala. La presenza di drag reduction nelle simulazioni dirette del sistema viscoelastico completo (3.1)-(3.2)

¹Il minimo valore della separazione di scala ϵ (e quindi di $\mathcal{R}e$) che possiamo scegliere è determinato dalla $k^2 A \epsilon^2 - k^4 C = 0$. Il minimo valore di k che riusciamo a rappresentare con la risoluzione scelta è $1/64$. Per ogni valore del numero di Deborah abbiamo dunque un valore minimo di ϵ sotto il quale non ci sono modi instabili. D'altro canto il numero di Reynolds non può discostarsi troppo dal valore critico, perché valga l'approssimazione multiscala. Questo restringe molto l'escursione che può avere ϵ . Questo si è tradotto nella scelta di coppie di valori di $\mathcal{D}e$ distanti pochi centesimi di unità l'uno dall'altro.

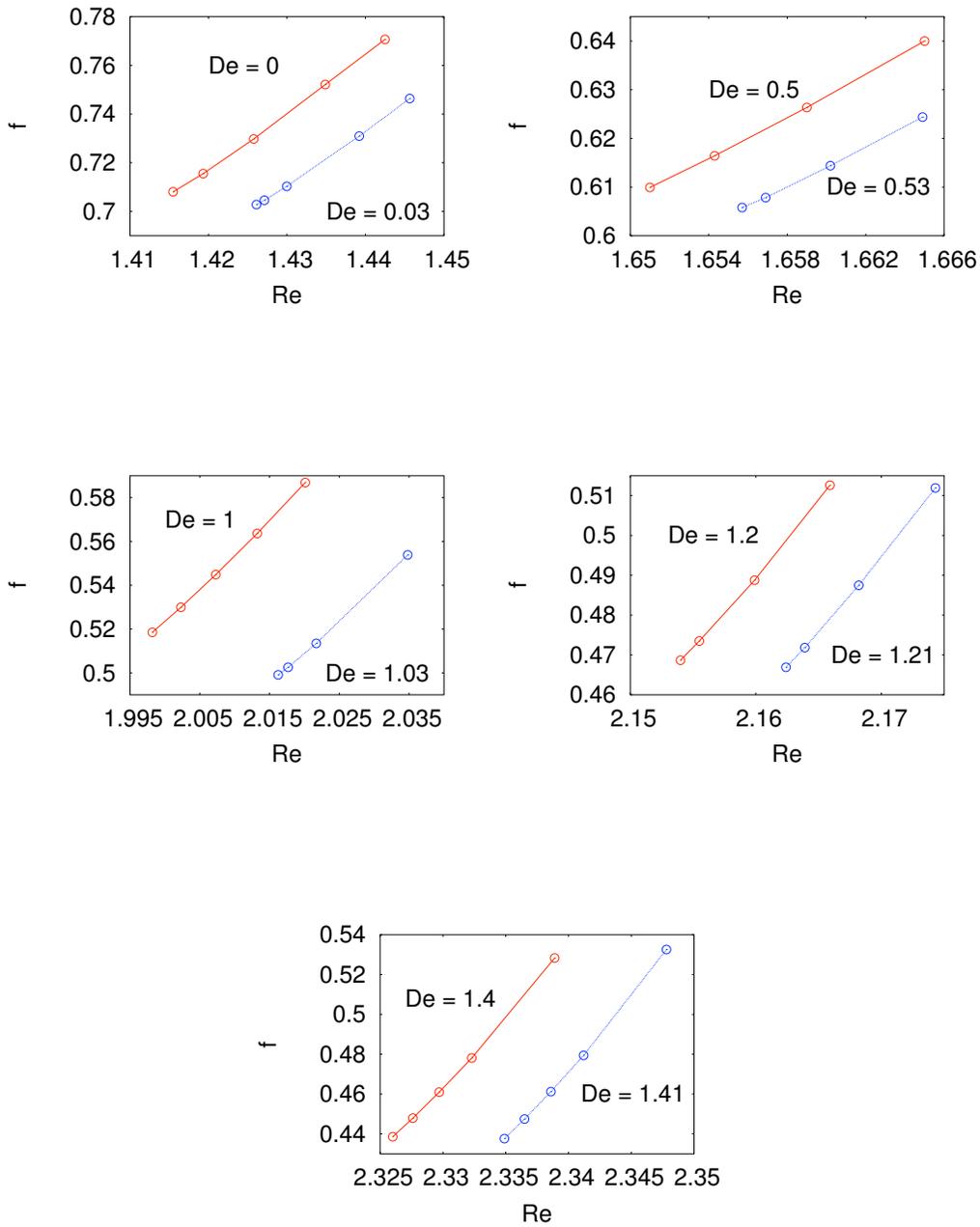


Figura 5.2: Il coefficiente di drag f in funzione del numero di Reynolds per alcuni valori del numero di Deborah. Poiché i risultati multiscala sono validi solo in prossimità della curva marginale di stabilità possono essere confrontate solo curve con De prossimi. Considerando numeri di Reynolds uguali, il coefficiente di drag decresce con De .

dimostra invece che il fenomeno è presente e che il modello di Oldroyd è in grado di coglierlo.

L'eccessiva lentezza delle simulazioni numeriche dirette complica lo studio delle soluzioni asintotiche per il flusso viscoelastico. Il raggiungimento dello stato finale della dinamica può nella pratica essere raggiunto solo per valori di ϵ estremamente piccoli, che però impediscono il confronto con altri flussi a valori del numero di Deborah superiori. Esiste tuttavia un metodo per sfruttare i risultati multiscala nelle simulazioni dirette. Uno dei risultati dell'analisi non lineare sono infatti le soluzioni asintotiche delle componenti della velocità. A priori queste espressioni valgono solo nell'intorno della marginale di stabilità; possiamo allora scegliere un punto nello spazio delle fasi sufficientemente vicino alla curva e cercarne la soluzione a grande scala grazie a una simulazione Cahn-Hilliard. Sfruttando questo e le soluzioni teoriche per il flusso possiamo costruire una stima dello stato asintotico in quel punto dello spazio delle fasi per il flusso bidimensionale. Ipoteticamente, utilizzando questo stato come condizione iniziale per la simulazione numerica in quel punto dello spazio delle fasi, ci si aspetta che lo stato sia pressoché stazionario. Questo è quello che in effetti succede. Si può quindi ipotizzare che la soluzione asintotica in un punto dello spazio delle fasi vicino a quello finora considerato sia simile allo stato precedentemente ottenuto. Le simulazioni confermano questa ipotesi: il tempo necessario a passare tra due stati asintotici relativi a coppie $(\mathcal{D}e, \mathcal{R}e)$ vicine è sufficientemente breve per permettere di studiare l'effettiva presenza di drag reduction.

Ho utilizzato questo metodo per raggiungere lo stato finale nel punto ($\mathcal{D}e = 1.4, \mathcal{R}e = 2.648$). Mantenendo costante il numero di Reynolds ho così potuto aumentare il numero di Deborah fino al valore massimo di $\mathcal{D}e = 1.74$. Attraverso la definizione (5.1) e la misura diretta dell'ampiezza U del flusso si può verificare che il coefficiente di drag effettivamente diminuisce all'aumentare del numero di Deborah (figura 5.3).

Lo studio che ho condotto ha quindi evidenziato la presenza di drag reduction nel modello multiscala-Oldroyd per quanto riguarda la zona debolmente instabile. In tale zona ho anche ricavato e risolto le equazioni della dinamica. Inoltre, i risultati multiscala mi hanno permesso di mostrare l'effetto drag reduction dovuto alla controreazione dei polimeri sul flusso nel modello Oldroyd-B in un qualunque punto dello spazio delle fasi.

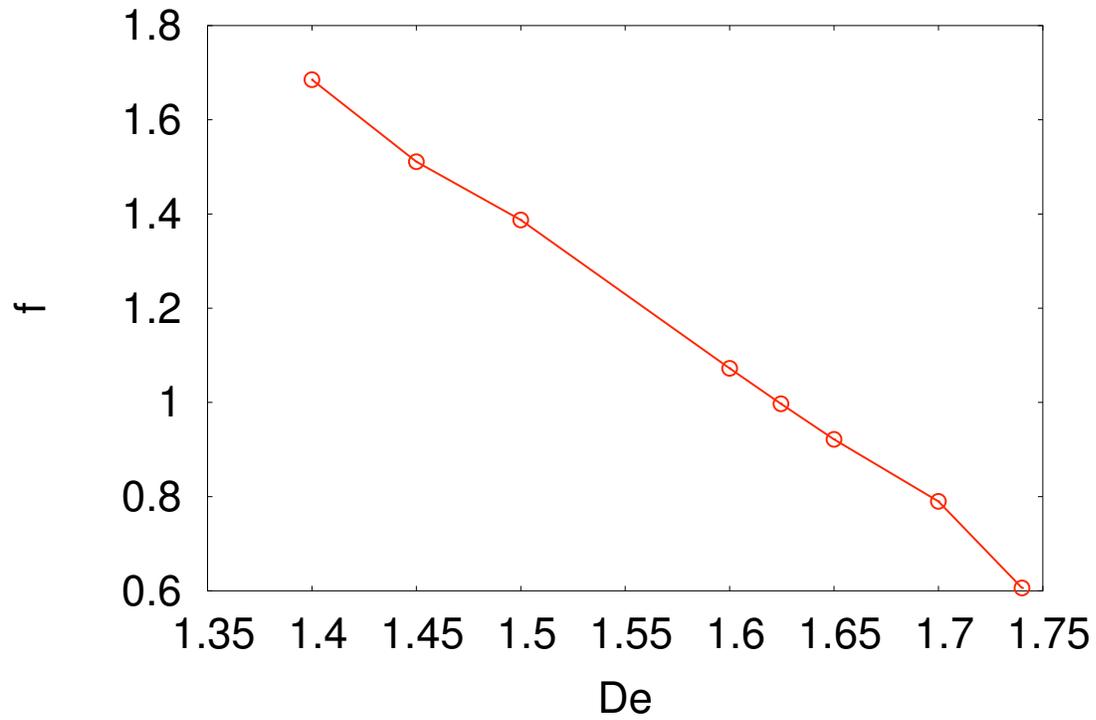


Figura 5.3: Il coefficiente di drag f per $Re = 2.648$. L'errore sui punti è dell'ordine di grandezza dello spessore dei simboli.

Conclusioni

Da ormai più di cinquant'anni è noto che l'aggiunta di polimeri a flussi turbolenti che scorrono in un canale permette la riduzione della differenza di pressione necessaria a mantenere costante il flusso. Le possibili applicazioni di questo fenomeno sono innumerevoli e sicuramente non ancora completamente sfruttate.

La ricerca di una teoria in grado di spiegare il fenomeno ha portato alla proposta di diversi modelli, nessuno dei quali completamente convincente. Solo recentemente si è capito che la spiegazione va cercata nel carattere viscoelastico delle soluzioni polimeriche.

Nel corso della presente tesi ho affrontato il problema dello studio della dinamica di flussi viscoelastici. Il problema è in sé estremamente complesso; per rendere possibile l'approccio analitico mi sono limitato allo studio di un flusso bidimensionale, parallelo e periodico: il flusso di Kolmogorov.

L'applicazione di metodi perturbativi multiscala al flusso di Kolmogorov viscoelastico mi ha permesso di descrivere l'intera dinamica del sistema in funzione della sola dinamica (unidimensionale) della perturbazione alla velocità trasversale al flusso. Il problema si riduce quindi dallo studio di un sistema di *sette* equazioni differenziali accoppiate allo studio della sola dinamica trasversa. Questa semplificazione, ottimamente confermata dalle simulazioni, permette lo studio analitico del fenomeno della drag reduction. Inoltre, la dinamica dell'intero sistema è ottenuta dalla sola integrazione numerica dell'equazione per la perturbazione trasversa. Questo significa, anche grazie al fatto che la dinamica trasversa agisce intrinsecamente su grandi scale temporali, che le simulazioni numeriche sono estremamente più veloci.

Per la prima volta si è ottenuta la conferma che i risultati dell'analisi multiscala approssimano ottimamente i risultati del modello Oldroyd-B, nell'approssimazione di piccoli ϵ . L'equazione risultante, l'equazione di Cahn-Hilliard, è in grado di prevedere con grande accuratezza la forma dello stato finale (con strutture a tangente iperbolica dette *kink*) e la dinamica del processo che conduce ad esso.

Lo studio dei coefficienti dell'equazione di Cahn-Hilliard mi ha permesso di individuare un valore del numero di Deborah oltre il quale *deve* cambiare la dinamica.

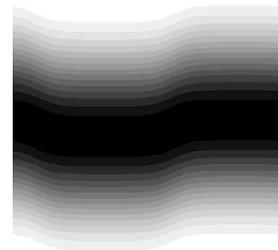


Figura 5.4: Stato finale della velocità longitudinale.

Prendendo in considerazione termini non lineari fino a quel momento trascurati ho potuto investigare le equazioni del moto nell'intorno del punto critico (De^* , Re^*). Ho in questo modo identificato nell'intorno del punto critico quattro zone con caratteristiche dinamiche differenti. Mentre una di queste è banale (completamente stabile), le altre hanno caratteristiche molto interessanti. In particolare modo ho individuato una zona nello spazio delle fasi che è linearmente stabile ma instabile non linearmente. Un meccanismo simile dovrebbe essere alla base di una serie di fenomeni collegati a instabilità osservate nell'estrusione di materie plastiche. Aver trovato una situazione simile nello studio di flussi viscoelastici liberi potrebbe portare a una migliore comprensione del problema.

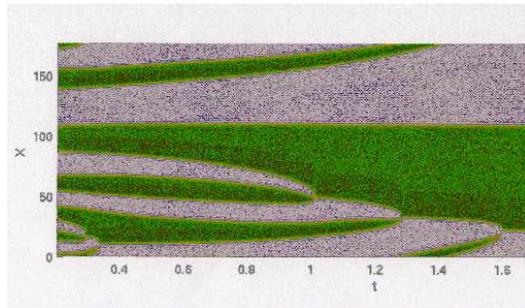


Figura 5.5: Crescita di cristalli bidimensionali con cascata aritmetica.

L'equazione di Cahn-Hilliard venne per la prima volta usata nel 1957 per descrivere le proprietà di un'interfaccia piatta tra due fasi coesistenti [15]. Da allora si sono trovati molti sistemi la cui dinamica è regolata da una simile equazione, dai fluidi polimerici alla crescita di cristalli bidimensionali allo studio in generale delle transizioni di fase [31, 32]. La generalizzazione dell'equazione di Cahn-Hilliard che ho trovato in questa tesi potrebbe essere applicata a questi sistemi nella speranza che sia

in grado di portare miglioramenti alla loro modellizzazione.

L'applicazione del metodo multiscale mi ha permesso di ottenere la forma esplicita dei campi in funzione della sola dinamica della perturbazione trasversa. Questo ha facilitato enormemente lo studio della drag reduction. In particolare, sono stato in grado di studiare analiticamente il flusso longitudinale e appurare l'aumento del flusso medio all'aumentare del numero di Deborah per flussi debolmente instabili. Questo risultato, valido solo nelle strette vicinanze della curva marginale di stabilità, ha inoltre permesso lo studio (tramite simulazioni dirette) del coefficiente di drag anche per ϵ elevati, in cui a priori i risultati multiscale non sono più affidabili.

I possibili sviluppi di questo studio sono svariati, oltre a quelli finora citati. In particolare manca un'approfondita investigazione numerica dei regimi Cahn-Hilliard generalizzati, sia per quanto riguarda l'accordo tra teoria e simulazione sia per quanto riguarda lo studio della drag reduction. Potrebbe poi essere studiata la presenza di instabilità elastiche nel regime "extrusion". Si può poi prevedere l'estensione del modello a flussi più complicati. In particolare mi riferisco allo studio di flussi tridimensionali e a modellizzazioni non lineari del comportamento dei polimeri (modello FENE-P, a cui accennato nel capitolo 2).

Appendice A

Un esempio di linearizzazione: le onde sonore

Le equazioni fondamentali del moto di un fluido sono l'equazione di Navier-Stokes (1.5) e l'equazione di continuità (1.1). Per un gas in genere si trascurano sia la viscosità, sia gli effetti gravitazionali; indicando con n il numero di particelle di massa m per unità di volume si scrive

$$mn(t, \mathbf{r}) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) \mathbf{v} = -\nabla p(t, \mathbf{r}) \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial n(t, \mathbf{r})}{\partial t} + \nabla \cdot [n(t, \mathbf{r})\mathbf{v}(n(t, \mathbf{r}))] = 0 \quad . \quad (\text{A.2})$$

La pressione p e la densità \mathbf{r} devono essere legate da una equazione di stato. In questo caso consideriamo il gas perfetto

$$p(t, \mathbf{r}) = n(t, \mathbf{r})kBT \quad (\text{A.3})$$

a temperatura costante.¹ Eliminiamo così immediatamente il termine dovuto alla pressione nella (A.1).

Consideriamo adesso piccole perturbazioni a una configurazione di equilibrio. Possiamo allora *linearizzare* le equazioni riscrivere i campi come

$$\mathbf{v}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{v}_0 + \mathbf{v}_1(t, \mathbf{r}) \quad (\text{A.4})$$

$$n(t, \mathbf{r}) = n_0 + n_1(t, \mathbf{r}) \quad , \quad (\text{A.5})$$

dove gli indici zero indicano i valori dei campi non perturbati all'equilibrio, che assumiamo costanti in tempo e spazio; gli indici 1 indicano una piccola perturbazione. Imponiamo cioè

$$\mathbf{v}_1 \ll \mathbf{v}_0 \quad (\text{A.6})$$

$$n_1 \ll n_0 \quad . \quad (\text{A.7})$$

¹In realtà una migliore descrizione delle onde sonore si ottiene dalla condizione adiabatica $p/n^\gamma = \text{costante}$; utilizziamo l'approssimazione isoterma per semplicità di esposizione.

Sostituiamo ora (A.4) e (A.5) nella (A.1) e nella (A.2) tenendo conto che i campi \mathbf{v}_0 e n_0 sono costanti. Otteniamo

$$m[n_0 + n_1] \left(\frac{\partial \mathbf{v}_1}{\partial t} + ([\mathbf{v}_0 + \mathbf{v}_1] \cdot \nabla) \mathbf{v}_1 \right) = -KT \nabla n_1 \quad (\text{A.8})$$

$$0 = \frac{\partial n_1}{\partial t} + [n_0 + n_1] \nabla \cdot \mathbf{v}_1 + [\mathbf{v}_0 + \mathbf{v}_1] \cdot \nabla n_1 \quad . \quad (\text{A.9})$$

A causa delle condizioni (A.6) e (A.7) possiamo trascurare i termini $x_1 y_1$ in confronto a quelli del tipo $x_1 y_0$. Scriviamo cioè

$$m n_0 \left(\frac{\partial \mathbf{v}_1}{\partial t} + (\mathbf{v}_0 \cdot \nabla) \mathbf{v}_1 \right) = -KT \nabla n_1 \quad (\text{A.10})$$

$$0 = \frac{\partial n_1}{\partial t} + n_0 \nabla \cdot \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_0 \cdot \nabla n_1 \quad . \quad (\text{A.11})$$

Ora le equazioni (A.10) e (A.11) per i campi perturbazione \mathbf{v}_1 e n_1 sono lineari e, alla luce di quanto visto nel paragrafo precedente, possiamo trasformare tale sistema differenziale in un sistema algebrico lineare. Sostituiamo $\nabla \rightarrow i\mathbf{k}$ e $\partial/\partial t \rightarrow -i\omega$ per ottenere

$$-i\omega m n_0 \mathbf{v}_1 + i(\mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{k}) \mathbf{v}_1 = -iKT \mathbf{k} n_1 \quad (\text{A.12})$$

$$0 = -i\omega n_1 + i n_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1 + i \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{k} n_1 \quad . \quad (\text{A.13})$$

Per onde che si propagano perpendicolarmente alla velocità di background del fluido \mathbf{v}_0 otteniamo

$$0 = (\omega^2 - \frac{KT}{m} k^2) n_1 \quad . \quad (\text{A.14})$$

Per una perturbazione non nulla cioè troviamo la relazione di dispersione per le onde sonore in un gas

$$\omega^2 = c_x^2 k^2 \quad , \quad (\text{A.15})$$

dove $c_s = \sqrt{\frac{KT}{m}}$ è la velocità di propagazione delle onde nel mezzo. Notiamo che questo è vero sempre per perturbazioni trasverse, ma anche per onde longitudinali quando $\mathbf{v}_0 \ll c_s$, e cioè la velocità tipica è minore del rapporto tra le dimensioni caratteristiche del problema²: quando cioè le onde “vedono” il fluido base a riposo.

²E cioè $|\mathbf{v}_0| \ll L/T$, con $1/L \approx |\nabla|$ e $1/T \approx |\partial/\partial t|$.

Appendice B

L'equazione di Cahn-Hilliard

B.1 Metodo di risoluzione

Nel capitolo 3 sono state poste le basi per la soluzione del sistema (3.1)-(3.2) con tecnica multiscala non lineare. Mostro ora il metodo risolutivo applicato ai due primi ordini dello sviluppo.

All'ordine ϵ l'equazione di continuità è

$$\partial_z w_z^{(1)} = 0 \quad , \quad (\text{B.1})$$

da cui concludiamo subito $w_z^{(1)} = \langle w_z^{(1)} \rangle$. L'equazione per $\zeta_{zz}^{(1)}$

$$\zeta_{zz}^{(1)} \frac{V}{L\mathcal{D}e} = 0 \quad (\text{B.2})$$

è di immediata soluzione: $\zeta_{zz}^{(1)} = 0$. Sfruttando questo risultato troviamo dall'equazione per $w_z^{(1)}$

$$\partial_z q^{(1)} - \frac{\eta\nu_c V}{L\mathcal{D}e} \partial_z \zeta_{zz}^{(1)} = 0 \quad (\text{B.3})$$

che la pressione al primo ordine ha perturbazione costante $q^{(1)} = Q1(X)$. Il sistema

$$\frac{V}{L} \langle w_z^{(1)} \rangle \sin\left(\frac{z}{L}\right) + \frac{\eta\nu_c V}{L\mathcal{D}e} \partial_z \zeta_{xz}^{(1)} + \nu_c \partial_z^2 w_x^{(1)} = 0 \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{V}{L\mathcal{D}e} \zeta_{xz}^{(1)} - \frac{\mathcal{D}e}{L} \cos\left(\frac{z}{L}\right) \langle w_z^{(1)} \rangle + \frac{V}{L} \sin\left(\frac{z}{L}\right) \zeta_{zz}^{(1)} - \partial_z w_x^{(1)} = 0 \quad (\text{B.5})$$

ha soluzioni

$$\zeta_{xz}^{(1)} = \mathcal{D}e \frac{\mathcal{D}e + \frac{LV - \eta\nu_c \mathcal{D}e}{\nu_c(\eta+1)}}{V} \cos\left(\frac{z}{L}\right) \langle w_z^{(1)} \rangle \quad (\text{B.6})$$

$$w_x^{(1)} = \frac{1}{\nu_c(\eta+1)} \langle w_z^{(1)} \rangle \sin\left(\frac{z}{L}\right) (LV - \eta\nu_c \mathcal{D}e) \quad . \quad (\text{B.7})$$

La soluzione della

$$\frac{V}{L\mathcal{D}e}\zeta_{xx}^{(1)} + \frac{2V}{L}\sin\left(\frac{z}{L}\right)\zeta_{xz}^{(1)} + 2\mathcal{D}e\sin\left(\frac{z}{L}\right)\partial_z w_x^{(1)} + \quad (\text{B.8})$$

$$+ \frac{4\mathcal{D}e^2}{L}\sin\left(\frac{z}{L}\right)\cos\left(\frac{z}{L}\right)\langle w_z^{(1)} \rangle = 0 \quad (\text{B.9})$$

è trovata algebricamente:

$$\zeta_{xx}^{(1)} = -2\mathcal{D}e^2 \frac{\mathcal{D}e + \frac{2(LV - \eta\nu_c\mathcal{D}e)}{\nu_c(\eta+1)}}{V} \cos\left(\frac{z}{L}\right)\sin\left(\frac{z}{L}\right)\langle w_z^{(1)} \rangle \quad . \quad (\text{B.10})$$

Ottenuti i campi, applichiamo la condizione di risolubilità al secondo ordine. Sostituendo i campi, noti, ottenuti all'ordine ϵ^1 , si trova $\frac{dQ1(X)}{dX} = 0$. Poniamo allora $Q1 = 0$ per semplicità. Risolviamo ora le equazioni al secondo ordine. L'equazione di continuità

$$\mathcal{D}e \left(\frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \right) \sin\left(\frac{z}{L}\right) \frac{(L^2 - \eta\nu_c\tau)}{\nu_c\tau(\eta+1)} + \frac{\partial}{\partial z} w_z^{(2)}(z, X) = 0 \quad (\text{B.11})$$

fa trovare l'espressione per $w_z^{(2)}$:

$$w_z^{(2)}(z, X) = -\mathcal{D}e \left(\frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \right) \cos\left(\frac{z}{L}\right) \frac{(L^2 - \eta\nu_c\tau)}{\nu_c\tau(\eta+1)} \quad . \quad (\text{B.12})$$

Non riporto per brevità l'equazione per $\zeta_{zz}^{(2)}$. Si risolve algebricamente e la soluzione è:

$$\zeta_{zz}^{(2)} = -2\mathcal{D}e \left(\frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \right) \sin\left(\frac{z}{L}\right) \frac{(\nu_c\tau + L^2)}{\nu_c(\eta+1)} \quad . \quad (\text{B.13})$$

L'equazione per $w_z^{(2)}$, noto il risultato (B.12), dá l'espressione per $q^{(2)}$:

$$\begin{aligned} 0 = & \frac{L\mathcal{D}e}{\tau} \cos\left(\frac{z}{L}\right) \frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle (X) - \frac{\eta\nu_c}{L} \left(\frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \right) \mathcal{D}e \cos\left(\frac{z}{L}\right) + \\ & + \left(\frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \right) \mathcal{D}e \cos\left(\frac{z}{L}\right) \frac{\eta(L^2 - \eta\nu_c\tau)}{L\tau(\eta+1)} + \\ & - 2\mathcal{D}e \left(\frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \right) \cos\left(\frac{z}{L}\right) \frac{\eta(\nu_c\tau + L^2)}{L\tau(\eta+1)} + \\ & + \mathcal{D}e \left(\frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \cos\left(\frac{z}{L}\right) \frac{(L^2 - \eta\nu_c\tau)}{\tau(\eta+1)L} \right) + \frac{\partial}{\partial z} q^{(2)}(z, X) \quad (\text{B.14}) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow q^{(2)} = -2 \left(\frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \right) \mathcal{D}e \sin\left(\frac{z}{L}\right) \frac{L^2}{\tau} + Q2(X) \quad . \quad (\text{B.15})$$

Il sistema per $\zeta_{xz}^{(2)}$ e $w_x^{(2)}$ è chiuso:

$$\begin{aligned}
0 = & \left(\frac{1}{2} \left((5 \mathcal{D}e^2 L^2 \nu_c \tau + 2 \mathcal{D}e^2 L^4 + 3 \mathcal{D}e^2 L^2 \eta \nu_c \tau) \cos \left(2 \frac{z}{L} \right) \right. \right. \\
& \left. \left. - 2 \nu_c \tau L^2 (\eta + 1) - 2 \mathcal{D}e^2 L^4 - \mathcal{D}e^2 L^2 \nu_c \tau (\eta + 3) \right) \frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle + \right. \\
& \left. \left(-2 \tau^2 \mathcal{D}e \sin \left(\frac{z}{L} \right) \nu_c - 2 \tau \mathcal{D}e \sin \left(\frac{z}{L} \right) L^2 \right) (\langle w_z^{(1)} \rangle)^2 + \right. \\
& \left. 2 \zeta_{xz}^{(2)} \nu_c L^2 + 2 \zeta_{xz}^{(2)} \nu_c L^2 \eta - 2 \left(\frac{\partial}{\partial z} w_x^{(2)} \right) \nu_c \tau L^2 - 2 \left(\frac{\partial}{\partial z} w_x^{(2)} \right) \nu_c \tau L^2 \eta \right) \times \\
& \times (2 \nu_c \tau L^2 + 2 \nu_c \tau L^2 \eta)^{-1} \quad (\text{B.16})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
0 = & \left(\left(-2 \nu_c^2 \eta \mathcal{D}e^2 L^2 \tau \sin \left(2 \frac{z}{L} \right) (\eta + 1) \frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \right) + \right. \\
& \left. + \left((-\nu_c^2 \eta \tau^2 \mathcal{D}e - 2 \nu_c \eta \tau \mathcal{D}e L^2 + \mathcal{D}e L^4) \cos \left(\frac{z}{L} \right) (\langle w_z^{(1)} \rangle)^2 \right) + \right. \\
& \left. + \left((-2 \nu_c^2 \eta \tau L^3 - \nu_c^2 \eta^2 \tau L^3 - \nu_c^2 \tau L^3) \frac{\partial^2}{\partial z^2} w_x^{(2)} \right) \right) \times \\
& \times \left(\nu_c L^3 \tau \eta + \nu_c L^3 \tau \right)^{-1} \quad (\text{B.17})
\end{aligned}$$

e ha come soluzioni

$$\zeta_{zz}^{(2)} = -2 \left(\frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \right) \mathcal{D}e \sin \left(\frac{z}{L} \right) \frac{(\nu_c \tau + L^2)}{\nu_c (\eta + 1)} \quad (\text{B.18})$$

$$\begin{aligned}
w_x^{(2)} = & \frac{\mathcal{D}e (2 \nu_c^2 \eta \tau^2 + 4 \nu_c \tau L^2 \eta - 2 L^4)}{2 \nu_c \tau L (\eta + 1)} (\langle w_z^{(1)} \rangle)^2 \cos \left(\frac{z}{L} \right) + \\
& \frac{L \mathcal{D}e^2 \eta^2}{2 (\eta + 1)} \left(\frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \right) \sin \left(2 \frac{z}{L} \right) \quad . \quad (\text{B.19})
\end{aligned}$$

L'equazione per ζ_{xx} è risolubile analiticamente e ha soluzione

$$\begin{aligned} \zeta_{xx} = & \left(\left(\mathcal{D}e^3 L^2 \nu_c^2 \tau (6\eta + 4 + 2\eta^2) \sin\left(3\frac{z}{L}\right) \right) + \left((2(\eta + 1)\nu_c L^4 + \right. \right. \\ & \left. \left. + (-4\eta^2 - 6\eta - 4\mathcal{D}e^2 - 2\mathcal{D}e^2\eta^2 - 6\mathcal{D}e^2\eta - 2)\nu_c^2 \tau L^2 \right) \mathcal{D}e \frac{d}{dX} \langle w_z^{(1)} \rangle \right) + \\ & + \left((6\eta\nu_c^2 \tau^2 + 3L^4 + 7\tau^2\nu_c^2 + 2\tau^2\nu_c^2\eta^2 + 6\nu_c \tau L^2) \mathcal{D}e^2 \langle w_z^{(1)} \rangle^2 \cos\left(\frac{2z}{L}\right) \right) + \\ & + \left(\langle w_z^{(1)} \rangle^2 (-L^4 + 2\nu_c \tau L^2 \eta - \tau^2 \nu_c^2) \mathcal{D}e^2 \right) \times \\ & \times \left(\nu_c^2 L^2 (\eta + 1)^2 \right) . \quad (\text{B.20}) \end{aligned}$$

Si ripete quindi il procedimento per gli ordini successivi. Le espressioni per le equazioni sono considerevolmente lunghe, ma il procedimento è concettualmente semplice, posto di seguire il metodo suggerito.

B.2 I parametri A, B, C

Il valore dei coefficienti A, B e C che compaiono nella (3.35) è funzione dei parametri di flusso $\mathcal{D}e, \mathcal{R}e, \eta$ e dei parametri fisici L e V .

$$\begin{aligned} A = & \left(13\eta^2 \mathcal{D}e^2 + 8\eta^2 + 16\eta + 12\eta \mathcal{D}e^2 + \right. \\ & \left. 3\eta \mathcal{D}e \sqrt{13\eta^2 \mathcal{D}e^2 + 16\eta + 8 + 8\eta^2 + 12\eta \mathcal{D}e^2} \right) V L \times \\ & \left(2(\eta + 1) \left(3\eta \mathcal{D}e + \sqrt{13\eta^2 \mathcal{D}e^2 + 16\eta + 8 + 8\eta^2 + 12\eta \mathcal{D}e^2} \right) \right)^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B = & \left((10\eta + 19\eta^2 + 6\eta^3) \mathcal{D}e^4 + (-20\eta^3 - 16\eta - 36\eta^2) \mathcal{D}e^2 + \right. \\ & - (16 + 48\eta + 48\eta^2 + 16\eta^3) + \left(\sqrt{13\eta^2 \mathcal{D}e^2 + 16\eta + 8 + 8\eta^2 + 12\eta \mathcal{D}e^2} \times \right. \\ & \left. \left. \eta (2\eta + 5\mathcal{D}e^3 - 4 - 4\eta \mathcal{D}e) \right) \right) \times \\ & \left(\left(3\mathcal{D}e\eta + \sqrt{13\eta^2 \mathcal{D}e^2 + 16\eta + 8 + 8\eta^2 + 12\eta \mathcal{D}e^2} \right) (\eta + 1)^2 V \right)^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C = -V L^3 & \left(3\eta^3 \mathcal{D}e^4 - 58\eta^3 \mathcal{D}e^2 + 7\eta^2 \mathcal{D}e^4 - 116\eta^2 \mathcal{D}e^2 - 144\eta^2 + \right. \\
& \left. - 144\eta - 48\eta^3 - 58\eta \mathcal{D}e^2 + 10\eta \mathcal{D}e^4 - 48 + \right. \\
& \left. \sqrt{13\eta^2 \mathcal{D}e^2 + 16\eta + 8 + 8\eta^2 + 12\eta \mathcal{D}e^2} \eta (7\eta \mathcal{D}e^3 - 8\mathcal{D}e\eta + 13\mathcal{D}e^3 - 8\mathcal{D}e) \right) \times \\
& \left(8(\eta + 1)^2 \left(3\mathcal{D}e\eta + \sqrt{13\eta^2 \mathcal{D}e^2 + 16\eta + 8 + 8\eta^2 + 12\eta \mathcal{D}e^2} \right) \right)^{-1}
\end{aligned}$$

Appendice C

L'equazione di Cahn-Hilliard generalizzata sopra soglia

All'ordine $\epsilon^{(1/2)}$ l'equazione di continuità è

$$\partial_z w_z^{(1/2)} = 0 \quad , \quad (C.1)$$

da cui concludiamo subito $w_z^{(1/2)} = \langle w_z^{(1/2)} \rangle$. L'equazione per $\zeta_{zz}^{(1/2)}$

$$\zeta_{zz}^{(1/2)} \frac{V}{L\mathcal{D}e^*} = 0 \quad (C.2)$$

è di immediata soluzione: $\zeta_{zz}^{(1/2)} = 0$. Sfruttando questo risultato troviamo dall'equazione per $w_z^{(1/2)}$

$$\partial_z q^{(1/2)} - \frac{\eta\nu_c V}{L\mathcal{D}e^*} \partial_z \zeta_{zz}^{(1/2)} = 0 \quad (C.3)$$

che la pressione al primo ordine ha perturbazione costante $q^{(1/2)} = Q1(X)$. Il sistema

$$\frac{V}{L} \langle w_z^{(1/2)} \rangle \sin\left(\frac{z}{L}\right) + \frac{\eta\nu_c V}{L\mathcal{D}e^*} \partial_z \zeta_{xz}^{(1/2)} + \nu_c \partial_z^2 w_x^{(1/2)} = 0 \quad (C.4)$$

$$\frac{V}{L\mathcal{D}e^*} \zeta_{xz}^{(1/2)} - \frac{\mathcal{D}e}{L} \cos\left(\frac{z}{L}\right) \langle w_z^{(1/2)} \rangle + \frac{V}{L} \sin\left(\frac{z}{L}\right) \zeta_{zz}^{(1/2)} - \partial_z w_x^{(1/2)} = 0 \quad (C.5)$$

ha soluzioni

$$\zeta_{xz}^{(1/2)} = \mathcal{D}e^* \frac{\mathcal{D}e^* + \frac{LV - \eta\nu_c \mathcal{D}e^*}{\nu_c(\eta+1)}}{V} \cos\left(\frac{z}{L}\right) \langle w_z^{(1/2)} \rangle \quad (C.6)$$

$$w_x^{(1/2)} = \frac{1}{\nu_c(\eta+1)} \langle w_z^{(1/2)} \rangle \sin\left(\frac{z}{L}\right) (LV - \eta\nu_c \mathcal{D}e^*) \quad . \quad (C.7)$$

La soluzione della

$$\frac{V}{L\mathcal{D}e^*} \zeta_{xx}^{(1/2)} + \frac{2V}{L} \sin\left(\frac{z}{L}\right) \zeta_{xz}^{(1/2)} + 2\mathcal{D}e^* \sin\left(\frac{z}{L}\right) \partial_z w_x^{(1/2)} + \quad (C.8)$$

$$+ \frac{4\mathcal{D}e^2}{L} \sin\left(\frac{z}{L}\right) \cos\left(\frac{z}{L}\right) \langle w_z^{(1/2)} \rangle = 0 \quad (C.9)$$

è trovata algebricamente:

$$\zeta_{xx}^{(1/2)} = -2\mathcal{D}e^{*2} \frac{\mathcal{D}e^* + \frac{2(LV - \eta\nu_c \mathcal{D}e^*)}{\nu_c(\eta+1)}}{V} \cos\left(\frac{z}{L}\right) \sin\left(\frac{z}{L}\right) \langle w_z^{(1/2)} \rangle . \quad (\text{C.10})$$

Ottenuti i campi, applichiamo la condizione di risolubilità all'ordine ϵ^1 . Sostituendo i campi, noti, ottenuti all'ordine $\epsilon^{1/2}$, si trova $\frac{dQ1(X)}{dX} = 0$. Poniamo allora $Q1 = 0$ per semplicità. Risolviamo ora le equazioni all'ordine $\epsilon^{2/2}$. Fino a questo punto non entrano ancora in gioco termini contenenti derivate rispetto a variabili veloci o espansioni dei parametri $\nu, \mathcal{D}e$. Le equazioni e le relative soluzioni sono perciò molto simili a quelle dell'ordine $\epsilon^{1/2}$

L'equazione di continuità

$$\partial_z w_z^{(2/2)} = 0 \quad , \quad (\text{C.11})$$

dà banalmente $w_z^{(2/2)} = \langle w_z^{(2/2)} \rangle$. L'equazione per $\zeta_{zz}^{(2/2)}$ è nuovamente

$$\zeta_{zz}^{(2/2)} \frac{V}{L\mathcal{D}e^*} = 0 \Rightarrow \zeta_{zz}^{(2/2)} = 0 \quad (\text{C.12})$$

Si risolve ora l'equazione per $w_z^{(2/2)}$. Insieme alla condizione (C.11) si trova

$$0 = \frac{\partial}{\partial z} q^{(2/2)} \Rightarrow q^{(2/2)} = Q2(X) \quad . \quad (\text{C.13})$$

Il sistema per $w_x^{(2/2)}$ e $\zeta_{xz}^{(2/2)}$ è, al solito, accoppiato; si trovano algebricamente le soluzioni:

$$w_x^{(2/2)} = - \frac{\cos\left(\frac{z}{L}\right) (w_z^{(1/2)})^2 (-\nu_c^2 \eta (\mathcal{D}e^*)^2 - 2\nu_c \eta L \mathcal{D}e^* V + L^2 V^2)}{\nu_c^2 L^2 (\eta + 1)^2} \quad (\text{C.14})$$

$$\zeta_{xz}^{(2/2)} = \frac{\sin\left(\frac{z}{L}\right) (w_z^{(1/2)})^2 \mathcal{D}e^* \left[L^4 + \frac{\mathcal{D}e^* L^2 \nu_c}{V} (L(1 - \eta) + \frac{\nu_c}{V}) \right]}{\nu_c^2 L^2 (\eta + 1)^2} \quad (\text{C.15})$$

L'equazione per $\zeta_{xx}^{(2/2)}$ può essere risolta algebricamente e ha risultato:

$$\begin{aligned} \zeta_{xx}^{(2/2)} = & \left(\frac{\cos\left(\frac{2z}{L}\right) (w_z^{(1/2)})^2 (\mathcal{D}e^*)^2}{\nu_c^2 L^2 (\eta + 1)^2} \times \right. \\ & \times \left[\left(\frac{\nu_c \mathcal{D}e^* L^2}{V^2} (2\eta^2 \nu_c \mathcal{D}e^* + 6\eta \nu_c \mathcal{D}e^* + 7\nu_c \mathcal{D}e^* + 6LV) \right) + 3L^4 \right] + \\ & \left. \left(\frac{\cos\left(\frac{2z}{L}\right) (w_z^{(1/2)})^2 (\mathcal{D}e^*)^2}{\nu_c^2 L^2 (\eta + 1)^2} \left[\frac{2\eta \nu_c L^3 \mathcal{D}e^*}{V} - \frac{\nu_c^2 L^2 \mathcal{D}e^*}{V^2} - L^4 \right] \right) \right) \quad (\text{C.16}) \end{aligned}$$

Il calcolo procede come descritto nel paragrafo 3.3.1 e giunge, imponendo la condizione di risolubilità all'ordine $\epsilon^{(9/2)}$, all'equazione di Cahn-Hilliard generalizzata (4.10).

Appendice D

Codice pseudospettrale

I risultati teorici discussi nei capitoli 3 e 5 sono stati studiati numericamente con un apposito codice scritto in linguaggio FORTRAN. In questa appendice intendo dare alcuni dettagli sul codice pseudospettrale usato e su alcuni accorgimenti che sono stati adottati per l'investigazione del problema viscoelastico.

D.1 Discretizzazione spaziale e FFT

Si consideri per semplicità un'unica componente $u(x)$ del campo di velocità. Scegliendo di formulare il problema nel contesto di flussi liberi, con condizioni al contorno periodiche, permette di ridurre gli errori computazionali dovuti alla discretizzazione spaziale, oltre ai vantaggi discussi nel corso della tesi.

Analiticamente è possibile considerare la trasformata di Fourier $\hat{u}(k)$ della funzione $u(x)$:

$$\mathcal{F}u(x) = \hat{u}(k) = C \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} u(x) dx, \in \mathbf{C} \quad .$$

La trasformata di Fourier inversa di $\hat{u}(k)$ è definita da:

$$\mathcal{F}^{-1}\hat{u}(k) = u(x) = C' \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} \hat{u}(k) dk, \in \mathbf{C} \quad ,$$

in cui le costanti C e C' soddisfano la relazione $CC' = 1/(2\pi)$ come conseguenza della condizione $\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1} = Id$. Si è scelto $C = 1/(2\pi)$, $C' = 1$.

Numericamente è evidentemente necessario limitare il dominio di definizione del campo $u(x)$ e discretizzarlo in modo da ridurre la conoscenza del campo alla conoscenza del numero finito di valori assunti da u nei punti del reticolo costruito, reali o complessi a seconda della natura della funzione u . Il dominio spaziale, per esempio $(0, L)$, sia discretizzato in N intervalli di lunghezza $\Delta x = L/N$; essi definiscono una griglia di N punti $x_j = j\Delta x$, con $j = 0, \dots, N - 1$. Anche lo spazio di Fourier risulta

in tal modo discretizzato in una griglia di N punti $k_j = j(2\pi/L)$. La trasformata di Fourier nello spazio discreto è:

$$\hat{u}_k \equiv \hat{u}(k) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} u_n e^{-\frac{2\pi i}{N}nk} \in \mathbf{C} \quad (\text{D.1})$$

$$u_n \equiv u(x_n) = \sum_{k=0}^{N-1} \hat{u}_k e^{\frac{2\pi i}{N}nk} \in \mathbf{C} \quad , \quad (\text{D.2})$$

in cui le costanti C e C' sono state scelte arbitrariamente in accordo con la condizione di normalizzazione $CC' = 1/N$ diretta conseguenza della condizione $\mathcal{F}\mathcal{F}^{-1} = Id$. È opportuno ricordare la relazione nota come *disuguaglianza di Parseval* che, nel caso discreto, assume la forma:

$$\sum_{n=0}^{N-1} |u_n|^2 = N \sum_{k=0}^{N-1} |\hat{u}_k|^2 \quad . \quad (\text{D.3})$$

Poiché $u(x)$ rappresenta una velocità, dobbiamo evidentemente imporre che il risultato dell'operazione di antitrasformata discreta (D.2) sia reale. Tale condizione corrisponde a un vincolo sulle componenti di Fourier \hat{u}_k :

$$\hat{u}(-k) = \hat{u}^*(k) \quad . \quad (\text{D.4})$$

Il vincolo (D.4) riduce a $\frac{N}{2} - 1$ il numero di componenti complesse indipendenti, con l'aggiunta delle due componenti reali:

$$\begin{aligned} \hat{u}_0 &= \bar{u} \in \mathbf{R} \\ \hat{u}_N &= \sum_{n=0}^{N-1} (-1)^n u_n \in \mathbf{R} \quad , \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Nel problema unidimensionale si hanno quindi $2(N/2 - 1) + 2 = N$ componenti reali indipendenti. Il calcolo delle N componenti di Fourier u_k associate al campo u richiede l'utilizzo di N cicli di N passi. Il tempo necessario al completamento di questo tipo di operazioni cresce perciò con il *quadrato* della risoluzione spaziale scelta. Sono oggi disponibili numerose versioni [29] di un algoritmo chiamato *Fast Fourier Transform* (FFT), che calcola le trasformate di Fourier in un numero di operazioni proporzionale a $N \log N$. Il risparmio di tempo che ne risulta è molto vantaggioso, soprattutto ad alte risoluzioni.

D.2 Discretizzazione temporale

Esistono diversi metodi di integrazione temporale discreta che si differenziano per la precisione e per il tempo impiegato. Analizziamo nel dettaglio lo schema di

integrazione temporale che utilizziamo per la risoluzione numerica delle equazioni (3.1)-(3.2) che definiscono il problema viscoelastico studiato in questa tesi.

D.2.1 Metodo di Eulero

Consideriamo un'equazione differenziale del tipo:

$$\frac{dx(t)}{dt} = F(x(t), t) \quad (\text{D.6})$$

L'analisi numerica dell'equazione differenziale (D.6) viene effettuata discretizzando il dominio temporale di interesse in intervalli di durata finita δt . Conoscendo il valore della funzione a un istante di riferimento t_0 , il valore della funzione agli istanti $t_0 + n \delta t$ ($n \in \mathbb{N}$) può essere ottenuto attraverso la seguente approssimazione:

$$\begin{aligned} x(\delta t) &\approx x_0 + F(x(0), 0)\delta t \\ x(2\delta t) &\approx x(\delta t) + F(x(\delta t), \delta t)\delta t \\ &\dots \\ x(t + \delta t) &\approx x(t) + F(x(t), t)\delta t \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

L'applicazione ricorsiva di questo schema permette di trovare il risultato per ogni n .

Lo schema di integrazione temporale (D.7) coincide con l'approssimazione della secante σ che unisce il punto $x(t)$ al punto $x(t + \delta t)$ con la tangente τ alla curva $x(t')$ nel punto $t' = t$. La retta secante tende alla retta tangente per $\delta t \rightarrow 0$ (assumendo che la funzione $x(t')$ sia regolare), e l'algoritmo diventa progressivamente più preciso al diminuire del valore di δt .

Si può dimostrare che l'errore che si commette sfruttando il metodo di integrazione descritto (che chiameremo integrazione *alla Eulero*) è proporzionale all'intervallo discreto δt ; è cioè un'approssimazione al prim'ordine. È sufficiente infatti considerare lo sviluppo in serie della funzione $x(t)$ a partire dal punto t e osservare che l'approssimazione che si adotta nello schema di integrazione alla Eulero è il troncamento della serie al prim'ordine:

$$x(t + \delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n x}{dt^n} \right|_t \delta t^n = x(t) + \dot{x}(t)\delta t + O(\delta t^2) \quad (\text{D.8})$$

D.2.2 Metodo di Runge-Kutta del secondo ordine

Consideriamo nuovamente il problema differenziale

$$\dot{x}(t) = F(x(t), t) \quad (\text{D.9})$$

con la condizione iniziale $x(0) = x_0$. Esistono metodi di integrazione numerica più precisi dell'integrazione alla Eulero, che considerano più termini dello sviluppo in serie (D.8) della funzione incognita $x(t)$. Esponiamo in particolare il metodo di integrazione di Runge-Kutta di ordine 2, che è quello usato dal codice per l'integrazione dei campi di vorticità e delle componenti del tensore di elongazione dei polimeri. Consideriamo l'approssimazione della funzione $x(t)$ di ordine 2:

$$\begin{aligned} x(t + \delta t) &= x(t) + \dot{x}(t)\delta t + \ddot{x}(t)\frac{\delta t^2}{2} + \mathcal{O}(\delta t^3) \\ &\approx x(t) + \delta t \left(F[x(t)] + \frac{1}{2}\delta t \left[\frac{\partial F}{\partial x} F \right]_{x(t)} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

in cui si è utilizzata l'espressione della derivata seconda $\ddot{x} = F(\partial F/\partial x)$. Il metodo di Runge-Kutta di ordine 2 calcola il valore di tale derivata utilizzando un'ulteriore suddivisione dell'intervallo δt in due intervalli di dimensione $\delta t/2$. Osserviamo che da una prima integrazione alla Eulero della funzione $x(t)$ con passo $\delta t/2$ si ottiene:

$$\delta x = x\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) - x(t) \approx F(x(t))\frac{\delta t}{2} \quad (\text{D.11})$$

Conoscendo dalla (D.11) il valore (approssimato al prim'ordine) dell'incremento δx della funzione $x(t)$ dopo il primo passo, possiamo applicare nuovamente l'integrazione alla Eulero alla funzione $F(x(t))$:

$$F(x + \delta x) \approx F(x) + \left. \frac{dF}{dx} \right|_x \delta x = F(x(t)) + \left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x(t)} F(x(t))\frac{\delta t}{2} \quad (\text{D.12})$$

La stima al prim'ordine della funzione F nel punto $x + \delta x$ corrisponde all'espressione che compare a secondo membro nell'equazione (D.10), e fornisce quindi lo schema di integrazione temporale completo:

$$x(t + \delta t) = x(t) + \delta t F\left[x(t) + \frac{1}{2}\delta t F(x(t))\right] \quad (\text{D.13})$$

D.3 Metodo pseudospettrale

Il metodo *pseudospettrale* sfrutta i vantaggi offerti dalla formulazione delle equazioni in spazio di Fourier per calcolare le derivate come semplici prodotti:

$$\mathcal{F} \frac{d}{dx} \equiv ik_x \quad ,$$

in cui i è l'unità immaginaria. È noto che l'operazione prodotto corrisponde in spazio di Fourier a una convoluzione definita dall'integrale:

$$\mathcal{F}(f(x) \cdot g(x))(k) \equiv (\hat{f} * \hat{g})(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(p) \hat{g}(k-p) dp \quad .$$

Tale operazione risulta numericamente dispendiosa e si preferisce quindi calcolare i prodotti in spazio fisico per poi ritornare in spazio di Fourier attraverso la FFT discreta. Il codice è detto pseudospettrale per questo: le derivate vengono calcolate in spazio di Fourier, mentre i prodotti in spazio fisico.

Le equazioni (3.1)-(3.2) vengono dunque integrate numericamente secondo lo schema Runge-Kutta. Tale integrazione viene fatta in realtà per il campo di vorticità $\omega(\mathbf{x}, t) = \nabla \times \vec{v}$ del flusso, perché risulta più semplice.

D.4 Stabilità e dealiasing

In tutte le equazioni considerate sono presenti termini derivanti da prodotti tra campi. Tali operazioni possono generare modi al di fuori dei modi risolti¹ che vengono proiettati (aliased) in maniera casuale e quindi incontrollabile su modi risolti.

Un modo per risolvere questo problema consiste nel porre a zero, per ogni campo, tutti i modi al di sopra di un certo valore critico, che vale $2/3$ del massimo modo risolto dal sistema (k_{max}). In questo modo il prodotto tra due campi non può generare che modi nell'intervallo $[2/3 k_{max}, k_{max}]$, che verranno comunque eliminati all'inizio del successivo step temporale. Per una trattazione più approfondita dell'argomento si può guardare [30].

Per quanto arbitrario questo metodo possa sembrare, esso permette effettivamente di eliminare effetti spurii dovuti alla finitezza della risoluzione e non influenza apprezzabilmente i risultati. Intuitivamente si può immaginare che questo succede perché la dinamica avviene su modi molto inferiori a k_{max} , che non vengono quindi modificati da questo criterio. I risultati a piccole lunghezze d'onda perdono così affidabilità, mentre ci si sono eliminati incontrollabili effetti numerici.

Può succedere che il sistema che si sta integrando improvvisamente diverga come conseguenza di una eccessivamente errata approssimazione del campo. Può cioè succedere che, applicando lo schema temporale prima descritto, si ottenga un risultato talemente errato da produrre risultati imprevedibili una volta applicato il sistema dinamico in studio. Il problema della valutazione di questo tipo di instabilità numeriche è molto complesso.

Esistono criteri validi in determinate situazioni fra cui per esempio il criterio di Courant. Si richiede, perché il sistema sia stabile, che il rapporto tra step di integrazione temporale e step di integrazione spaziale sia molto minore della velocità tipica di propagazione dell'informazione nel sistema. Basta quindi controllare che

¹Si consideri per esempio il prodotto $\sin x \cos x = (1/2) \sin 2x$. Tale operazione coinvolge il prodotto di due funzioni caratterizzate da $k = 1$ e produce un modo $k = 2$.

lo step di integrazione temporale sia sufficientemente piccolo, tale da soddisfare: $\Delta t \ll \Delta x / U_{max}$.

D.5 Dimensioni fisiche del box

In molti casi la scelta delle dimensioni fisiche del box di integrazione non è di particolare importanza ai fini del risultato delle simulazioni. Perché si possano ottenere risultati ragionevoli nel caso studiato in questa tesi bisogna invece porre attenzione alle dimensioni relative del box di integrazione.

Come visto, il numero di modi linearmente instabili è determinato dalla relazione (3.40). Il valore di ϵ deve essere piccolo per poter applicare il metodo perturbativo multiscala. Questo implica che, nelle condizioni di interesse, k_{banda} assumerà valori decisamente piccoli. Ciò è naturale, visto che il fondamento dell'analisi multiscala è che vengano eccitati modi trasversali a scala molto più grande della tipica scala della velocità trasversale.²

Quello che *non* si può fare per risolvere questo problema è aumentare la risoluzione del codice lungo l'asse trasversale. Così facendo saremmo in grado di risolvere meglio le scale *maggiori*, mentre non miglioreremmo la capacità di risolvere i k inferiori; aumenteremmo inoltre enormemente il tempo di calcolo del codice. Il modo più corretto per far fronte al dilemma è suggerito dal problema stesso: poiché la dinamica nelle due direzioni avviene su scale differenti, la lunghezza fisica del box di integrazione lungo i due assi deve essere diversa. In particolare l'asse x (longitudinale) deve essere molto più lungo dell'asse y (trasversale); il rapporto tra queste due lunghezze è chiamato *aspect ratio* (r) e deve essere dell'ordine di $\sqrt{\frac{\epsilon^2 AL^2}{C}}$. Tutti i risultati mostrati in questa tesi sono stati ottenuti da simulazioni con aspect ratio uguale a 1/64. Questo corrisponde a un ϵ di circa 0.05 per avere tre modi linearmente instabili, un valore decisamente accettabile.

²Il rapporto A/C è proporzionale a L^{-2} . Risulta quindi che il rapporto k_{banda}/k_{tipico} è dell'ordine di ϵ e perciò molto minore di 1.

Bibliografia

- [1] P.K.Kundu, I.M.Cohen. *Fluid Mechanics* S.Diego Accademic press, (2002)
- [2] U.Frisch, *Turbulence: the legacy of A.N.Kolmogorov*. Cambridge University Press, (1995)
- [3] J.J.Lumley. *Drag reduction by additives*, Ann. Rev. Fl. Mech., **1**, (1969), 367-383
- [4] Oil & Gas Journal, June 10, (1996), 30
- [5] R.H.Nadolink, W.W.Haigh, *Bibliography on skin friction reduction with polymers and other boundary-layer additives*, ASME Appl.Mech.Rev. **48**, (1995), 351-460
- [6] J.J.Lumley. *Drag reduction in two phase and polymer flows*, Phys. Fluids, **20**, (1977), S64-S70
- [7] M.Tabor, P.G.DeGennes, *A cascade theory of drag reduction*, Europhys. Lett., **2** (7), (1986), 519-522
- [8] P.G.DeGennes, *Introduction to polymer dynamics*, Cambridge University Press, (1990)
- [9] R.B.Bird, O.Hassager, R.C.Armstrong, C.F.Curtiss, *Dynamics of polymeric liquids*, Wiley-Interscience, (1987)
- [10] J.G.Oldroyd, *On the formulation of rheological equations of state*, Proc. Roy. Soc. London, A **200**, (1950), 523-541
- [11] E.A.Novikov, *Functionals and the Random-force Method in Turbulence Theory*, Sov. Phys. JETP **47**, (1965), 1919-1926
- [12] C.M.Bender, S.A.Orszag, *Advanced mathematical methods for scientists and engineers*, McGraw-Hill, (1978)
- [13] S.Gama, M.Vergassola, U.Frisch, *Negative eddy viscosity in isotropically forced flow*, J.Fluid Mech., **260**, (1994), 95-126

-
- [14] M.Vergassola, *Chiral non-linearities in forced 2D Navier-Stokes flows*, Europhys. Lett., **24** (1), (1993), 41-45
- [15] J.W.Cahn, J.E.Hilliard, *Free energy of a non uniform system*, J.Chem.Phys., **28**, (1958), 258
- [16] A.A.Nepomniashii, *On stability of secondary flows of a viscous fluid in unbounded space*, Appl.Math.Mech., **40**, (1976), 886
- [17] A.Novick-Cohen, L.A.Segel, *Nonlinear aspects of the Cahn-Hilliard equation*, Physica D, **10**, (1984), 277-298
- [18] Z.S.She, *Metastability and vortex pairing in the Kolmogorov flow*, Phys.Lett.A, **124** (3), (1987), 161-164
- [19] G.I.Sivashinsky, *Weak turbulence in periodic flows*, Physica D, **17**, (1985), 243-255
- [20] S.J.Watson, F.Otto, B.Y.Rubinstein, S.H.Davis, *Coarsening dynamics of the convective Cahn-Hilliard equation*, Physica D, **178**, (2003), 127-148
- [21] U.Frisch, B.Legras, B.Villone, *Large-scale Kolmogorov flow on the beta-plane and resonant wave interactions*, Physica D, **94**, (1996), 36-56
- [22] Y.Pomeau, S.Zaleski, *Wavelength selection in one dimensional cellular structures*, J. de Physique, **42**, (1981), 515
- [23] V.Bertola, B.Meulenbroek, C.Wagner, C.Storm, A.Morozov, W.van Saarloos, D.Bonn, Phys. Rev. Lett. **90**, (2003), 114502
- [24] B.Meulenbroek, C.Storm, V.Bertola, C.Wagner, D.Bonn, W.van Saarloos, Phys. Rev. Lett. **90**, (2003), 024502
- [25] C.Ho, M.M.Denn, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **3**, (1978), 179
- [26] R.Sureshkumar, A.N.Beris, R.A.Handler, Phys. Fluids **9**, (1997), 743
- [27] G.Boffetta, A.Celani, A.Mazzino, *Onset and universality of drag reduction in the turbulent Kolmogorov flow*, J.Fluid Mech., submitted, (2004)
- [28] E.De Angelis, C.M.Casciola, V.S.L'vov, R.Piva, I.Procaccia, *For a comparison between Newtonian and viscoelastic turbulent channel flow in terms of most energetical modes*, Phys. Rev. E **67**, (2003), 056312
- [29] W.H.Press, S.A.Teukolsky, W.T.Vetterling e B.P.Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 90: the Art of Parallel Scientific Computing. Volume 2 of Fortran Numerical Recipes*, Cambridge University Press, (1996)

- [30] D.R.Durran, *Numerical Methods for Wave Equations in Geophysical Fluid Dynamics*, Springer-Verlag, New York, (1999)
- [31] S.Guan, C.-H.Lai, G.W.Wei, *Geometry and boundary control of pattern formation and competition*, *Physica D* **176**, (2003), 19-43
- [32] A.J.Bray, *Theory of phase-ordering kinetics*, *Adv. in Physics* **51**, (2002), 481-587

Elenco delle figure

1	Curva marginale di stabilità nello spazio delle fasi.	9
2	Risultati di simulazioni numeriche dirette del sistema viscoelastico. Il coefficiente di drag diminuisce con l'aumentare del numero di Deborah, il parametro che controlla l'effetto dei polimeri sul flusso. . . .	10
3.1	Diagramma di stabilità lineare del modello Oldroyd-B.	36
3.2	Il valore dei parametri A, B e C al variare del numero di Deborah per $L = V = 1$ e $\eta = 0.3$	39
3.3	Localmente la struttura della perturbazione trasversa del campo di velocità è data dalla (3.37). L'intero campo può essere espresso come somma di soluzioni a tangente iperbolica confinate.	41
3.4	Dinamica Cahn-Hilliard per $r = 64$, $De = 1.4$, $\epsilon = 0.08$. Il modo a crescita lineare massima è $q = 4$. Seguono quindi gli stati metastabili corrispondenti ai modi 3, 2 e 1. Quest'ultimo è lo stato finale stabile che corrisponde al minimo del funzionale di Lyapunov $F[w]$. Per maggiori dettagli sulle simulazioni numeriche si veda l'appendice D. . .	43
3.5	Risultati di una simulazione a $De = 1.4$, $\epsilon = 0.04$. La transizione dal flusso da uno stato con periodicità $q = 2$ a un altro con periodicità $q = 1$ può essere vista come un'annichilazione tra un <i>kink</i> e un <i>antikink</i>	43
3.6	Uno snapshot della velocità longitudinale u del flusso a $t = 10^7$. La dipendenza del flusso da z è concentrata sul modo $k_y = 1$ (e cioè il flusso di Kolmogorov), mentre la perturbazione a grande scala dipendente da X è sul modo $q = 2$ (si confronti con la figura 3.5).	45
3.7	A $t = 4 \cdot 10^7$ la perturbazione, dipendente da X , non ha una ben definita periodicità. Come si vede dalla figura 3.5, il sistema è nel pieno della transizione dallo stato metastabile concentrato su $q = 2$ allo stato finale stabile a $q = 1$	45
3.8	A $t = 5 \cdot 10^7$ tutta l'energia della perturbazione è sul primo modo. È questo lo stato finale su cui si assesta il sistema.	45
3.9	Crescita dei modi $q = 1, \dots, 5$ per $De = 1.4$, $\epsilon = 0.0975$. Nel regime lineare la crescita è chiaramente esponenziale.	47

3.10	Rate di crescita dei modi trasversi k . I dati si riferiscono a una simulazione con $De = 1.4$, $\epsilon = 0.0975$. La curva continua rappresenta la previsione ottenuta attraverso l'analisi lineare a scale multiple (3.39).	47
3.11	Evoluzione temporale dello spettro di energia per i primi modi trasversali. I dati si riferiscono a una simulazione diretta con $r = 1/64$, $De = 1.4$, $\epsilon = 0.0975$.	48
3.12	Evoluzione temporale dello spettro di energia per i primi modi trasversali. I dati si riferiscono a una simulazione dell'equazione di Cahn-Hilliard con $r = 1/64$, $De = 1.4$, $\epsilon = 0.0975$.	49
3.13	Evoluzione temporale dello spettro di energia per i primi modi trasversali. Le curve colorate rappresentano la dinamica dei modi $q = 1, 2, 3$ per una simulazione a $De = 1.4$ e $\epsilon = 0.04$. In nero sono riportate le curve ottenute con una simulazione Cahn-Hilliard con gli stessi parametri, condotta su tempi molto più lunghi fino al raggiungimento dello stato finale stabile.	50
4.1	La suddivisione nelle quattro zone intorno al punto critico P^* .	52
4.2	La scelta (4.9) impone che le derivate prime delle curve (4.4)-(4.5) e $A = 0$ siano uguali.	54
4.3	Scegliendo y superiore al valore critico 0.2241 si investiga la zona di piano linearmente stabile. In figura è riportata la curva che si segue scegliendo $y = 0.5$.	58
4.4	Per $A = B = 1$, $C = 1/2$ e $D = 10/9$ i due kink (generalizzato e non) hanno la stessa altezza.	60
5.1	Il coefficiente di drag f a $Re = 2$, $\eta = 0.3$. Si vede che il drag diminuisce fino a raggiungere il valore $1/Re$ al raggiungimento della marginale di stabilità.	65
5.2	Il coefficiente di drag f in funzione del numero di Reynolds per alcuni valori del numero di Deborah. Poiché i risultati multiscala sono validi solo in prossimità della curva marginale di stabilità possono essere confrontate solo curve con De prossimi. Considerando numeri di Reynolds uguali, il coefficiente di drag decresce con De .	66
5.3	Il coefficiente di drag f per $Re = 2.648$. L'errore sui punti è dell'ordine di grandezza dello spessore dei simboli.	68
5.4	Stato finale della velocità longitudinale.	69
5.5	Crescita di cristalli bidimensionali con cascata aritmetica.	70