"Alexandru Ioan Cuza" University of Iaşi
Faculty of Mathematics

Qualitative and quantitative analysis for the mathematical models of phase separation and transition. Aplications

Habilitation Thesis

Author: **Costică MOROŞANU**

IAŞI, 2015

1. Abstract

Last years have shown a great interest in studying applied mathematics problems. One of the most important classes of such problems is the class of systems with phase change (*systems with free boundary*) encountered in numerous problems of *life sciences* including material sciences (phase separation in alloys, for instance), biology, biochemistry, geology, economics, physics (melting ice, crystal formation, diffusion of oxygen in an absorbent tissue, solidification in continuous casting, etc.), as well as the image processing. From mathematical point of view, a *free boundary problem* can be considered as a nonlinear parabolic equation with limit values, for which is unknown the solution and its field.

In mathematics literature, for the phenomenon of solidification are known more mathematical models designed to describe the *free boundary*: the Stefan problem, the *phase-field transition system* (Caginalp's model), for example. Among the papers and monographs devoted to the study of *free boundary problems* of Stefan type, we recall those signed by Arnăutu and Neittaanmäki [8], Barbu [12]-[16], Barbu and Barron [18], Lions [103], Lions and Magenes [104], Saguez [155] and Tiba [164].

The phase-field transition system was introduced in literature by Caginalp [42]. This model has been established as an extension (a refinement) of the classical two phase Stefan problem,introducing a so-called *phase function*, to capture the effects of *surface tension*, *supercooling*, *superheating*, etc. The phase-field transition system, in the form in which it was introduced by Caginalp, consists in the following two nonlinear differential equations of parabolic type ($Q = [0, T] \times \Omega$):

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}u + \frac{\ell}{2}\frac{\partial}{\partial t}\varphi = k\Delta u + f(t,x) \\ \tau\frac{\partial}{\partial t}\varphi = \xi^2\Delta\varphi + \frac{1}{2a}(\varphi - \varphi^3) + 2u + g(t,x) \end{cases} \quad \text{in } Q, \tag{1}$$

subject to the boundary conditions

$$u = u_\partial(x), \qquad \varphi = \varphi_\partial(x) \qquad x \in \partial\Omega, \tag{2}$$

and the initial conditions

$$u(0,x) = u_0(x), \qquad \varphi(0,x) = \varphi_0(x) \qquad x \in \Omega, \tag{3}$$

where u, φ are the unknown functions, $f = g = 0$, and $T, \Omega, \partial\Omega$, ℓ, k, τ, ξ, a, $u_\partial, \varphi_\partial$, u_0, φ_0 will be described in detail in what follows.

The aim of this thesis is to present a summary of the most notable achievements of the author, obtained after 1998, the year of his doctoral thesis supporting, as well as a detailed outline of possible future developments of his academic career. Therefore, the work is conceived on the basis of the recent results of the author (alone or in collaboration), which can be found in the notes Benincasa and Moroşanu [28], Benincasa, Favini and Moroşanu [31], [32], Miranville and Moroşanu [109], [110], Moroşanu [124], [125], Moroşanu and Croitoru [126], Moroşanu and Motreanu [132], [134], Moroşanu and Trenchea [136], Moroşanu and Wang [137] and it consists in a four chapters and bibliography.

The topic of this thesis cover the recent issues related to mathematical models in phase separation (and also in phase transition), such as: generalizations of the Allen-Cahn equation and generalizations of the Caginalp phase-field system. For these nonlinear equation (system), endowed with a *regular potential* or a *general regular potential*, subject to the most relevant boundary conditions, namely: non-homogeneous Neumann boundary conditions, nonlinear and

non-homogeneous dynamic boundary conditions, etc. results concerning the existence, uniqueness, regularity and estimates of the solution, has been established in Chapter 3, sub-sections 3.2.1 and 3.2.2 (**Proposition 2.1A**, **Proposition 2.1B**, **Theorem 2.1C**, **Theorem 2.2A**, **Theorem 2.2B**, **Theorem 2.2C**). Basic tools in this approach are the Leray-Schauder degree theory (see sub-section 3.2.0), the L_p-theory of linear parabolic equations, properties of the Nemytskij operator, and a priori estimates in $L^p(Q)$ and $L^p(\Sigma)$.

A special attention was paid to application of the theoretical results. In this sense we point out that the kinds of non-homogeneous boundary conditions considered here enable the use of phase transition models in modelling of heat transfer from the surface of product to the environment, when we assume that the heat is extracted by convection, conduction or radiation (in the continuous casting process, for instance).

On the other hand, the content of this thesis is dedicated to the approximation (from theoretical and numerical point of view) of nonlinear (Allen-Cahn) equation $(1)_2$ in the presence of different types of potentials and boundary conditions. The main results obtained are included in section 3.3: **Theorem 3.2** and **Theorem 3.3**. The convergence of each *fractional steps scheme* is proved by different methods: an abstract approximation result (Theorem 3.1) and on the basis of compactness (in particular Helly-Foias theorem). Numerical algorithms to compute the approximate solution are presented in the end of the subsections 3.3.1 and 3.3.2: **ALGFRAC_Allen-Cahn_Eq** and **ALGFRAC_Allen-Cahn_NonHomDBC**, respectively.

Some types of optimal control problems are introduced and analyzed in section 3.4 of chapter 3:

- a boundary optimal control problem governed by phase-field transition system;
- a state constraint optimal control problem governed by phase-field transition system;
- a periodic optimal control problem governed by density of a pest population.

Necessary optimality conditions (Pontryagin's principle) for such sort of problems are given by **Theorem 4.1**, **Theorem 4.2** and **Theorem 4.3**, respectively.

Another major theme of this thesis, section 3.5, refers to the implementation of efficient numerical algorithms to compute:

- the approximate solution to the phase-field system in 2D by fractional steps method (**frac_fem2D**);
- the optimal control of problem (P_S), algorithm **SCPHT-2D**;
- the bang-band (sub)optimal control of problem (P), algorithm **PPBC**;

We complete this paper with a detailed sketch of the plan for scientific and academic career development, and the main directions for the implementation of the expected results to be obtained by the author (chapter 4). An enlarged bibliography, closely related to topics addressed in chapters 3 and 4, ends the Part II of this thesis.

A phase transition is the transformation of a thermodynamic system from one phase or state of matter to another one by heat transfer. The term is most commonly used to describe transitions between solid, liquid and gaseous states of matter, and, in rare cases, plasma. A phase of a thermodynamic system and the states of matter have uniform physical properties. During a phase transition of a given medium certain properties of the medium change, often discontinuously, as a result of the change of some external condition, such as temperature, pressure, or others. For example, a liquid may become gas upon heating to the boiling point, resulting in an abrupt change in volume.

2. Rezumat

În ultimii ani se manifestă un interes tot mai sporit în studiul problemelor de matematici aplicate. Una dintre cele mai importante clase a unor astfel de probleme este clasa sistemelor cu schimbare de fază (*sisteme cu frontieră liberă*), întâlnite în numeroase probleme de ştiinţele vieţii incluzând ştiinţele materialelor (separarea fazelor în aliaje, de exemplu), biologie, biochimie, geologie, economie, fizică (topirea gheţii, formarea cristalelor, difuzia oxigenului într-un ţesut absorbant, solidificarea în turnarea continuă , etc.), precum şi procesarea imaginilor. Din punct de vedere matematic, o *problemă cu frontieră liberă* poate fi privită ca fiind o ecuaţie parabolică neliniară cu valori la limită, pentru care necunoscută este atât soluţia ecuaţiei cât şi domeniul acesteia.

În literatura matematică, corespunzător fenomenului de solidificare, sunt cunoscute mai multe modele matematice, menite să descrie *frontiera liberă*: problema Stefan, *sistemul tranziţiei de fază* (modelul Caginalp), de exemplu. Dintre lucrările şi monografiile consacrate studiului *problemelor cu frontieră liberă* de tip Stefan, amintim pe cele semnate de Arnăutu şi Neittaanmäki [8], Barbu [12]-[16], Barbu şi Barron [18], Lions [103], Lions şi Magenes [104], Saguez [155] şi Tiba [164].

Sistemul tranziţiei de fază, a fost introdus în literatura de Caginalp [42]. Acest model este recunoscut ca fiind o extensie (o rafinare) a problemei Stefan clasice în două faze, introducând o aşa numită *funcţie de fază*, destinată surprinderii efectelor tensiunii de suprafaţa, suprarăcirii, supraîncălzirii, etc. Sistemul tranziţiei de fază, sub forma introdusă de Caginalp, constă din următoarele două ecuaţii diferenţiale neliniare de tip parabolic ($Q = (0, T) \times \Omega$):

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}u + \frac{\ell}{2}\frac{\partial}{\partial t}\varphi = k\Delta u + f(t,x) \\ \tau\frac{\partial}{\partial t}\varphi = \xi^2\Delta\varphi + \frac{1}{2a}(\varphi - \varphi^3) + 2u + g(t,x) \end{cases} \quad \text{in } Q, \tag{1}$$

cu condiţii la limită

$$u = u_\partial(x), \qquad \varphi = \varphi_\partial(x) \qquad x \in \partial\Omega, \tag{2}$$

şi condiţii iniţiale

$$u(0,x) = u_0(x), \qquad \varphi(0,x) = \varphi_0(x) \qquad x \in \Omega, \tag{3}$$

unde u, φ sunt funcţiile necunoscute, $f = g = 0$, şi $T, \Omega, \partial\Omega, \ell, k, \tau, \xi, a, u_\partial, \varphi_\partial, u_0, \varphi_0$ vor fi descrise în detaliu în cele ce urmează.

Este scopul prezentei teze acela de a prezenta un rezumat al celor mai notabile realizări ale autorului, obţinute după 1998 (anul susţinerii tezei sale de doctorat), precum şi un plan detaliat al posibilelor dezvoltări ulterioare ale carierei academice. Prin urmare, lucrarea este concepută pe baza rezultatele recente ale autorului (singur sau n colaborare), care pot fi gasite n notele Benincasa şi Moroşanu [28], Benincasa, Favini şi Moroşanu [31], [32], Miranville şi Moroşanu [109], [110], Moroşanu [124], [125], Moroşanu şi Croitoru [126], Moroşanu şi Motreanu [132], [134], Moroşanu şi Trenchea [136], Moroşanu şi Wang [137], şi constă din 4(patru) capitole şi bibliografie.

Subiectul acestei teze acopera tematici recente legate de modelele matematice ale separării fazelor (precum şi ale tranziţiei de fază), cum ar fi: generalizări ale ecuaţiei Allen-Cahn şi generalizări ale sistemului tranziţiei de faza (Caginalp). Pentru această ecuaţie (sistem) neliniară, înzestrat cu un *potenţial regulat* sau un *potenţial regulat general*, în prezenţa condiţiilor la limită cele mai relevante, anume: condiţii la limită Neumann neomogene, condiţii la limită dinamice neliniare şi neomogene, etc. au fost stabilite în capitolul 3, sub-secţiunile 3.2.1 şi 3.2.2 rezultate privind existenţa, unicitatea, regularitatea şi estimări ale soluţiei (**Propozitia 2.1A**, **Propozitia 2.1B**, **Teorema 2.1C**, **Teorema 2.2A**, **Teorema 2.2B**, **Teorema 2.2C**). Instrumentele de bază în această abordare sunt teoria gradului Leray-Schauder (a se vedea sub-secţiunea 3.2.0), L_p teoria ecuaţiilor parabolice liniare, proprietăţi ale operatorului Nemytskij şi estimări a priori în $L^p(Q)$, $L^p(\Sigma)$.

O atenţie deosebită a fost acordată aplicării rezultatelor teoretice. În acest sens subliniem faptul că tipurile neomogene de condiţii la limită considerate aici permit utilizarea modelelor tranziţiei de fază în modelarea transferului de căldură de la suprafaţa unui produs către mediul înconjurator, atunci când presupunem că extragerea căldurii este făcută prin convecţie, conducţie sau radiaţie (în procesul de turnare continuă, de exemplu).

Pe de alta parte, conţinutul acestei teze este dedicat aproximării (din punct de vedere teoretic şi numeric) ecuaţiei neliniare (Allen-Cahn) $(1)_2$ în prezenţa diferitelor tipuri de potenţiale şi condiţii la limită. Principalele rezultate obţinute sunt incluse n secţiunea 3.3: bf Teorema 3.2 şi bf Teorema 3.3. Convergenţa fiecărei *scheme de tip paşi fracţionari* este demonstrată prin metode diferite: un rezultat abstract de aproximare (Teorema 3.1) şi pe baza de compactitate (în special teorema Helly-Foias). Algoritmi numerici pentru a calcula soluţia aproximativa sunt prezentaţi la sfârşitul subsecţiunilor 3.3.1 şi 3.3.2: **ALGFRAC_Allen-Cahn_Eq** şi **ALGFRAC_Allen-Cahn_NonHomDBC**, respectiv.

Câteva tipuri de probleme de control optimal sunt introduse şi analizate în secţiunea 3.4 a capitolului 3:

- o problema de control optimal la frontieră guvernată de sistemul tranziţie de fază;
- o problemă de control optimal cu restricţii de stare guvernată de sistemul tranziţie de fază;
- o problemă periodică de control optimal guvernată de densitatea unei populaţii de dăunători.

Condiţii necesare de optimalitate (principiul lui Pontryagin) pentru astfel de probleme sunt furnizate de bf Teorema 4.1, bf Teorema 4.2 şi bf Teorema 4.3, respectiv.

O altă tema importantă a acestei teze, secţiunea 3.5, referă la implementarea de algoritmi numerici eficienti pentru calculul:

- soluţiei aproximative a sistemului tranziţiei de fază în 2D prin metoda paşilor fracţionari (**frac_fem2D**);
- controlului optimal al problemei (P_S), algoritmul **SCPHT-2D**;
- controlului bang-band (sub)optimal al problemei (P), algoritmul **PPBC**;

Completăm această lucrare cu o schiţă detaliată asupra planului de dezvoltare a carierei ştiinţifice şi academice, precum şi a principalelor direcţii de aplicare a rezultatelor scontate a fi obţinute de autor (capitolul 4). O bibliografie extinsă, strâns legată de tematicile abordate în capitolele 3 si 4, încheie partea a II-a a acestei teze.