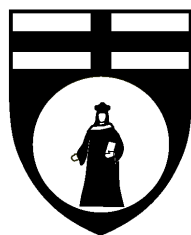


UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI GENOVA

SCUOLA DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E
NATURALI

CORSO DI LAUREA MAGISTRALE IN
MATEMATICA

Curriculum Matematica Applicata



*Equazioni ellittiche quasilineari e applicazioni agli
elettrolizzatori a membrana a scambio anionico*

CANDIDATO
Keylor Bazzotti

RELATORE
Matteo Santacesaria

CORRELATORE
Flaviana Iurlano

ANNO ACCADEMICO 2025-2026

Introduzione

In questa tesi si studiano le equazioni alle derivate parziali ellittiche e una loro applicazione nel modello multifisico di una cella elettrolitica ideale.

L'idrogeno è da tempo considerato un elemento centrale nelle strategie energetiche globali [7, 13, 12, 8, 2]. Sebbene non sia una fonte energetica primaria, ma un vettore energetico, il suo ruolo è cruciale. L'idrogeno immagazzina energia per un periodo di tempo e può rilasciarla per alimentare processi o dispositivi, come le celle a combustibile, che convertono l'idrogeno in energia elettrica con l'unica emissione di acqua. A differenza delle fonti energetiche primarie (come il sole o il vento), i vettori come l'idrogeno non esistono in natura in una forma immediatamente utilizzabile, ma devono essere prodotti. La loro importanza risiede nella capacità di stoccare grandi quantità di energia rinnovabile in eccesso, risolvendo il problema dell'intermittenza delle fonti come l'eolico e il solare e garantendo la stabilità della rete elettrica.

Attualmente però la maggior parte dell'idrogeno globale viene estratta da combustibili fossili attraverso processi inquinanti che rilasciano ingenti quantità di anidride carbonica. In questo scenario, l'idrogeno "verde" rappresenta la forma più pulita e sostenibile [16]: viene prodotto attraverso l'elettrolisi dell'acqua, alimentata esclusivamente da fonti rinnovabili (come il solare, l'eolico e l'idroelettrico), senza emissioni di anidride carbonica. È considerato la soluzione ideale per un futuro a basse emissioni, sebbene oggi i costi di produzione siano ancora elevati a causa del prezzo delle fonti rinnovabili e delle tecnologie di elettrolisi.

Oltre alla funzione di accumulo energetico, l'idrogeno verde può contribuire alla decarbonizzazione di settori difficili da elettrificare, oggi fortemente dipendenti dai combustibili fossili. Nel settore dei trasporti pesanti (camion, treni, navi e aerei), i veicoli a celle a combustibile alimentati a idrogeno offrono autonomie e tempi di rifornimento molto più rapidi rispetto alla ricarica delle batterie, rendendoli una valida alternativa. Nell'industria, l'idrogeno è già una materia prima essenziale (ad esempio per la produzione di ammoniaca e metanolo) e in prospettiva potrà sostituire il carbone come agente riducente nella produzione di acciaio, abbattendo drasticamente le emissioni di CO_2 del settore siderurgico, che rappresenta uno dei principali emettitori a livello globale.

Il cuore della produzione dell'idrogeno verde è la cella elettrolitica, un dispositivo che utilizza energia elettrica per guidare una reazione chimica non spontanea: la scissione dell'acqua (elettrolisi) in ossigeno e idrogeno [6, 5, 10, 14]. È composta da tre elementi principali: un anodo, un catodo e un elettrolita che li separa. Entrambi gli elettrodi sono immersi in un elettrolita e collegati a una sorgente di corrente continua. Nella cella elettrolitica, l'elettrolita permette il passaggio della corrente e il movimento degli ioni tra l'anodo e il catodo, completando il circuito elettrico.

Tra le tecnologie di elettrolisi più avanzate per la produzione di idrogeno verde troviamo

le celle a membrana a scambio protonico, comunemente note come celle PEM (Proton Exchange Membrane), che utilizzano un elettrolita solido costituito da una sottile membrana polimerica.

Le celle elettrolitiche tradizionali invece, note come celle alcaline, si basano su un elettrolita liquido (tipicamente una soluzione acquosa di idrossido di potassio) e sono una tecnologia consolidata. Sebbene siano robuste e a basso costo, presentano limiti di efficienza e ingombro a causa della natura corrosiva dell'elettrolita.

Un tipo emergente di cella elettrolitica è la cella a membrana a scambio anionico (AEM - Anion Exchange Membrane) [17, 9, 11]. In questo dispositivo, gli ioni negativi (anioni, come gli ioni idrossido OH^-) attraversano una membrana a scambio anionico. La membrana separa l'anodo dal catodo, consentendo la conduzione degli anioni e impedendo il mescolamento dei gas prodotti, il che garantisce un'elevata purezza dell'idrogeno e riduce il rischio di miscelazione esplosiva con l'ossigeno. Le celle AEM suscitano particolare interesse perché combinano i vantaggi delle celle alcaline tradizionali (bassi costi dei materiali) e delle celle PEM (design compatto e produzione di gas puri).

Il futuro delle celle AEM è legato alla capacità della ricerca di migliorare la stabilità e la conducibilità delle membrane, che rimangono un'area di sviluppo cruciale, e di sviluppare catalizzatori più resistenti. Il superamento di queste sfide potrebbe portare le celle AEM a diventare una delle tecnologie più convenienti per la produzione di idrogeno verde su larga scala, con potenziali applicazioni sia per la produzione distribuita (ad esempio, per stazioni di rifornimento o comunità) sia per l'integrazione nei futuri hub energetici alimentati da rinnovabili. L'obiettivo di questa tesi è di descrivere in modo rigoroso il comportamento di tale sistema, affrontando un problema intrinsecamente matematico che richiede strumenti sofisticati di analisi funzionale. In particolare, siamo riusciti a dimostrare esistenza e unicità di equazioni che modellizzano la multifisica interna di una cella elettrolitica, e simulato numericamente alcuni esempi di soluzioni.

Il **Capitolo 1** costituisce l'impianto teorico e metodologico del lavoro, richiamando le nozioni preliminari di analisi funzionale essenziali per lo studio delle equazioni a derivate parziali ellittiche. Dopo una classificazione delle proprietà geometriche dei domini di calcolo, vengono introdotti i concetti fondamentali di distribuzione e derivata debole, i quali motivano l'utilizzo e la definizione degli spazi di Sobolev. Vengono inoltre presentati strumenti tecnici cruciali, quali l'operatore di traccia per poter formalizzare la restrizione delle funzioni al bordo del dominio (fondamentale per le condizioni al contorno), la caratterizzazione dello spazio duale $H^{-1}(\Omega)$, e risultati classici di immersione e compattezza come il Teorema di Rellich e la disuguaglianza di Poincaré. Il capitolo culmina presentando i teoremi cardine per la successiva analisi dei problemi differenziali: il Teorema di Lax-Milgram, essenziale per garantire esistenza e unicità in formulazione variazionale lineare, e i teoremi di punto fisso (in particolare il Teorema di Leray-Schauder), indispensabili per estendere l'analisi a problemi e modelli non lineari.

Il **Capitolo 2** è dedicato allo studio rigoroso delle equazioni alle derivate parziali ellittiche del secondo ordine, procedendo dal caso lineare a quello quasi-lineare. Nella prima parte del capitolo vengono analizzati i classici problemi al contorno di Dirichlet e di Neumann per operatori uniformemente ellittici. Attraverso il passaggio alla formulazione variazionale debole, si dimostrano l'esistenza, l'unicità e la stabilità delle soluzioni sfruttando il Teorema di Lax-Milgram e le necessarie condizioni di compatibilità geometriche e di flusso. Nella

seconda parte, l'attenzione si sposta sulle equazioni quasi-lineari, la cui natura richiede un apparato matematico più sofisticato. A tale scopo, vengono introdotti gli spazi di Hölder e richiamati i principali risultati di regolarità della teoria di Schauder. Il capitolo si chiude con un risultato fondamentale: la dimostrazione dell'esistenza della soluzione per il problema di Dirichlet nel caso quasi-lineare, ottenuta mediante l'applicazione del teorema di punto fisso di Leray-Schauder. Questo traguardo teorico pone le basi indispensabili per poter affrontare e risolvere il modello termo-chimico accoppiato che sarà oggetto dei capitoli successivi.

Il **Capitolo 3** entra nel vivo dell'applicazione pratica, presentando la modellizzazione matematica di una cella elettrolitica a membrana a scambio anionico (AEM) per la produzione di idrogeno verde. Dopo un'introduzione al contesto energetico e al funzionamento fisico del dispositivo, il capitolo deriva rigorosamente il modello multifisico a partire dalle equazioni di Maxwell e dalla legge di Fick. Il risultato è un sistema accoppiato di equazioni alle derivate parziali che governa la distribuzione della temperatura, delle concentrazioni delle specie chimiche e del potenziale elettrico interno. La parte centrale del capitolo applica l'impianto teorico precedentemente costruito per studiare la buona posizione di tale sistema: sfruttando la teoria classica per i problemi lineari e il teorema di punto fisso di Leray-Schauder per gestire l'accoppiamento tra le equazioni, viene dimostrata rigorosamente l'esistenza (e in opportuni casi l'unicità) delle soluzioni deboli. Questa rigorosa analisi matematica viene condotta sia in scenari semplificati che nel caso quasi-lineare più generale, in cui i coefficienti di diffusione e i termini sorgente dipendono a loro volta dalla temperatura e dalle concentrazioni, saldando così in modo definitivo la teoria astratta alla realtà fisica del modello.

Infine, il **Capitolo 4** illustra gli esperimenti numerici condotti per risolvere il sistema termo-chimico accoppiato di equazioni alle derivate parziali. La simulazione analizza il trasporto di materia e calore all'interno di una sezione bidimensionale di una cella elettrolitica alcalina. L'implementazione numerica si avvale del metodo alle differenze finite (FDM) su una griglia uniforme, risolvendo il trasporto di massa (ioni idrossido) tramite condizioni al contorno di Neumann e il bilancio termico mediante condizioni di Dirichlet. Per gestire la dipendenza non lineare della temperatura all'interno del sistema, è stato sviluppato e implementato un apposito algoritmo iterativo. I risultati delle simulazioni dimostrano l'ottima stabilità computazionale dell'algoritmo sviluppato. Tuttavia, la successiva analisi parametrica – che ha incluso l'introduzione di gradienti termici trasversali e l'aumento della portata del fluido – ha fatto emergere i limiti fisici dell'attuale formulazione matematica puramente conduttiva. Nello specifico, l'assenza di un termine di convezione termica porta il sistema a registrare surriscaldamenti irrealistici dovuti all'effetto Joule nel *bulk* dell'elettrolita, calore che non può essere efficacemente smaltito. Lo studio si conclude quindi dimostrando in modo rigoroso la necessità di espandere il modello differenziale introducendo il trasporto convettivo, passaggio fondamentale per simulare fedelmente le strategie di mitigazione termica nei reattori reali.

Questa tesi è basata prevalentemente sul libro *Equazioni a derivate parziali: Metodi, modelli e applicazioni* [15] e l'articolo [1].

Indice

Introduzione	1
Capitolo 1. Nozioni preliminari	7
1. Cenni di geometria	7
2. Distribuzioni e derivate deboli	8
3. Spazi di Sobolev	9
4. La traccia di un operatore lineare	10
4.1. Localizzazione	10
4.2. Riduzione ad un semispazio	12
5. Duale di $H_0^1(\Omega)$	13
6. Teorema del punto fisso di Leray-Schauder	16
7. Disuguaglianza di Poincaré	17
8. Teorema di Lax-Milgram	19
9. Questioni di regolarità	20
10. Teorema di Ascoli-Arzelà	20
Capitolo 2. Richiami sulle equazioni ellittiche	21
1. Equazioni lineari	21
1.1. Problema di Dirichlet	22
1.1.1. Formulazione variazionale	22
1.2. Problema di Neumann	24
1.2.1. Formulazione variazionale	24
1.2.2. Condizione di compatibilità	25
2. Equazioni quasi-lineari	26
Capitolo 3. Modello matematico di un elettrolizzatore	29
1. Motivazioni	29
1.1. La cella elettrolitica	30
1.1.1. Celle a membrana a scambio anionico (AEM)	30
2. Derivazione	31
2.1. Sorgenti	32
2.2. Condizioni al bordo: input e misurazioni	33
3. Esistenza e unicità della soluzione	33
Capitolo 4. Esperimenti numerici	41
1. Implementazione	41
1.1. Descrizione dei Parametri di Input	41
1.2. Algoritmo principale	42
1.3. L'equazione principale	42

1.4. La derivata normale	44
2. Risultati numerici	44
2.1. Scelta dei parametri e discussione	44
Condizioni di compatibilità	45
Potenziale in-plane (ϕ):	46
2.2. Configurazione standard	46
2.3. Test 1: Introduzione di un Gradiente Termico Trasversale	48
2.4. Test 2: Aumento della Portata e Limiti del Modello Conduttivo	49
3. Conclusioni	52
Appendice A. Altri dettagli di implementazione	55
1. Funzioni ausiliarie	55
1.1. Function Neumann	55
1.2. Function Dirichlet	55
1.3. Function Divergenza	57
Appendice. Bibliografia	59

CAPITOLO 1

Nozioni preliminari

In questo capitolo verranno elencate le definizioni principali di analisi funzionale e alcuni teoremi per affrontare i capitoli successivi.

1. Cenni di geometria

In questa sezione elenchiamo definizioni e risultati geometrici di base per comprendere i capitoli successivi.

DEFINIZIONE 1. *Un insieme aperto e connesso è detto **dominio**.*

DEFINIZIONE 2. *Siano $n, k \in \mathbb{N}$, con $n \geq 2$ e $k \geq 1$.*

*Si dice che $\Omega \in \mathbb{R}^n$ è un **dominio di classe** C^k se per ogni punto $\mathbf{x} \in \partial\Omega$ esistono*

- *un sistema di coordinate $(y_1, \dots, y_n) = (\mathbf{y}', y_n)$ con origine in $\mathbf{x}$;*
- *una funzione $\phi : N \subset \mathbb{R}^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}$, con N intorno di $\mathbf{y}' = \mathbf{0}'$, tale che*
 - (1) $\phi \in C^k(N)$ e $\phi(\mathbf{0}') = 0$
 - (2) $\partial\Omega \cap B(\mathbf{x}) = \{(\mathbf{y}', y_n) : y_n = \phi(\mathbf{y}'), \mathbf{y}' \in N\}$;
 - (3) $\Omega \cap B(\mathbf{x}) = \{(\mathbf{y}', y_n) : y_n > \phi(\mathbf{y}'), \mathbf{y}' \in N\}$.

*Le coppie (ϕ, N) sono dette **carte locali**.*

NOTAZIONE 1. *Dato $n \in \mathbb{N}$, con $n \geq 2$, denoteremo*

$$\mathbb{R}_+^n = \{(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n : x_n > 0\}.$$

OSSERVAZIONE 1. *Siano (ϕ, N) una carta locale e*

$$\begin{aligned} \Phi : N \times \mathbb{R} &\rightarrow \mathbb{R}_+^n \\ (\mathbf{y}', y_n) &\mapsto (\mathbf{z}', z_n) = (\mathbf{y}', y_n - \phi(\mathbf{y}')). \end{aligned}$$

Si osserva che la funzione Φ trasforma $\Omega \cap B(\mathbf{x})$ in un sottoinsieme aperto del semispazio $z_n > 0$ e appiattisce $\partial\Omega \cap B(\mathbf{x})$ in un sottoinsieme dell'iperpiano $z_n = 0$.

DEFINIZIONE 3. *Diciamo che un dominio è **Lipschitziano** se nella Definizione 2 le funzioni ϕ sono Lipschitziane o, equivalentemente, le trasformazioni Φ indotte dalle carte locali sono bi-Lipschitziane, ossia se Φ e Φ^{-1} sono Lipschitziane.*

NOTAZIONE 2. *Se la chiusura di un insieme A è compatta in un insieme B , allora adotteremo la seguente notazione:*

$$A \subset\subset B$$

*e diremo che A ha **chiusura compatta** in B .*

DEFINIZIONE 4. *Un insieme A è detto **precompatto** in X se $\overline{A}$ è compatto in X .*

TEOREMA 1 (Ascoli-Arzelà). Sia K un sottoinsieme compatto di uno spazio metrico (X, d) . Un sottoinsieme $F \subset C^0(K)$ è relativamente compatto se e solo se sono soddisfatte le seguenti due condizioni:

- (1) **Uniforme limitatezza**: Per ogni funzione $f \in F$, esiste una costante M tale che per ogni $x \in K$, $|f(x)| \leq M$.
- (2) **Equicontinuità**: Per ogni $\epsilon > 0$, esiste un $\delta > 0$ tale che per ogni funzione $f \in F$ e per ogni coppia di punti $x, y \in K$ con $d(x, y) < \delta$, si ha $|f(x) - f(y)| < \epsilon$.

2. Distribuzioni e derivate deboli

In questa sezione introduciamo le distribuzioni per poter estendere il concetto di derivata. L'obiettivo è cercare possibili soluzioni a un problema ellittico anche fuori dallo spazio delle funzioni lisce.

NOTAZIONE 3. Dato $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$, con $\alpha_i \in \mathbb{N}^*$ $i = 1, \dots, n$, si denota

$$D^\alpha = \frac{\partial^{\alpha_1}}{\partial x_1^{\alpha_1}} \cdots \frac{\partial^{\alpha_n}}{\partial x_n^{\alpha_n}}$$

una generica derivata di ordine

$$|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_n.$$

Il vettore α è detto **multiindice**.

Siano $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$, e Ω un dominio in $\mathbb{R}^n$ e si consideri lo spazio di funzioni

$$C_0^\infty(\Omega) = \{\phi : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \text{supp}(\phi) \text{ compatto, } \sup_{\mathbf{x} \in \Omega} |\phi(\mathbf{x})| < +\infty\}.$$

I suoi elementi si chiamano **funzioni test**.

Si dota $C_0^\infty(\Omega)$ di una topologia τ definita in base alla convergenza che induce.

DEFINIZIONE 5. Siano $\{\phi_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subset C_0^\infty(\Omega)$ e $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$. Si dice che $\phi_k \rightarrow \psi$ in $C_0^\infty(\Omega)$ se

- (1) esiste un compatto $K \subset \Omega$ che contiene i supporti di tutte le ϕ_k ;
- (2) $D^\alpha \phi_k \rightarrow D^\alpha \psi$ uniformemente in Ω per ogni α multiindice.

Si dimostra che il limite così definito, se esiste, è unico. Si considera dunque lo spazio

$$D(\Omega) = (C_0^\infty(\Omega), \tau).$$

DEFINIZIONE 6. • Dato H spazio di Hilbert, si definisce **duale di H** (e si indica H^*) lo spazio

$$H^* = \{L : H \rightarrow \mathbb{R} \mid L \text{ è lineare e continuo}\},$$

dotato della seguente norma

$$\|L\|_{H^*} = \sup_{\|x\|_H=1} |Lx|.$$

- Si definisce **distribuzione** un qualsiasi elemento di $D(\Omega)^*$.

Si osserva che ad ogni $F \in L^2(\Omega)$ corrisponde il funzionale

$$L_F(\phi) = \int_{\Omega} F(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

D'ora in avanti utilizzeremo le distribuzioni di tale forma e, con abuso di notazione, identificheremo la distribuzione L_F con F . Distribuzioni siffatte generalizzano il concetto di prodotto scalare e pertanto l'azione $L_F(\phi)$ di un elemento $L \in H^*$ su $\phi \in H$ verrà denotata

$$\langle F, \phi \rangle.$$

Si osserva che l'integrale ha perfettamente senso anche per $F \in L^1_{loc}(\Omega)$.

DEFINIZIONE 7. Dato $F \in D(\Omega)^*$, si definisce **derivata debole** di F la distribuzione G che soddisfa

$$\langle G, \phi \rangle = - \left\langle F, \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right\rangle \in D(\Omega)^*, \quad \forall \phi \in D(\Omega).$$

Tale definizione ha senso in quanto $\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \in D(\Omega)$ e dunque d'ora in avanti si denoterà $\frac{\partial F}{\partial x_i} = G$.

3. Spazi di Sobolev

In questa sezione elenchiamo gli spazi funzionali dove cercheremo la soluzione di un problema ellittico. Alcuni di essi sono inclusi in altri ma ne diamo la definizione più specifica per comodità.

Siano adesso $k \in \mathbb{N}$, $s > 0$ e α multiindice. Si definiscono i seguenti spazi

- $W^{k,p}(\Omega) = \{f \in L^p(\Omega) : D^\alpha f \in L^p(\Omega) \text{ per ogni } |\alpha| \leq k\}.$

OSSERVAZIONE 2. Si osserva che in tale definizione la derivata è richiesta in $L^p(\Omega)$. La si può definire grazie alla densità di $D(\Omega)$: ogni elemento di $L^p(\Omega)$ o è un elemento di $D(\Omega)$ o è limite di una successione di elementi di $D(\Omega)$.

Si dota della seguente norma:

$$\|f\|_{W^{k,p}(\Omega)} = \sum_{|\alpha|=0}^k \|D^\alpha f\|_{L^p(\Omega)}.$$

- $H^k(\Omega)$ denota lo spazio $W^{k,2}(\Omega)$, dotato del seguente prodotto scalare:

$$\langle f, g \rangle_{H^k(\Omega)} = \sum_{|\alpha|=0}^k \int_{\Omega} D^\alpha f(\mathbf{x}) D^\alpha g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

- $W^{s,p}(\Omega) = \left\{ f \in W^{\lfloor s \rfloor, p}(\Omega) : \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{|f(x) - f(y)|^p}{|x - y|^{n + (s - \lfloor s \rfloor)p}} dx dy < +\infty \right\}$
dotato della seguente norma:

$$\|f\|_{W^{s,p}(\Omega)}^p = \|f\|_{W^{\lfloor s \rfloor, p}(\Omega)}^p + \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{|f(x) - f(y)|^p}{|x - y|^{n + (s - \lfloor s \rfloor)p}} dx dy.$$

- quando $p = 2$, si dimostra che

$$H^s(\mathbb{R}^n) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) : (1 + |\cdot|)^{s/2} \hat{f}(\cdot) \in L^2(\mathbb{R}^n)\}.$$

Esso è dotato della seguente norma:

$$\|f\|_{H^s(\mathbb{R}^n)} = \|(1 + |\cdot|)^{s/2} \hat{f}(\cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}.$$

- Lo spazio $W_0^{s,p}(\Omega)$ denota la chiusura di $D(\Omega)$ in $W^{p,s}(\Omega)$. Questo spazio permette di lavorare con le condizioni al contorno di un problema differenziale. Si osserva però che le curve hanno misura nulla secondo Lebesgue, per cui non ha senso, a priori, parlare di "restrizione a una curva" di una funzione L^2 . Nella prossima sezione se ne spiegherà dunque il significato.

Per densità, si estende il dominio a $L^2(\Omega)$ e si dimostra che

$$W_0^{s,p} = \{f \in W^{s,p} : f|_{\partial\Omega} = 0\}.$$

- Lo spazio $W^{-s,p}$ denota il duale di $W_0^{s,p}$.

4. La traccia di un operatore lineare

In questa sezione si cerca di dare significato a uno spazio di Sobolev definito su una curva.

Dopo aver fornito la definizione di mollificatore, tratteremo i concetti di *localizzazione* e *riduzione ad un semispazio* per poter dimostrare il Teorema 2.

4.1. Localizzazione.

DEFINIZIONE 8. Si definisce **mollificatore** una funzione $\rho : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tale che

- $\rho \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$;
- $\text{supp}(\rho) \subset \overline{B_1(\mathbf{0})}$;
- $\rho \geq 0$;
- $\int_{\mathbb{R}^n} \rho = 1$.

ESEMPIO 1. Si consideri la funzione

$$(1) \quad \eta(\mathbf{x}) = \begin{cases} c \exp\left(\frac{1}{|\mathbf{x}|^2-1}\right) & 0 \leq |\mathbf{x}| < 1 \\ 0 & |\mathbf{x}| \geq 1 \end{cases}.$$

Scegliendo $c = \left(\int_{B_1(\mathbf{0})} \exp\left(\frac{1}{|\mathbf{x}|^2-1}\right) d\mathbf{x}\right)^{-1}$, si ha che $\int_{\mathbb{R}^n} \eta = 1$, rendendola così un mollificatore.

Si pone, per $\epsilon > 0$,

$$(2) \quad \eta_\epsilon(\mathbf{x}) = \frac{1}{\epsilon^n} \eta\left(\frac{|\mathbf{x}|}{\epsilon}\right),$$

che è ancora un mollificatore.

Siano ora Ω un dominio in $\mathbb{R}^n$ ed $f \in L^p(\Omega)$ tale che $f = 0$ fuori da Ω . Definiamo

$$f_\epsilon = f * \eta_\epsilon.$$

Anche se f fosse molto irregolare, f_ϵ è sempre di classe C^∞ . Da ciò il nome di **mollificatore** per η_ϵ .

OSSERVAZIONE 3. La convoluzione con un mollificatore si può usare per costruire funzioni in $C_0^\infty(\Omega)$ che assumono sempre valori tra 0 e 1 e valore 1 in un dato compatto $K \subset \Omega$. Siano $K^\epsilon \subset \Omega$ un ϵ -intorno di K ed $f = \chi_{K^\epsilon}$ la funzione caratteristica di K^ϵ . Allora se $\epsilon < \frac{1}{2} \text{dist}(K, \partial\Omega)$ si ha $f_\epsilon = \chi_{K^\epsilon} * \eta_\epsilon \in C_0^\infty(\Omega)$. Osserviamo che $0 \leq f_\epsilon \leq 1$. Infatti:

$$\begin{aligned} f_\epsilon(\mathbf{x}) &= \int_{\Omega} \eta_\epsilon(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \chi_{K^\epsilon}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \int_{K^\epsilon \cap B_\epsilon(\mathbf{x})} \eta_\epsilon(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\mathbf{y} \\ &\leq \int_{B_\epsilon(0)} \eta_\epsilon(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \leq 1. \end{aligned}$$

Inoltre $f_\epsilon \equiv 1$ in K . Infatti, se $\mathbf{x} \in K$, la sfera $B_\epsilon(\mathbf{x})$ è contenuta in K^ϵ e quindi

$$\int_{K^\epsilon \cap B_\epsilon(\mathbf{x})} \eta_\epsilon(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\mathbf{y} = \int_{B_\epsilon(0)} \eta_\epsilon(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = 1.$$

LEMMA 1 (partizione dell'unità). Sia $K \subset \mathbb{R}^n$ compatto e $U_1, \dots, U_N$, con $N \geq 2$, un ricoprimento aperto di K . Allora esistono N funzioni $\psi_1, \dots, \psi_N$ con le seguenti proprietà:

1. per ogni $j = 1, \dots, N$, $\psi_j \in C_0^\infty(U_j)$ e $0 \leq \psi_j \leq 1$;
2. per ogni $\mathbf{x} \in K$

$$\sum_{j=1}^N \psi_j(\mathbf{x}) = 1.$$

DIMOSTRAZIONE. Poiché $K \subset \bigcup_{j=1}^N U_j$ e ogni U_j è aperto, possiamo trovare degli aperti $A_j \subset\subset U_j$ tali che

$$K \subset \bigcup_{j=1}^N A_j.$$

Siano χ_{A_j} la funzione caratteristica di A_j ed η_ϵ il mollificatore (2). Definiamo

$$\phi_{j,\epsilon} = \eta_\epsilon * \chi_{A_j}.$$

Ricordando l'Osservazione 3, possiamo fissare ϵ così piccolo da avere $\phi_{j,\epsilon} \in C_0^\infty(U_j)$ e $\phi_{j,\epsilon} > 0$ su A_j . Le funzioni

$$\psi_j = \frac{\phi_{j,\epsilon}}{\sum_{s=1}^N \phi_{s,\epsilon}}$$

soddisfano le condizioni 1 e 2. □

L'insieme delle funzioni $\psi_1, \dots, \psi_N$ si chiama **partizione dell'unità** per K associata al ricoprimento $U_1, \dots, U_N$. Dato quindi $u : K \rightarrow \mathbb{R}$, la procedura di **localizzazione** consiste nello scrivere

$$u = \sum_{j=1}^N \psi_j u,$$

cioè come una somma di funzioni $u_j = \psi_j u$ con supporto compatto contenuto in U_j .

4.2. Riduzione ad un semispazio. Consideriamo un ricoprimento aperto di $\partial\Omega$ costituita da N sfere $B_j = B(\mathbf{x}_j)$ centrate in $\mathbf{x}_j \in \partial\Omega$ tali che $\partial\Omega \cap B_j$ sia il grafico di una funzione Lipschitziana $y_n = \phi_j(\mathbf{y}')$. Sia inoltre $A_0 \subset \Omega$ contenente $\Omega \setminus \bigcup_{j=1}^N B_j$. Allora

$A_0, B_1, \dots, B_N$ è un ricoprimento aperto di $\bar{\Omega}$. Sia $\psi_0, \dots, \psi_N$ una partizione dell'unità per $\bar{\Omega}$ associata a $A_0, B_1, \dots, B_N$. Dalla definizione di dominio Lipschitziano (Definizione 3), per ogni B_j , $j = 1, \dots, N$, esiste una trasformazione bi-Lipschitziana $\mathbf{z} = \Phi_j(\mathbf{x})$ tale che

$$\Phi_j(\Omega \cap B_j) \equiv U_j \subset \mathbb{R}_+^n,$$

dove U_j è un aperto, e

$$\Phi_j(\partial\Omega \cap B_j) \equiv \Gamma_j \subset \partial\mathbb{R}_+^n = \{z_n = 0\}.$$

Siamo ora pronti a dimostrare il seguente teorema.

TEOREMA 2. *Sia $\Omega = \mathbb{R}_+^n$ oppure un dominio limitato e Lipschitziano, e $\Gamma = \partial\Omega$. Allora esiste un operatore lineare (operatore di traccia) $\tau_0 : H^1(\Omega) \rightarrow L^2(\Gamma)$ tale che $\tau_0 = u|_\Gamma$ se $u \in D(\bar{\Omega})$ e*

$$(3) \quad \|\tau_0 u\|_{L^2(\Gamma)} \leq c(\Omega, n) \|u\|_{H^1(\Omega)}.$$

DIMOSTRAZIONE. Sia $\Omega = \mathbb{R}_+^n$. Dimostriamo la (3) per le funzioni $u \in D(\bar{\Omega})$. In questo caso $\tau_0 u = u(\mathbf{x}', 0)$ e occorre dimostrare che esiste una costante c tale che

$$(4) \quad \int_{\mathbb{R}^{n-1}} |u(\mathbf{x}', 0)|^2 d\mathbf{x}' \leq c \|u\|_{H^1(\mathbb{R}_+^n)}^2 \quad \forall u \in D(\bar{\Omega}).$$

Si ha, per ogni $x_n \in (0, 1)$,

$$u(\mathbf{x}', 0) = u(\mathbf{x}', x_n) - \int_0^{x_n} u_{x_n}(\mathbf{x}', t) dt.$$

Ricordando la disuguaglianza elementare $(a + b)^2 \leq 2a^2 + 2b^2$, di ottiene

$$(5) \quad |u(\mathbf{x}', 0)|^2 \leq 2|u(\mathbf{x}', x_n)|^2 + 2 \left(\int_0^1 |u_{x_n}(\mathbf{x}', t)| dt \right)^2$$

$$(6) \quad \leq 2|u(\mathbf{x}', x_n)|^2 + 2 \int_0^1 |u_{x_n}(\mathbf{x}', t)|^2 dt$$

essendo per la disuguaglianza di Schwarz,

$$\left(\int_0^1 |u_{x_n}(\mathbf{x}', t)| dt \right)^2 \leq \int_0^1 |u_{x_n}(\mathbf{x}', t)|^2 dt.$$

Integrando rispetto ad $\mathbf{x}'$ in $\mathbb{R}^{n-1}$ e rispetto ad x_n in $(0, 1)$ si ricava la (4) con $c = 2$.

Si supponga ora che $u \in H^1(\mathbb{R}_+^n)$. Poiché $D(\bar{\Omega})$ è denso in $H^1(\mathbb{R}_+^n)$, si può trovare una successione $\{u_k\}_k \subset D(\bar{\Omega})$ tale che $u_k \rightarrow u$ in $H^1(\mathbb{R}_+^n)$. Dalla linearità di τ_0 e dalla (4) otteniamo

$$\|\tau_0 u_h - \tau_0 u_k\|_{L^2(\mathbb{R}^{n-1})} \leq \sqrt{2} \|u_h - u_k\|_{H^1(\mathbb{R}_+^n)}.$$

Essendo $\{u_k\}_k$ di Cauchy in $H^1(\mathbb{R}_+^n)$, si deduce che $\{\tau_0 u_k\}_k$ è di Cauchy in $L^2(\mathbb{R}^{n-1})$ e quindi risulta definito un unico elemento $u_0 \in L^2(\mathbb{R}^{n-1})$ tale che

$$\tau_0 u_k \rightarrow u_0 \quad \text{in } L^2(\mathbb{R}^{n-1}).$$

Questo elemento non dipende dalla successione $\{u_k\}_k$ approssimante. Infatti, se $\{v_k\}_k \subset D(\bar{\Omega})$ è un'altra successione tale che $v_k \rightarrow u$ in $H^1(\mathbb{R}_+^n)$, allora

$$\|v_k - u_k\|_{H^1(\mathbb{R}_+^n)} \rightarrow 0.$$

Da

$$\|\tau_0 v_k - \tau_0 u_k\|_{L^2(\mathbb{R}^{n-1})} \leq \sqrt{2} \|u_k - v_k\|_{H^1(\mathbb{R}_+^n)}$$

segue che anche $\tau_0 v_k \rightarrow u_0$ in $L^2(\mathbb{R}^{n-1})$.

Se $u \in H^1(\mathbb{R}_+^n)$, ha dunque senso definire $\tau_0 u = u_0$. L'operatore così definito soddisfa i requisiti 1 e 2.

Se Ω è un dominio limitato e Lipschitziano, il teorema si dimostra per localizzazione e riduzione a un semispazio. Omettiamo i dettagli. $\square$

OSSERVAZIONE 4. Osserviamo che se $\Omega = \mathbb{R}_+^n$ allora $\Gamma = \mathbb{R}^{n-1}$ e lo spazio $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)$ è ben definito. Se Ω è un dominio limitato e Lipschitziano si può definire $H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$ per localizzazione e riduzione a un semispazio.

Si dimostra che l'operatore di traccia è surgettivo su $H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$ e dunque diamo la seguente definizione.

DEFINIZIONE 9. Si definisce **traccia** di $f \in D(\Omega)$ su $\partial\Omega$ l'operatore continuo

$$\begin{aligned} \gamma : D(\Omega) &\rightarrow H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega) \\ f &\mapsto f|_{\partial\Omega} \quad . \end{aligned}$$

5. Duale di $H_0^1(\Omega)$

Nelle applicazioni alle equazioni a derivate parziali, in connessione con l'uso del Teorema di Lax-Milgram, il duale di $H_0^1(\Omega)$ svolge un ruolo rilevante ed è per questo che gli viene data una notazione specifica.

DEFINIZIONE 10. Si dota lo spazio $H^{-1}(\Omega)$ della seguente norma

$$\|F\|_{H^{-1}(\Omega)} = \sup\{|Fv| : v \in H_0^1(\Omega), \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)} \leq 1\}.$$

OSSERVAZIONE 5. Si osserva che, poiché $D(\Omega)$ è denso (per definizione) e immerso con continuità in $H_0^1(\Omega)$, $H^{-1}(\Omega)$ è uno spazio di distribuzioni.

Di seguito verranno esposti alcuni risultati utili a dimostrare il Teorema 5, che fornisce una caratterizzazione degli elementi di $H^{-1}(\Omega)$.

TEOREMA 3 (della proiezione). Sia V un sottospazio chiuso di uno spazio di Hilbert H . Allora, per ogni $x \in H$, esiste un unico elemento $P_V x \in V$ tale che

$$\|P_V x - x\| = \inf_{v \in V} \|v - x\|.$$

Valgono inoltre le seguenti proprietà:

- (1) $P_V x = x$ se e solo se $x \in V$.

(2) Posto $Q_V x = x - P_V x$, si ha $Q_V x \in V^\perp$ e

$$\|x\|^2 = \|P_V x\|^2 + \|Q_V x\|^2.$$

OSSERVAZIONE 6. Siano H_1 e H_2 spazi di Hilbert e $L : H_1 \rightarrow H_2$ lineare e continuo. Allora $N(L)$ è un sottospazio chiuso di H_1 : se $\{x_n\}_n \subset N(L)$ e $x_n \rightarrow x$, allora $0 = Lx_n \rightarrow Lx$ e perciò $x \in N(L)$; dunque $N(L)$ contiene tutti i suoi punti limite e quindi è chiuso.

ESEMPIO 2. Sia H uno spazio di Hilbert. Fissato $y \in H$, il funzionale

$$L_y : x \mapsto (x, y)$$

è continuo. Infatti la disuguaglianza di Schwartz dà $|(x, y)| \leq \|x\| \|y\|$ e quindi $L_y \in H^*$ e $\|L_y\|_{H^*} \leq \|y\|$. In realtà si ha

$$(7) \quad \|L_y\|_{H^*} = \|y\|$$

poiché, scegliendo $x = y$, si trova

$$\|y\|^2 = |L_y y| \leq \|L_y\|_{H^*} \|y\|$$

da cui $\|L_y\|_{H^*} \geq \|y\|$.

TEOREMA 4 (di rappresentazione di Riesz). Sia H uno spazio di Hilbert. Per ogni $L \in H^*$ esiste un unico elemento $u_L \in H$ tale che:

$$(8) \quad Lx = (u_L, x) \quad \text{per ogni } x \in H.$$

Inoltre

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

DIMOSTRAZIONE. Si vuole dimostrare innanzitutto l'esistenza di u_L . Sia N il nucleo di L . Se $N = H$, la tesi segue scegliendo $u_L = 0$. Se $N \subset H$, allora (Osservazione 6) N è un sottospazio chiuso di H .

Dal teorema della proiezione si deduce che esiste un elemento non nullo $z \in N^\perp$. Allora $Lz \neq 0$ e, dato un qualunque elemento $x \in H$, l'elemento

$$w = x - \frac{Lx}{Lz} z$$

appartiene a N . Infatti

$$Lw = L \left(x - \frac{Lx}{Lz} z \right) = Lx - \frac{Lx}{Lz} Lz = 0.$$

Essendo $z \in N^\perp$, si ha

$$0 = (z, w) = (z, x) - \frac{Lx}{Lz} \|z\|^2$$

ossia

$$Lx = \frac{L(z)}{\|z\|^2} (z, x).$$

La (8) vale dunque con $u_L = L(z) \|z\|^{-2} z$.

Per l'unicità, si osserva che se esistesse $v \in H$, $v \neq u_L$ tale che

$$Lx = (v, x) \quad \text{per ogni } x \in H,$$

sottraendo quest'equazione dalla (8), seguirebbe che

$$(u_L - v, x) = 0 \quad \text{per ogni } x \in H,$$

che implica $v = u_L$.

Infine, l'uguaglianza $\|L\|_{H^*} = \|u_L\|$ segue dalla (7), essendo $L = L_{u_L}$ nelle notazioni dell'Esempio 2. $\square$

TEOREMA 5. $H^{-1}(\Omega)$ è l'insieme delle distribuzioni della forma

$$(9) \quad F = f_0 + \operatorname{div} \mathbf{f},$$

dove $f_0 \in L^2(\Omega)$ e $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n) \in L^2(\Omega; \mathbb{R}^n)$. Inoltre

$$(10) \quad \|F\|_{H^{-1}(\Omega)} \leq \|f_0\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}.$$

DIMOSTRAZIONE. Sia $F \in H^{-1}(\Omega)$. Dal teorema di rappresentazione di Riesz, esiste un'unica $u \in H_0^1(\Omega)$ tale che

$$(u, v)_{H^1(\Omega)} = Fv \quad \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

Poiché

$$(u, v)_{H^1(\Omega)} = (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + (u, v)_{L^2(\Omega)} = -\langle \operatorname{div} \nabla u, v \rangle + (u, v)_{L^2(\Omega)}$$

in $D(\Omega)^*$, segue che la (9) vale $f_0 = u$ e $\mathbf{f} = -\nabla u$. Inoltre $\|F\|_{H^{-1}(\Omega)} \leq \|u\|_{L^2(\Omega)} + \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}$. Viceversa, sia $F = f_0 + \operatorname{div} \mathbf{f}$, con $f_0 \in L^2(\Omega)$ e $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n) \in L^2(\Omega; \mathbb{R}^n)$. Allora $F \in D(\Omega)^*$ e, ponendo $Fv = \langle F, v \rangle$, abbiamo:

$$Fv = \int_{\Omega} f_0 v \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} \quad \forall v \in D(\Omega).$$

Dalla disuguaglianza di Schwartz, si ottiene

$$(11) \quad |Fv| \leq \{\|f_0\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}\} \|v\|_{H^1(\Omega)}$$

e quindi F è continuo in $D(\Omega)$ nella norma di $H_0^1(\Omega)$.

Rimane da dimostrare che F ha un'unica estensione continua a tutto $H_0^1(\Omega)$. Siano $u \in H_0^1(\Omega)$ e $\{v_k\}_k \subset D(\Omega)$ tali che $\|v_k - u\|_{H^1(\Omega)} \rightarrow 0$. Allora ponendo $v = v_k - v_h$ nella (11) si ricava:

$$|Fv_k - Fv_h| \leq \{\|f_0\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}\} \|v_k - v_h\|_{H^1(\Omega)}.$$

Pertanto $\{Fv_k\}_k$ è una successione di Cauchy in $\mathbb{R}$ e perciò converge a un limite che è indipendente dalla successione che approssima u e che possiamo indicare con Fu . Infine, poiché

$$|Fu| = \lim_k |Fv_k| \quad e \quad \|u\|_{H^1(\Omega)} = \lim_k \|v_k\|,$$

dalla (11) segue che

$$|Fv| \leq \{\|f_0\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}\} \|u\|_{H^1(\Omega)},$$

ossia che $F \in H^{-1}(\Omega)$ e che vale la (10). $\square$

6. Teorema del punto fisso di Leray-Schauder

In questa sezione si vuole dimostrare il teorema di punto fisso di Leray-Schauder: esso sarà lo strumento necessario per dimostrare esistenza e unicità della soluzione del problema modello di una cella elettrolitica ideale.

TEOREMA 6 (del punto fisso di Brower). *Una mappa continua da una sfera chiusa di $\mathbb{R}^n$ in sé stessa ammette un punto fisso.*

TEOREMA 7. *Siano B uno spazio di Banach, G uno spazio convesso e compatto in B e $T : G \rightarrow G$ una mappa continua. Allora T ammette un punto fisso.*

DIMOSTRAZIONE. Sia k un intero positivo. Poiché G è compatto, esiste un numero finito di punti $x_1, \dots, x_N$, dove $N = N(k)$, tali che le bolle $B^i = B_{1/k}(x_i)$, $i = 1, \dots, n$, ricoprono G . Sia $G_k \subset G$ l'involuppo convesso di $\{x_1, \dots, x_n\}$ e si definisca la mappa

$$J_k : G \rightarrow G_k$$

$$x \mapsto \frac{\sum \text{dist}(x, G - B^i) x_i}{\sum \text{dist}(x, G - B^i)}.$$

Chiaramente J_k è continua e per ogni $x \in G$

$$(12) \quad \|J_k x - x\| \leq \frac{\sum \text{dist}(x, G - B^i) \|x_i - x\|}{\sum \text{dist}(x, G - B^i)} < \frac{1}{k}.$$

Di conseguenza la mappa $J_k \circ T$ ristretta a G_k mappa in modo continuo G_k in sé stesso e quindi, per il teorema del punto fisso di Brower, ammette un punto fisso $x^{(k)}$. Da notare che G_k è omeomorfa a una sfera chiusa in qualche spazio euclideo. Poiché G è compatto, un'estratta della successione $\{x^{(k)}\}_k$ converge a qualche $x \in G$. Dimostriamo ora che tale x è punto fisso per T . Infatti, applicando (12) a $Tx^{(k)}$, si ha

$$\|x^{(k)} - Tx^{(k)}\| = \|J_k \circ Tx^{(k)} - Tx^{(k)}\| < \frac{1}{k},$$

e, per continuità di T , si conclude che $Tx = x$. □

COROLLARIO 1. *Sia G un insieme convesso chiuso in B spazio di Banach e sia $T : G \rightarrow G$ una mappa continua tale che l'immagine TG sia precompatta. Allora T ammette un punto fisso.*

TEOREMA 8 (Leray-Schauder 1930). *Siano X uno spazio di Banach e $T : X \rightarrow X$ un operatore compatto.*

Si supponga che esistano una costante $M > 0$ tale che

$$\|x\|_X < M \quad \forall x \in X$$

e $\sigma \in [0, 1]$ che soddisfa $x = \sigma Tx$. Allora T ammette almeno un punto fisso.

DIMOSTRAZIONE. Si può assumere, senza perdita di generalità, $M = 1$. Si consideri il seguente operatore

$$T^*x = \begin{cases} Tx & \text{se } \|Tx\| < 1 \\ \frac{Tx}{\|Tx\|} & \text{se } \|Tx\| \geq 1. \end{cases}$$

Si osserva che T^* è una mappa continua dalla chiusura in X della palla unitaria $\overline{B}$ in sé stessa. Poiché $T\overline{B}$ è precompatto, lo è pure $T^*\overline{B}$. Per il Corollario 1, T^* ammette un punto fisso x . Vogliamo dimostrare che x è punto fisso anche per T . Se per assurdo $\|Tx\| \geq 1$, allora $x = T^*x = \sigma Tx$, dove $\sigma = 1/\|Tx\|$, e $\|x\| = \|T^*x\| = 1$: ma questo contraddice l'ipotesi che $\|x\| < M$, con $M = 1$.

Dunque $\|Tx\| < 1$ e $x = T^*x = Tx$. □

È sufficiente quindi l'esistenza di un solo punto fisso per uno degli operatori σT a garantire l'esistenza di un punto fisso per T . Non ne garantisce però l'unicità.

7. Disuguaglianza di Poincaré

La **disuguaglianza di Poincaré** è uno degli strumenti classici usati nelle dimostrazioni di esistenza, unicità e stabilità della soluzione di un problema ellittico. Verrà usata, per esempio, nella dimostrazione del Teorema 17. Di seguito vengono elencati alcuni risultati per dimostrare la disuguaglianza.

TEOREMA 9. *Siano $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un dominio limitato ed $E \subset L^p(\Omega)$, con $1 \leq p < +\infty$. Allora E è **precompatto** in $L^p(\Omega)$ se e solo se valgono le seguenti condizioni:*

(1) *E è limitato in $L^p(\Omega)$, cioè esiste $M > 0$ tale che*

$$\|u\|_{L^p(\Omega)} \leq M, \quad \forall u \in E;$$

(2) *E è equicontinuo in norma $L^p(\Omega)$: considerando $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^n$ ed estendendo u a zero fuori da Ω ,*

$$\lim_{\mathbf{h} \rightarrow 0} \|u(\cdot + \mathbf{h}) - u(\cdot)\|_{L^p(\Omega)} = 0 \quad \text{uniformemente rispetto a } u \in E.$$

DEFINIZIONE 11. *Dato H spazio di Hilbert, una successione $\{x_k\} \subset H$ **converge debolmente** a $x \in H$, e in tal caso si scrive*

$$x_k \rightharpoonup x$$

se

$$\langle F, x_k \rangle \rightarrow \langle F, x \rangle, \quad \forall F \in H^*.$$

TEOREMA 10. *Sia $\{x_k\} \subset H$ tale che $x_k \rightharpoonup x$. Allora:*

(1) *$\{x_k\}$ è limitata;*

(2) *$\|x\| \leq \liminf_k \|x_k\|$. (semicontinuità inferiore debole)*

DEFINIZIONE 12. *Si dice che un operatore lineare $E : H^1(\Omega) \rightarrow H^1(\mathbb{R}^n)$ è un **operatore di estensione** se, $\forall u \in H^1(\Omega)$:*

(1) *$Eu = u$ in Ω ;*

(2) *se Ω è limitato, Eu ha supporto compatto;*

(3) *E è continuo: esiste una costante $c > 0$ tale che*

$$\|Eu\|_{H^1(\Omega)} \leq c(n, \Omega) \|u\|_{H^1(\Omega)}.$$

TEOREMA 11. *Sia $\Omega = \mathbb{R}_+^n$ oppure un dominio limitato e Lipschitziano. Allora esiste un operatore di estensione $E : H^1(\Omega) \rightarrow H^1(\mathbb{R}^n)$.*

DEFINIZIONE 13. Siano X e Y spazi di Banach e sia $T : X \rightarrow Y$ un operatore limitato. T è detto **compatto** se mappa insiemi limitati di X in insiemi precompatti di Y .

TEOREMA 12 (di Rellich). Se Ω è Lipschitziano e limitato, l'immersione di $H^1(\Omega)$ in $L^2(\Omega)$ è compatta.

DIMOSTRAZIONE. Si usa il criterio di compattezza espresso nel Teorema 9. Si osserva prima che, per ogni $v \in D(\mathbb{R}^n)$, si può scrivere:

$$v(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - v(\mathbf{x}) = \int_0^1 \frac{d}{dt} v(\mathbf{x} + t\mathbf{h}) dt = \int_0^1 \nabla v(\mathbf{x} + t\mathbf{h}) \cdot \mathbf{h} dt$$

da cui

$$|v(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - v(\mathbf{x})|^2 = \left| \int_0^1 \nabla v(\mathbf{x} + t\mathbf{h}) \cdot \mathbf{h} dt \right|^2 \leq |\mathbf{h}|^2 \int_0^1 |\nabla v(\mathbf{x} + t\mathbf{h})|^2 dt.$$

Integrando su $\mathbb{R}^n$ si trova

$$(13) \quad \begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^n} |v(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - v(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} &\leq |\mathbf{h}|^2 \int_{\mathbb{R}^n} d\mathbf{x} \int_0^1 |\nabla v(\mathbf{x} + t\mathbf{h})|^2 dt \leq \\ &\leq |\mathbf{h}|^2 \|\nabla v\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2. \end{aligned}$$

Poiché $D(\mathbb{R}^n)$ è denso in $H^1(\mathbb{R}^n)$, la (13) continua a valere per ogni $u \in H^1(\mathbb{R}^n)$. Sia ora $S \subset H^1(\Omega)$ limitato, ovvero esiste un numero $M > 0$ tale che:

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \leq M, \quad \forall u \in S.$$

Per il Teorema 11, ogni $u \in S$ ha un'estensione $\tilde{u} \in H^1(\mathbb{R}^n)$, con supporto contenuto in un aperto $\Omega' \supset \supset \Omega$. Allora $\tilde{u} \in H_0^1(\Omega')$ e inoltre

$$\|\nabla \tilde{u}\|_{L^2(\Omega')} \leq c(\Omega, n) \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \leq c(\Omega, n) M.$$

Si indichi $\tilde{S}$ l'insieme di tali estensioni. Allora la (13) vale per ogni $\tilde{u} \in \tilde{S}$:

$$\int_{\Omega'} |\tilde{u}(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - \tilde{u}(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \leq |\mathbf{h}|^2 \|\nabla \tilde{u}\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2 \leq c^2 M^2 |\mathbf{h}|^2.$$

In base al Teorema 9, $\tilde{S}$ è precompatto in $L^2(\Omega')$ e quindi S è precompatto in $L^2(\Omega)$. $\square$

TEOREMA 13 (Disuguaglianza di Poincaré). Sia Ω un dominio limitato e Lipschitziano. Allora, sotto una delle seguenti ipotesi:

- (1) $u \in H_{0,\Gamma_0}^1(\Omega)$, con Γ_0 aperto non vuoto in $\partial\Omega$;
- (2) $u \in H^1(\Omega)$ e $u = 0$ su un insieme $S \subset \Omega$ con misura

$$|S| = a > 0;$$

- (3) $u \in H^1(\Omega)$ e $\int_{\Omega} u = 0$ (u ha media nulla in Ω);

esiste una costante $C_P > 0$, che dipende solo da n e Ω , tale che

$$(14) \quad \|u\|_{L^2(\Omega)} \leq C_P \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}.$$

DIMOSTRAZIONE. Si propone una dimostrazione astratta, valida sotto una qualunque tra le ipotesi 1-3. Per fissare le idee, si considera l'ipotesi 1. Si supponga per assurdo che la (14) sia falsa. Ciò significa che per ogni intero naturale $j \geq 1$ esiste una funzione $u_j \in H_{0,\Gamma_0}^1(\Omega)$ tale che

$$(15) \quad \|u_j\|_{L^2(\Omega)} > j \|\nabla u_j\|_{L^2(\Omega)}.$$

Si normalizzano le u_j in $L^2(\Omega)$ ponendo

$$w_j = \frac{u_j}{\|u_j\|_{L^2(\Omega)}}.$$

Allora $\|w_j\|_{L^2(\Omega)} = 1$ e, dalla (15),

$$\|\nabla w_j\|_{L^2(\Omega)} < \frac{1}{j} \leq 1.$$

Ne segue che la successione $\{w_j\}_j$ è limitata in $H^1(\Omega)$ e per il teorema di Rellich esistono una sottosuccessione, che per comodità sarà denotata anch'essa $\{w_j\}_j$, e $w \in H_{0,\Gamma_0}^1(\Omega)$ tali che:

- $w_j \rightarrow w$ in $L^2(\Omega)$;
- $\nabla w_j \rightharpoonup \nabla w$ in $L^2(\Omega)$.

Per la continuità della norma,

$$\|w\|_{L^2(\Omega)} = \lim_j \|w_j\|_{L^2(\Omega)} = 1.$$

D'altra parte, poiché la norma è semicontinua rispetto alla convergenza debole (Teorema 10),

$$\|\nabla w\|_{L^2(\Omega)} \leq \liminf_j \|\nabla w_j\|_{L^2(\Omega)} = 0,$$

per cui $\nabla w = \mathbf{0}$ ed essendo Ω connesso, si deduce che w è costante. Siccome $w \in H_{0,\Gamma_0}^1(\Omega)$, deve essere $w = 0$, che contraddice $\|w\|_{L^2(\Omega)} = \lim_j \|w_j\|_{L^2(\Omega)} = 1$.

La dimostrazione negli altri casi è identica. □

8. Teorema di Lax-Milgram

Quando si vuole cercare soluzioni di un problema differenziale anche in spazi di funzioni non lisce, si ricorre a una formulazione variazionale (mostrata nel capitolo successivo). Da tale formulazione si ottiene un'equazione tra funzionali che si risolve grazie al Teorema di Lax-Milgram.

DEFINIZIONE 14. *Siano V_1 e V_2 spazi pre-Hilbertiani. Una **forma bilineare** in $V_1 \times V_2$ è una funzione*

$$a : V_1 \times V_2 \rightarrow \mathbb{R}$$

che soddisfa le seguenti proprietà:

- (1) *per ogni $y \in V_2$ fissato, la funzione $x \mapsto a(x, y)$ è lineare su V_1 ;*
- (2) *per ogni $x \in V_1$ fissato, la funzione $y \mapsto a(x, y)$ è lineare su V_2 .*

Se $V_1 = V_2$, si dice semplicemente che $a(x, y)$ è forma bilineare in V , anziché in $V \times V$.

TEOREMA 14 (di Lax-Milgram). Sia V uno spazio di Hilbert reale con prodotto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$ e norma $\|\cdot\|$. Siano $a = a(u, v)$ una forma bilineare in V ed $F \in V^*$. Se:

(1) a è **continua**, cioè esiste una costante positiva M tale che

$$|a(u, v)| \leq M \|u\| \|v\|, \quad \forall u, v \in V;$$

(2) a è **coerciva**, cioè esiste una costante $\alpha > 0$ tale che

$$a(u, v) \geq \alpha \|v\|^2, \quad \forall v \in V,$$

allora esiste un'unica soluzione $\bar{u} \in V$ del problema

$$a(u, v) = F(v) \quad \forall v \in V.$$

Inoltre vale la seguente stima di stabilità:

$$\|\bar{u}\| \leq \frac{1}{\alpha} \|F\|_{V^*}.$$

9. Questioni di regolarità

Il seguente teorema permette di “estendere” la regolarità di una funzione H^1 .

TEOREMA 15. Siano $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$, e Ω un dominio limitato e Lipschitziano in $\mathbb{R}^n$. Allora

(1) se $n > 2$, $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^p(\Omega)$ per $2 \leq p \leq \frac{2n}{n-2}$, in modo compatto.

(2) se $n = 2$, $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^p(\Omega)$ per $2 \leq p \leq +\infty$, in modo compatto.

Nei casi indicati vale inoltre la disuguaglianza

$$\|u\|_{L^p(\Omega)} \leq c(n, p, \Omega) \|u\|_{H^1(\Omega)}.$$

ESEMPIO 3. Per $n = 3$ si ha $\frac{2n}{n-2} = 6$, quindi $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^6(\Omega)$ e

$$\|u\|_{L^6(\Omega)} \leq c(\Omega) \|u\|_{H^1(\Omega)}.$$

10. Teorema di Ascoli-Arzelà

Il seguente teorema sarà utile a dimostrare l'esistenza della soluzione di una PDE ellittica quasi-lineare.

TEOREMA 16 (di Ascoli-Arzelà). Siano X, Y spazi metrici, X compatto ed $E \subset C(X, Y)$. Se E è equicontinuo e l'insieme $E(t) = \{f(t) : f \in E\}$ è precompatto per ogni $t \in X$, allora E è precompatto.

CAPITOLO 2

Richiami sulle equazioni ellittiche

Siano $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$, Ω un dominio limitato in $\mathbb{R}^n$, $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = (a_{ij}(\mathbf{x}))$ una matrice quadrata di ordine n , $\mathbf{b}(\mathbf{x})$ campo vettoriale in $\mathbb{R}^n$, $c(\mathbf{x})$ ed $f(\mathbf{x})$ funzioni reali. Un'equazione della forma

$$(16) \quad - \sum_{i,j=1}^n (a_{ij}(\mathbf{x})u_{x_i})_{x_j} + \sum_{k=1}^n b_k(\mathbf{x})u_{x_k} + c(\mathbf{x})u = f(\mathbf{x})$$

oppure

$$(17) \quad - \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(\mathbf{x})u_{x_i x_j} + \sum_{k=1}^n b_k(\mathbf{x})u_{x_k} + c(\mathbf{x})u = f(\mathbf{x})$$

si definisce *ellittica* in Ω se la matrice $\mathbf{A}$ è definita positiva in Ω , ovvero

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(\mathbf{x})\xi_i \xi_j > 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \forall \xi \in \mathbb{R}^n, \xi \neq \mathbf{0}.$$

Si dice che la (16) è *in forma di divergenza*, poiché si può scrivere nel seguente modo:

$$-\operatorname{div}(\mathbf{A}\nabla u) + \mathbf{b} \cdot \nabla u + cu = f.$$

La (17) è detta *in forma di non divergenza*. Se gli elementi a_{ij} di $\mathbf{A}$ sono differenziabili, la

(17) si può scrivere in forma di divergenza sommando e sottraendo $\sum_{i,j=1}^n (\partial_{x_i} a_{ij})u_{x_{ij}}$.

1. Equazioni lineari

In questa sezione si considera un generico operatore ellittico in forma di divergenza

$$Lu = -\operatorname{div}(\mathbf{A}(\mathbf{x}) \cdot \nabla u) + \mathbf{b}(\mathbf{x}) \cdot \nabla u + c(\mathbf{x})u,$$

dove $\mathbf{A} = (a_{ij})_{i,j=1\dots n}$, $\mathbf{b} = (b_1, \dots, b_n)$ e c è una funzione reale.

Si assumeranno le seguenti ipotesi.

- (1) L'operatore differenziale L è *uniformemente ellittico*: esistono due numeri positivi α ed M tali che:

$$(18) \quad \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(\mathbf{x})\xi_i \xi_j \geq \alpha|\xi|^2 \quad \text{e} \quad |a_{ij}(\mathbf{x})| \leq M, \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^n, \text{ q.o. in } \Omega.$$

La costante α prende il nome di *costante di ellitticità* di L .

- (2) I coefficienti b_j e c sono limitati per ogni $j = 1, \dots, n$:

$$(19) \quad |b_j(\mathbf{x})| \leq b_\infty \quad \text{e} \quad |c(\mathbf{x})| \leq c_\infty, \quad \text{q.o. in } \Omega.$$

1.1. Problema di Dirichlet. Si consideri il problema

$$(20) \quad \begin{cases} Lu = f + \operatorname{div} \mathbf{f} & \text{in } \Omega \\ u = 0 & \text{su } \partial\Omega \end{cases}$$

dove $f \in L^2(\Omega)$ e $\mathbf{f} \in L^2(\Omega; \mathbb{R}^n)$.

Si osserva che a secondo membro si trova un generico elemento di $H^{-1}(\Omega)$ (vedi Teorema 5).

1.1.1. *Formulazione variazionale.* Si vuole mostrare esistenza, unicità e regolarità della soluzione del problema (20). A tal scopo si vuole utilizzare il teorema di Lax-Milgram. Di seguito verrà riformulato il problema differenziale.

Si moltiplichino entrambi i membri dell'equazione per una funzione $v \in C_0^\infty(\Omega)$ e si integri su Ω :

$$\int_{\Omega} -\operatorname{div}(\mathbf{A}\nabla u)v \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} [\mathbf{b} \cdot \nabla u + cu]v \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f v \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} v \operatorname{div} \mathbf{f} \, d\mathbf{x}.$$

Si integri per parti il primo addendo del membro di sinistra e il secondo del membro di destra, ricordando che $v = 0$ in $\partial\Omega$. Si trova:

$$\int_{\Omega} -\operatorname{div}(\mathbf{A}\nabla u)v \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} [\mathbf{A}\nabla u \cdot \nabla v] \, d\mathbf{x}$$

e

$$\int_{\Omega} v \operatorname{div} \mathbf{f} \, d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \nabla v \, d\mathbf{x}.$$

L'equazione che si ottiene è dunque la seguente:

$$\int_{\Omega} [\mathbf{A}\nabla u \cdot \nabla v + \mathbf{b}v \cdot \nabla u + cuv] \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} [fv - \mathbf{f} \cdot \nabla v] \, d\mathbf{x}$$

per ogni $v \in C_0^\infty(\Omega)$.

Allargando lo spazio delle funzioni test a $H_0^1(\Omega)$, si introducono la forma bilineare

$$B(u, v) = \int_{\Omega} [\mathbf{A}\nabla u \cdot \nabla v + \mathbf{b}v \cdot \nabla u + cuv] \, d\mathbf{x}$$

e il funzionale lineare

$$Fv = \int_{\Omega} [fv - \mathbf{f} \cdot \nabla v] \, d\mathbf{x}.$$

La formulazione variazionale del problema (20) è dunque la seguente: determinare $u \in H_0^1(\Omega)$ tale che

$$(21) \quad B(u, v) = Fv, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega).$$

TEOREMA 17. *Si assumino le ipotesi (18) e (19). Siano $f \in L^2(\Omega)$ e $\mathbf{f} \in L^2(\Omega; \mathbb{R}^n)$. Se $\mathbf{b}$ è Lipschitziana e*

$$(22) \quad -\frac{1}{2}\operatorname{div} \mathbf{b} + c \geq 0, \quad q.o. \text{ in } \Omega,$$

allora il problema (21) ha un'unica soluzione. Inoltre vale la seguente stima di stabilità:

$$(23) \quad \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \leq \frac{1}{\alpha} C_P \{\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}\}.$$

DIMOSTRAZIONE. Si applica il teorema di Lax-Milgram con $V = H_0^1(\Omega)$. Sotto le ipotesi (18) e (19) la forma bilineare è continua. Infatti, dalla disuguaglianza di Schwarz si ha:

$$\begin{aligned} \left| \int_{\Omega} \mathbf{A} \nabla u \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} \right| &\leq \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n |a_{ij} u_{x_i} v_{x_j}| \, d\mathbf{x} \leq \\ &\leq \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n |a_{ij}| |\nabla u| |\nabla v| \, d\mathbf{x} \leq \\ &\leq n^2 M \int_{\Omega} |\nabla u| |\nabla v| \, d\mathbf{x} \leq n^2 M \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Inoltre, usando la disuguaglianza di Poincaré,

$$\left| \int_{\Omega} [v \mathbf{b} \cdot \nabla u] \, d\mathbf{x} \right| \leq \sqrt{n} C_P b_{\infty} \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}$$

e

$$\left| \int_{\Omega} c u v \, d\mathbf{x} \right| \leq c_{\infty} \int_{\Omega} |u| |v| \, d\mathbf{x} \leq c_{\infty} C_P^2 \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}$$

Raggruppendo tutte le disuguaglianze si ha

$$|B(u, v)| \leq (n^2 M + \sqrt{n} C_P b_{\infty} + c_{\infty} C_P^2) \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}$$

per cui B è continua.

Si analizza ora la coercività di B . Si ha:

$$B(u, u) = \int_{\Omega} [\mathbf{A} \nabla u \cdot \nabla u + \mathbf{b} u \cdot \nabla u + c u^2] \, d\mathbf{x}.$$

Poiché $u = 0$ su $\partial\Omega$, integrando per parti si ottiene

$$\int_{\Omega} \mathbf{b} u \cdot \nabla u \, d\mathbf{x} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \nabla u^2 \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} -\frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{b} u^2 \, d\mathbf{x}.$$

Da (18) e (22) segue che

$$B(u, u) \geq \alpha \int_{\Omega} |\nabla u|^2 \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \left[-\frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{b} + c \right] u^2 \, d\mathbf{x} \geq \alpha \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2$$

quindi B è V -coerciva.

Per il teorema 5, $F \in H^{-1}(\Omega)$ e dunque il teorema di Lax-Milgram garantisce esistenza, unicità e stabilità per il problema (21). In particolare, dalla (10),

$$\|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \leq \frac{1}{\alpha} C_P \{\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}\}. \quad \square$$

Si consideri ora il caso di condizioni di Dirichlet **non omogenee**, cioè il problema

$$\begin{cases} Lu = f + \operatorname{div} \mathbf{f} & \text{in } \Omega \\ u = g & \text{su } \partial\Omega \end{cases}$$

Se $g \in H^{1/2}(\partial\Omega)$, spazio delle tracce su $\partial\Omega$ delle funzioni di $H^1(\Omega)$, ci si riconduce al caso omogeneo ponendo

$$w = u - \tilde{g},$$

dove $\tilde{g}$ è un *rilevamento* di g in $H^1(\Omega)$. In questo caso, si richiede che il dominio sia *Lipschitziano*, per assicurare l'esistenza di $\tilde{g}$. La funzione w appartiene a $H_0^1(\Omega)$ e soddisfa l'equazione

$$Lw = f + \operatorname{div}(\mathbf{f} + \mathbf{A}\nabla\tilde{g}) - \mathbf{b} \cdot \nabla\tilde{g} - c\tilde{g},$$

che è dello stesso tipo di quella precedente, essendo, per le ipotesi su $\mathbf{b}$ e c ,

$$[f - \mathbf{b} \cdot \nabla\tilde{g} - c\tilde{g}] \in L^2(\Omega) \quad e \quad [\mathbf{f} + \mathbf{A}\nabla\tilde{g}] \in L^2(\Omega; \mathbb{R}^n)$$

e dunque

$$[f + \operatorname{div}(\mathbf{f} + \mathbf{A}\nabla\tilde{g}) - \mathbf{b} \cdot \nabla\tilde{g} - c\tilde{g}] \in H^{-1}(\Omega).$$

In base al teorema di Lax-Milgram, esiste un'unica soluzione del problema omogeneo ed inoltre

$$(24) \quad \begin{aligned} \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)} &\leq C_P \{ \|f - \mathbf{b} \cdot \nabla\tilde{g} - c\tilde{g}\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{f} + \mathbf{A}\nabla\tilde{g}\|_{L^2(\Omega)} \} \leq \\ &\leq C(\alpha, n, M, b_\infty, c_\infty) \{ \|f\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)} + \|\tilde{g}\|_{H^1(\Omega)} \}, \end{aligned}$$

stima valida qualunque sia il rilevamento $\tilde{g}$ di g . Poiché

$$(25) \quad \|u\|_{H^1(\Omega)} \leq \|w\|_{H^1(\Omega)} + \|\tilde{g}\|_{H^1(\Omega)} \leq (1 + C_P)^{\frac{1}{2}} \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)} + \|\tilde{g}\|_{H^1(\Omega)}$$

e

$$\|w\|_{H^{1/2}(\partial\Omega)} = \inf \{ \|\tilde{g}\|_{H^1(\Omega)} : \tilde{g} \in H^1(\Omega), \tilde{g}|_{\partial\Omega} = g \},$$

passando all'estremo inferiore su $\tilde{g}$ nelle (24) e (25), si ricava che esiste un'unica soluzione $u \in H^1(\Omega)$ del problema (1.1.1) ed inoltre:

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \leq C(\alpha, n, M, b_\infty, c_\infty) \{ \|f\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)} + \|\tilde{g}\|_{H^{1/2}(\partial\Omega)} \}.$$

1.2. Problema di Neumann. Il problema di Neumann per un operatore in forma di divergenza si formula assegnando sulla frontiera del dominio il flusso $A\nabla u \cdot \nu$, dove ν è la normale esterna su $\partial\Omega$. Si pone

$$\partial_\nu^L u = A\nabla u \cdot \nu,$$

che prende il nome di *derivata conormale di u* . Dovendo esistere un versore normale almeno in quasi tutti i punti di $\partial\Omega$, occorre richiedere una certa regolarità a Ω , per esempio che Ω sia Lipschitziano. Il problema di Neumann per l'operatore L è dunque il seguente:

$$(26) \quad \begin{cases} Lu = f & \text{in } \Omega \\ \partial_\nu^L u = g & \text{su } \partial\Omega \end{cases},$$

con $f \in L^2(\Omega)$ e $g \in L^2(\partial\Omega)$.

1.2.1. *Formulazione variazionale.* La formulazione variazionale del problema (26) si ottiene analogamente a quanto già visto. Moltiplicando l'equazione differenziale $Lu = f$ per una funzione test $v \in H^1(\Omega)$ ed integrando per parti, si ha, formalmente,

$$\int_\Omega \mathbf{A}\nabla u \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \int_\Omega [\mathbf{b} \cdot \nabla u + cu]v \, d\mathbf{x} = \int_\Omega f v \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} g v \, d\sigma,$$

essendo $\mathbf{A}\nabla u \cdot \nu = g$ su $\partial\Omega$. Introducendo la forma bilineare

$$B(u, v) = \int_\Omega \mathbf{A}\nabla u \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \int_\Omega [\mathbf{b} \cdot \nabla u + cu]v \, d\mathbf{x}$$

e il funzionale lineare

$$Fv = \int_{\Omega} f v d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} g v d\sigma,$$

siamo condotti alla seguente formulazione variazionale del problema che, come si controlla facilmente, equivale alla fomulazione (26) nel caso in cui tutti i dati siano regolari:

Determinare $u \in H^1(\Omega)$ tale che

$$(27) \quad B(u, v) = Fv, \quad \forall v \in H^1(\Omega).$$

1.2.2. *Condizione di compatibilità.* Un insieme di condizioni che assicurano l'esistenza di una soluzione del problema (26) e la sua buona posizione sono indicate nel seguente teorema. Sotto alcune ipotesi, la soluzione è unica.

DEFINIZIONE 15. *Siano H_1 e H_2 spazi di Hilbert e $L : H_1 \rightarrow H_2$ un operatore lineare continuo.*

*Si definisce **aggiunto** di L l'operatore $L^* : H_2 \rightarrow H_1$ che soddisfa*

$$(L^*y, x)_{H_1} = (y, Lx)_{H_2} \quad \forall y \in H_2, \forall x \in H_1.$$

TEOREMA 18. *Siano Ω un dominio limitato e Lipschitziano, $f \in L^2(\Omega)$ e $g \in L^2(\partial\Omega)$. Si assumino le ipotesi (18) e (19). Vale la seguente dicotomia:*

a) *o il problema (26) ha un'unica soluzione debole $u \in H^1(\Omega)$ ed esiste $C = C(\alpha, n, b_{\infty}, c_{\infty})$ tale che*

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \leq C\{\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|g\|_{L^2(\partial\Omega)}\};$$

b) *oppure i problemi omogeneo e omogeneo aggiunto, rispettivamente,*

$$\begin{cases} Lu = 0 & \text{in } \Omega \\ \mathbf{A}\nabla u \cdot \nu = 0 & \text{su } \partial\Omega, \end{cases} \quad \begin{cases} L^*w = 0 & \text{in } \Omega \\ (\mathbf{A}^\perp \nabla w + \mathbf{b}w) \cdot \nu = 0 & \text{su } \partial\Omega \end{cases}$$

hanno (ciascuno) d soluzioni linearmente indipendenti, con $0 < d < +\infty$;

c) *il problema (26) ha soluzione se e solo se*

$$Fw = \int_{\Omega} f w d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} g w d\sigma = 0$$

per ogni soluzione w del problema omogeneo aggiunto.

OSSERVAZIONE 7. *Se $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ e $c = 0$, allora le soluzioni w del problema omogeneo aggiunto sono le funzioni costanti. Infatti, in questo caso, w è soluzione di*

$$B^*(u, v) = \int_{\Omega} \mathbf{A}^\perp \nabla w \cdot \nabla v d\mathbf{x} = 0 \quad \forall v \in H^1(\Omega).$$

Essendo $v = w$ si trova, per l'ellitticità uniforme,

$$0 = \int_{\Omega} \mathbf{A}^\perp \nabla w \cdot \nabla w d\mathbf{x} \geq \alpha \|\nabla w\|_{L^2(\Omega)}^2$$

e quindi w è costante. Pertanto si ha $d = 1$ e la condizione necessaria e sufficiente di risolubilità è

$$\int_{\Omega} f d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} g d\sigma = 0,$$

*detta **condizione di compatibilità**.*

2. Equazioni quasi-lineari

In questa sezione si fa riferimento alle fonti [3] e [4].

Una PDE ellittica del secondo ordine quasi-lineare può essere scritta in forma generale come:

$$-\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x, u, \nabla u) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} = b(x, u, \nabla u)$$

dove la matrice $A(x, u, \nabla u) = (a_{ij}(x, u, \nabla u))$ è simmetrica e definita positiva per ogni x , u e ∇u .

DEFINIZIONE 16. Siano $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ e $x_0 \in \Omega$. Se per qualche $0 < \alpha < 1$,

$$H_{x_0}^\alpha[u; \Omega] = \sup_{x \in \Omega} \frac{|u(x) - u(x_0)|^\alpha}{|x - x_0|} < +\infty,$$

allora u è detto **Hölder continuo** in x_0 rispetto a Ω , di ordine α .

Dato $k \in \mathbb{N}$, si definisce lo **spazio di Hölder**

$$C^{k,\alpha}(\overline{\Omega}) = \left\{ u \in C^k(\overline{\Omega}) : \sum_{|\nu|=k} \sup_{x_0 \in \Omega} H_{x_0}^\alpha[D^\nu u; \Omega] < +\infty \right\}.$$

Si dota tale spazio della seguente norma: per ogni $u \in C^{k,\alpha}(\overline{\Omega})$,

$$|u|_{k,\alpha;\Omega} = \sum_{m=0}^k \sum_{|\mu|=m} \sup_{\Omega} |D^\mu u(x)| + \sum_{|\nu|=k} \sup_{x, x_0 \in \Omega} \frac{|D^\nu u(x) - D^\nu u(x_0)|}{|x - x_0|^\alpha}.$$

DEFINIZIONE 17. Dati $k \in \mathbb{N}$ e $\alpha > 0$, si dice che Ω è un dominio con bordo $C^{k,\alpha}$ se $\partial\Omega$ è localmente il grafico di una funzione $C^{k,\alpha}$.

In questa sezione analizziamo il seguente problema di Dirichlet

$$(28) \quad \begin{cases} -\sum_{i=1}^n D_i(a_i(x, u, \nabla u)) + b(x, u, \nabla u) = 0 & \text{in } \Omega \\ u = \phi & \text{su } \partial\Omega \end{cases},$$

con la formulazione debole

$$(29) \quad Q[u, \phi] = \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} a_i(x, u, \nabla u) D_i \phi \, dx + \int_{\Omega} b(x, u, \nabla u) \, dx = 0 \quad \forall \phi \in C_0^1(\Omega), \phi \geq 0.$$

Supponiamo che per ogni $(x, z, \eta) \in \Omega \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ valgano

$$(30) \quad \frac{\partial a_i}{\partial \eta_j} \xi_i \xi_j \geq |\xi|^2, \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^n,$$

$$(31) \quad |a_i(x, z, 0)| \leq g(x) \quad (i = 1, \dots, n) \quad \text{e}$$

$$(32) \quad (1 + |\eta|^2) \left| \frac{\partial a_i}{\partial \eta_j} \right| + (1 + |\eta|) \left(\left| \frac{\partial a_i}{\partial z} \right| + |a_i| \right) + \left| \frac{\partial a_i}{\partial x_j} \right| + |b| \leq \mu(|z|)(1 + |\eta|^2) \quad (i, j = 1, \dots, n),$$

$$(33) \quad -b(x, z, \eta) \operatorname{sign} z \leq \Lambda[|\eta| + f(x)]$$

dove $g \in L^q(\Omega)$ ($q > n$) e $\mu(s)$ è monotona crescente in $[0, +\infty)$, $f \in L^1(\Omega)$ e Λ l'autovalore più grande della matrice (a_{ij}) .

Il seguente teorema sarà utile alla dimostrazione dell'esistenza di una soluzione per (28).

TEOREMA 19 (Teoria di Schauder). *Sia $u \in C^{2,\alpha}(\overline{\Omega})$ soluzione di (17) con $u = \phi \in C^{2,\alpha}(\overline{\Omega})$ su $\partial\Omega$.*

Si supponga che $(a_{i,j})$ soddisfi

$$\lambda|\xi|^2 \leq \sum_{i,j=1}^n a_{i,j}(x)\xi_i\xi_j \leq \Lambda|\xi|^2 \quad \forall x \in \Omega, \xi \in \mathbb{R}^n \quad \text{per qualche } \Lambda \geq \lambda > 0,$$

$a_{ij}, b_k, c, f \in C^{k,\alpha}(\overline{\Omega})$, $\partial\Omega \in C^{k+2,\alpha}$ e $\phi \in C^{k+2,\alpha}(\overline{\Omega})$. Allora $u \in C^{k+2,\alpha}(\overline{\Omega})$ e

$$\|u\|_{C^{k+2,\alpha}(\overline{\Omega})} \leq C \left(\|f\|_{C^{k,\alpha}(\overline{\Omega})} + \|\phi\|_{C^{k+2,\alpha}(\overline{\Omega})} + \|u\|_{L^2(\overline{\Omega})} \right),$$

dove C dipende solo da $n, \alpha, k, \Lambda/\lambda, \Omega$ e dalle norme $C^{k,\alpha}(\overline{\Omega})$ di a_{ij}, b_k, c .

Si dimostra ora un risultato di esistenza.

TEOREMA 20. *Si assumino (30)-(33). Siano $\partial\Omega \in C^{2,\alpha}$, $a_i \in C^{1,\alpha}(\overline{\Omega} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$, $b \in C^{0,\alpha}(\overline{\Omega} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n)$ e $\phi \in C^{2,\alpha}(\overline{\Omega})$, dove $0 < \alpha < 1$. Allora esiste una soluzione $u \in C^{2,\alpha}(\overline{\Omega})$ per il problema di Dirichlet.*

DIMOSTRAZIONE. Applichiamo il teorema di punto fisso di Leray-Schauder. Prendiamo $X = C^{1,\alpha}(\overline{\Omega})$ come spazio di Banach. Per ogni $v \in C^{1,\alpha}(\overline{\Omega})$ e $0 \leq \sigma \leq 1$, consideriamo il problema di Dirichlet

$$(34) \quad \begin{cases} - \left[\sigma \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial a_i}{\partial \eta_j}(x, u, \nabla u) \frac{\partial u}{\partial x_i \partial x_j} + (1 - \sigma) \Delta u \right] + \sigma \left[\frac{\partial a_i}{\partial x_i} + \frac{\partial a_i}{\partial z} \eta_i + b \right] = 0 & \text{in } \Omega \\ u = \sigma \phi & \text{su } \partial\Omega \end{cases}$$

Notare che i coefficienti dell'equazione lineare per u sono in $C^{\alpha^2}(\overline{\Omega})$. Allora, per la teoria di Schauder, la (34) ammette un'unica soluzione $u \in C^{2,\alpha^2}(\overline{\Omega}) \subset C^{1,\alpha}(\overline{\Omega})$. Quindi $u = \sigma T v$, con $\sigma \in [0, 1]$, definisce una mappa da $C^{1,\alpha}(\overline{\Omega})$ a $C^{1,\alpha}(\overline{\Omega})$. Verifichiamo ora le condizioni del teorema di Leray-Schauder.

1. Sia K un insieme limitato in $C^{1,\alpha}(\overline{\Omega})$. La teoria di Schauder implica che TK è limitato in $C^{2,\alpha^2}(\overline{\Omega})$, che è precompatto in $C^{1,\alpha}(\overline{\Omega})$ per il teorema di Ascoli-Arzelà. Dimostriamo ora che T è continuo. Supponiamo che $v_m \rightarrow v$ ($C^{1,\alpha}(\overline{\Omega})$) e $\sigma_m \rightarrow \sigma$. Denotiamo $u_m = \sigma_m T v_m$. Vogliamo dimostrare che $u_m \rightarrow u = \sigma T v$. In effetti, deduciamo dalle argomentazioni precedenti che u_m è precompatto in $C^2(\overline{\Omega})$. Per ogni sottosuccessione u_{m_k} convergente in $C^2(\overline{\Omega})$, se u_{m_k} converge a qualche $\tilde{u} \in C^2(\overline{\Omega})$, allora è chiaro che $\tilde{u}$ è soluzione di (34) e dunque $\tilde{u} \equiv u$ per il principio del massimo per equazioni lineari. Segue che u_m stesso deve convergere in $C^2(\overline{\Omega})$ a $u = \sigma T v$. Perciò T è compatto.

2. Se $u = \sigma T u$ per qualche $\sigma \in [0, 1]$, allora u soddisfa

$$(35) \quad \begin{cases} - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\sigma a_i(x, u, \nabla u) + (1 - \sigma) \frac{\partial u}{\partial x_i} \right] + \sigma b(x, u, \nabla u) = 0 & \text{in } \Omega \\ u = \sigma \phi & \text{su } \partial\Omega \end{cases}$$

Le condizioni di struttura sono assunte in questo teorema. Dalle stime a priori della sezione precedente, esistono $M > 0$ e $0 < \gamma < 1$ tali che

$$(36) \quad |u|_{1,\gamma;\Omega} \leq M.$$

Adesso riscriviamo (35) in forma di non-divergenza:

$$(37) \quad - \left[\sigma \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial a_i}{\partial \eta_j} \frac{\partial u}{\partial x_i \partial x_j} + (1 - \sigma) \Delta u \right] + \sigma \left[\frac{\partial a_i}{\partial x_i} + \frac{\partial a_i}{\partial z} \frac{\partial u}{\partial x_i} + b \right] = 0,$$

dove i coefficienti appartengono a $C^{\alpha\gamma}(\overline{\Omega})$, per (36). La teoria di Schauder implica che $u \in C^{2,\alpha\gamma}(\overline{\Omega})$ e che esiste $C > 0$, indipendente da σ e u , tale che

$$|u|_{2,\alpha\gamma} \leq C,$$

che implica

$$|u|_{1,\alpha;\Omega} \leq M.$$

La terza condizione del teorema di Leray-Schauder è soddisfatta.

Il teorema di Leray-Schauder implica che T ha un punto fisso, che è esattamente una soluzione del problema di Dirichlet. L'argomentazione precedente mostra che $u \in C^{2,\alpha\gamma}(\overline{\Omega})$ e dunque i coefficienti (37) ($\sigma = 1$) appartengono a $C^\alpha(\overline{\Omega})$.

Applicando nuovamente il teorema di Schauder, concludiamo che $u \in C^{2,\alpha}(\overline{\Omega})$. $\square$

Il prossimo risultato esibisce condizioni sufficienti alla stabilità della soluzione di (41). A tal scopo assumiamo le seguenti condizioni di struttura: per ogni $(x, y, \eta) \in \Omega \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$,

$$(38) \quad \sum_{i=1}^n a_i(x, y, \eta) \eta_i \geq |\eta|^2 - g^2(x),$$

$$(39) \quad \sum_{i=1}^n |a_i(x, y, \eta)| \geq \Lambda[|\eta| - g(x)],$$

$$(40) \quad |b(x, y, \eta)| \geq \Lambda[|\eta|^2 - f(x)],$$

dove $f, g \geq 0$ e $f, g \in L^1(\Omega)$. Per semplicità assumiamo a_i, b continui rispetto a (x, y, η) .

TEOREMA 21. *Si assumino le condizioni (38)-(44) e (33). Sia $F_0 = \|g\|_{L^q} + \|f\|_{L^{q_*}} < +\infty$ per qualche $q > n$, dove $q_* = nq/(n+q)$. Allora per una soluzione debole $u \in H^1(\Omega)$ di (28),*

$$\operatorname{ess\,sup}_{\Omega} u \leq \sup_{\partial\Omega} u^+ + CF_0,$$

dove C dipende solo da n, Λ e $\operatorname{diam}(\Omega)$.

CAPITOLO 3

Modello matematico di un elettrolizzatore

La formulazione del sistema di equazioni e la successiva analisi teorica presentate in questo capitolo traggono fondamento dai recenti risultati ottenuti da Alberti, Gerner e Santacesaria [1]. Nel loro lavoro, gli autori formalizzano il modello termo-chimico di un elettrolizzatore per affrontare una classe complessa di problemi inversi, mirati alla ricostruzione dei coefficienti non lineari a partire da set di misurazioni fisiche. Tuttavia, ai fini di questa tesi, l'attenzione è posta in modo esclusivo e rigoroso sul problema diretto. L'impianto dimostrativo che segue, volto a garantire la buona posizione del sistema termo-chimico e sviluppato nei Teoremi successivi, riprende e adatta i risultati di esistenza e unicità formulati nella prima parte dell'articolo citato. In particolare, la gestione dell'accoppiamento non lineare tra i campi di concentrazione e temperatura, affrontata mediante i teoremi di punto fisso, costituisce la base per le successive implementazioni e simulazioni numeriche.

1. Motivazioni

L'idrogeno è da tempo considerato un elemento centrale nelle strategie energetiche globali. Sebbene non sia una fonte energetica primaria, ma un vettore energetico, il suo ruolo è cruciale. L'idrogeno immagazzina energia per un periodo di tempo e può rilasciarla per alimentare processi o dispositivi, come le celle a combustibile, che convertono l'idrogeno in energia elettrica con l'unica emissione di acqua. A differenza delle fonti energetiche primarie (come il sole o il vento), i vettori come l'idrogeno non esistono in natura in una forma immediatamente utilizzabile, ma devono essere prodotti. La loro importanza risiede nella capacità di stoccare grandi quantità di energia rinnovabile in eccesso, risolvendo il problema dell'intermittenza delle fonti come l'eolico e il solare e garantendo la stabilità della rete elettrica.

Però non tutto l'idrogeno ha lo stesso impatto ambientale. Per distinguerne l'origine e i processi di produzione, si utilizza una classificazione basata su "colori". L'idrogeno blu si ottiene principalmente dal reforming del gas naturale (Steam Methane Reforming o SMR), ma con l'implementazione di sistemi di cattura e stoccaggio della CO_2 (Carbon Capture and Storage, CCS) che ne riducono l'impatto ambientale. Rappresenta una tecnologia di transizione, in grado di sfruttare le infrastrutture esistenti del gas naturale per avviare l'economia dell'idrogeno su larga scala, sebbene le emissioni non siano completamente azzerate. L'idrogeno grigio, prodotto anch'esso dal gas naturale, è attualmente il più diffuso, anche se altamente inquinante, poiché le emissioni di CO_2 derivanti dal processo non vengono catturate ma rilasciate in atmosfera. Ancora più impattante è l'idrogeno nero o marrone, derivato dalla gassificazione del carbone, un processo che genera le emissioni di CO_2 più elevate in assoluto. L'idrogeno turchese, prodotto attraverso la pirolisi del metano, genera carbonio solido invece di anidride carbonica. Si tratta di una tecnologia emergente che offre

un compromesso tra costi e sostenibilità, evitando le emissioni gassose di CO_2 e producendo un sottoprodotto solido che può essere riutilizzato o immagazzinato più facilmente.

L'idrogeno verde rappresenta la forma più pulita e sostenibile: viene prodotto attraverso l'elettrolisi dell'acqua, alimentata esclusivamente da fonti rinnovabili (come il solare, l'eolico e l'idroelettrico), senza emissioni di anidride carbonica. È considerato la soluzione ideale per un futuro a basse emissioni, sebbene oggi i costi di produzione siano ancora elevati a causa del prezzo delle fonti rinnovabili e delle tecnologie di elettrolisi.

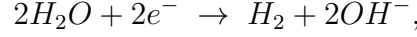
Oltre alla funzione di accumulo energetico, l'idrogeno verde può contribuire alla decarbonizzazione di settori difficili da elettrificare, oggi fortemente dipendenti dai combustibili fossili. Nel settore dei trasporti pesanti (camion, treni, navi e aerei), i veicoli a celle a combustibile alimentati a idrogeno offrono autonomie e tempi di rifornimento molto più rapidi rispetto alla ricarica delle batterie, rendendoli una valida alternativa. Nell'industria, l'idrogeno è già una materia prima essenziale (ad esempio per la produzione di ammoniaca e metanolo) e in prospettiva potrà sostituire il carbone come agente riducente nella produzione di acciaio, abbattendo drasticamente le emissioni di CO_2 del settore siderurgico, che rappresenta uno dei principali emettitori a livello globale.

1.1. La cella elettrolitica. Il cuore della produzione dell'idrogeno verde è la cella elettrolitica, un dispositivo che utilizza energia elettrica per guidare una reazione chimica non spontanea: la scissione dell'acqua (elettrolisi) in ossigeno e idrogeno. È composta da tre elementi principali: un anodo, un catodo e un elettrolita che li separa. Entrambi gli elettrodi sono immersi in un elettrolita e collegati a una sorgente di corrente continua. Nella cella elettrolitica, l'elettrolita permette il passaggio della corrente e il movimento degli ioni tra l'anodo e il catodo, completando il circuito elettrico. Le celle elettrolitiche tradizionali, note come celle alcaline, si basano su un elettrolita liquido (tipicamente una soluzione acquosa di idrossido di potassio) e sono una tecnologia consolidata. Sebbene siano robuste e a basso costo, presentano limiti di efficienza e ingombro a causa della natura corrosiva dell'elettrolita. Le celle a membrana a scambio protonico (PEM - Proton Exchange Membrane) utilizzano invece un elettrolita solido, costituito da una sottile membrana polimerica. Questa tecnologia è molto più compatta e performante, ideale per la produzione di idrogeno ad alta purezza. Inoltre, le celle PEM hanno il vantaggio di rispondere rapidamente alle variazioni di potenza, caratteristica che le rende particolarmente adatte all'integrazione con le fonti rinnovabili, che per loro natura sono soggette a oscillazioni nella disponibilità di energia. Tuttavia, il loro funzionamento in un ambiente acido richiede l'uso di catalizzatori molto costosi e rari, come il platino e l'iridio.

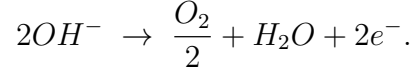
1.1.1. Celle a membrana a scambio anionico (AEM). Un tipo emergente di cella elettrolitica è la cella a membrana a scambio anionico (AEM - Anion Exchange Membrane). In questo dispositivo, gli ioni negativi (anioni, come gli ioni idrossido OH^-) attraversano una membrana a scambio anionico. La membrana separa l'anodo dal catodo, consentendo la conduzione degli anioni e impedendo il mescolamento dei gas prodotti, il che garantisce un'elevata purezza dell'idrogeno e riduce il rischio di miscelazione esplosiva con l'ossigeno. Le celle AEM suscitano particolare interesse perché combinano i vantaggi delle celle alcaline tradizionali (bassi costi dei materiali) e delle celle PEM (design compatto e produzione di gas puri). Dal punto di vista dei materiali, le celle AEM offrono un vantaggio notevole: il loro funzionamento in ambiente alcalino consente di utilizzare catalizzatori non nobili, come

nicel, ferro o cobalto, riducendo significativamente i costi rispetto alle celle PEM. Inoltre, a differenza delle celle alcaline tradizionali, le AEM non richiedono elettroliti caustici concentrati, migliorando la sicurezza operativa e permettendo un design più compatto.

Il processo elettrochimico all'interno della cella si articola in due semireazioni. Al catodo, l'acqua viene ridotta, un processo in cui si acquistano elettroni:



con produzione di idrogeno gassoso e rilascio di ioni idrossido. Questi ioni idrossido, carichi negativamente, sono attratti dall'anodo e attraversano la membrana AEM. Una volta raggiunta la superficie dell'anodo, subiscono ossidazione (perdita di elettroni):



In questo modo, il circuito elettrico si chiude e i due prodotti gassosi, idrogeno e ossigeno, vengono raccolti separatamente. La purezza dell'idrogeno ottenuto è un aspetto essenziale, soprattutto per applicazioni come le celle a combustibile, che richiedono un combustibile privo di contaminanti.

Il futuro delle celle AEM è legato alla capacità della ricerca di migliorare la stabilità e la conducibilità delle membrane, che rimangono un'area di sviluppo cruciale, e di sviluppare catalizzatori più resistenti. Il superamento di queste sfide potrebbe portare le celle AEM a diventare una delle tecnologie più convenienti per la produzione di idrogeno verde su larga scala, con potenziali applicazioni sia per la produzione distribuita (ad esempio, per stazioni di rifornimento o comunità) sia per l'integrazione nei futuri hub energetici alimentati da rinnovabili.

In definitiva, l'idrogeno verde prodotto tramite elettrolisi, e in particolare con tecnologie innovative come le celle AEM, non è soltanto un combustibile alternativo. Rappresenta un ponte verso un sistema energetico più flessibile, resiliente e privo di emissioni, capace di coniugare la sostenibilità ambientale con lo sviluppo industriale.

2. Derivazione

In questa tesi si analizza una parte della multifisica che regola il funzionamento di una cella elettrolitica: si modella il comportamento del campo elettrico interno allo scopo di determinare, per quanto possibile, la temperatura e la concentrazione delle specie chimiche. Il dominio spaziale $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ è la cella stessa e pertanto è compatto e semplicemente connesso. Consideriamo le seguenti equazioni di Maxwell

$$(41) \quad \text{rot}(E) = -\partial_t B \quad \text{e} \quad \text{div}(E) = \frac{\rho}{\epsilon_0},$$

dove E è il campo elettrico, B è il campo magnetico, ρ è la densità di carica elettrica ed ϵ_0 è la costante dielettrica del vuoto. Per semplicità, denotiamo $\tilde{\rho} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$.

Analizziamo una situazione statica, per cui $\partial_t B = 0$: da (41), $\text{rot}(E) = 0$ e dunque esiste un potenziale ϕ tale che

$$E = -\nabla\phi.$$

I processi nella cella sono essenzialmente determinati dalla temperatura T del sistema, dalla concentrazione c_i di differenti tipi di molecole e dalla posizione $\mathbf{x}$. Per questa tesi, assumiamo

$$(42) \quad \phi = \phi(T(\mathbf{x}), c(\mathbf{x}), \mathbf{x}),$$

dove $M \in \mathbb{N}$, $M \geq 1$, è il numero di specie distinte e $c(\mathbf{x}) = (c_1(\mathbf{x}), \dots, c_M(\mathbf{x}))$. Possiamo supporre che le quantità coinvolte possano dipendere dalla temperatura T e dalle concentrazioni c_i . Consideriamo inoltre la seguente equazione

$$(43) \quad \text{div}(N_i(T(\mathbf{x}), c(\mathbf{x}), \mathbf{x}) = g_i(T(\mathbf{x}), c(\mathbf{x}), \mathbf{x}),$$

dove N_i è il flusso della i -esima specie e g_i è un termine sorgente, a priori incognito.

Per la legge di Fick

$$(44) \quad N_i(T(\mathbf{x}), c(\mathbf{x}), \mathbf{x}) = -D_i(T(\mathbf{x}), c(\mathbf{x}), \mathbf{x}),$$

dove D_i è il coefficiente di diffusione della i -esima specie, si ottengono le M equazioni

$$(45) \quad -\text{div}(D_i(T(\mathbf{x}), c(\mathbf{x}), \mathbf{x}) \nabla c_i(\mathbf{x})) = g_i(T(\mathbf{x}), c(\mathbf{x}), \mathbf{x}), \quad i = 1, \dots, M.$$

Combinando invece (41) e (42), si ottiene

$$(46) \quad -\text{div} \left(\partial_T \phi \nabla T + \sum_{i=1}^M \partial_{c_i} \phi \nabla c_i + \nabla_x \phi \right) = \tilde{\rho}$$

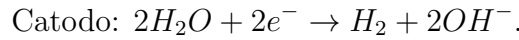
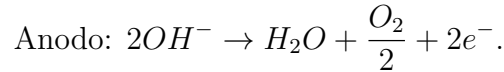
Ora, se $q_i \in \mathbb{R}$ è la carica elettrica della i -esima specie, allora la densità di carica in $\mathbf{x}$ della i -esima specie è semplicemente $\rho_i(\mathbf{x}) = q_i c_i(\mathbf{x})$ e la densità elettrica totale è

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^M q_i c_i(\mathbf{x}).$$

Abbiamo ottenuto il seguente sistema di PDE

$$\begin{aligned} -\text{div}(D_i(T(\mathbf{x}), c(\mathbf{x}), \mathbf{x}) \nabla c_i(\mathbf{x})) &= g_i(T(\mathbf{x}), c(\mathbf{x}), \mathbf{x}), \quad i = 1, \dots, M \\ -\text{div} \left(\partial_T \phi \nabla T + \sum_{i=1}^M \partial_{c_i} \phi \nabla c_i + \nabla_x \phi \right) &= \sum_{i=1}^M \tilde{q}_i c_i(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

2.1. Sorgenti. Per semplicità, si considerano solo le specie essenziali al funzionamento della cella: H_2O , O_2 , H_2 , OH^- ed e^- . Si osserva che i corrispondenti termini sorgente sono legati tra loro. A tale scopo ricordiamo le seguenti reazioni:



Ogni qualvolta viene prodotto H_2O , si produce anche O_2 ed e^- e OH^- viene distrutto. Similmente quando H_2O è distrutto, si distrugge anche e^- e si produce H_2 e OH^- . Si nota che se non viene prodotto H_2O , allora non vengono prodotte o distrutte nemmeno le altre specie, poiché H_2O è presente in entrambe le reazioni. Questi processi di produzione ed annichilazione avvengono con una specifica misura:

$$\begin{aligned} g_{H_2O} &= -2g_{OH^-}, \quad \frac{g_{O_2}}{2} = -2g_{OH^-}, \quad 2g_{e^-} = -2g_{OH^-}, \quad g_{H_2=0} \text{ in } U = \{g_{H_2O} > 0\} \\ -2g_{e^-} &= -2g_{H_2O}, \quad g_{H_2} = -2g_{H_2O}, \quad 2g_{OH^-} = -2g_{H_2O}, \quad g_{O_2} = 0 \text{ in } V = \{g_{H_2O} < 0\} \\ g_{H_2O} &= g_{H_2} = g_{O_2} = g_{OH^-} = g_{e^-} = 0 \text{ in } K = \{g_{H_2O} = 0\}. \end{aligned}$$

Si possono dunque esprimere le specie g_{H_2} , g_{O_2} , g_{OH^-} e g_{e^-} in termini del solo g_{H_2O} , su tutto il dominio $U \cup V \cup K$. Per cui il numero di termini sorgente incognite si riduce a 1.

2.2. Condizioni al bordo: input e misurazioni. Vogliamo capire il tipo di condizioni al contorno che possiamo imporre. Notiamo innanzitutto che dalla legge di Fick (44) la densità di corrente in $\mathbf{x}$ è data da

$$J(\mathbf{x}) = -q_{e^-} D_{e^-} \nabla c_{e^-}.$$

Poiché possiamo inserire corrente sul bordo $\partial\Omega$ della cella, imponiamo

$$N \cdot J \leftrightarrow D_{e^-} N \cdot \nabla c_{e^-}.$$

Più realisticamente possiamo imporre la corrente solo su un sottoinsieme di $\partial\Omega$ ma analizziamo un modello semplificato. Similmente, a priori possiamo controllare il flusso d'acqua in entrata, imponendo $D_{H_2O} N \cdot \nabla c_{H_2O}$. Nel caso ideale, tutto l' OH^- prodotto nella cella viene riutilizzato per produrre H_2O , O_2 ed e^- : OH^- non attraversa il bordo della cella, quindi $N \cdot \nabla c_{OH^-} = 0$ su $\partial\Omega$. Infine, O_2 e H_2 lasciano il sistema e si suppone di poter misura in qualche modo il loro flusso di uscita. Per quanto riguarda la temperatura, essa può facilmente essere imposta dall'esterno. Otteniamo dunque:

$$\begin{aligned} \text{Input: } (T|_{\partial\Omega}, D_{e^-} N \cdot \nabla c_{e^-}, D_{H_2O} N \cdot \nabla c_{H_2O}, D_{O_2} N \cdot \nabla c_{O_2}, D_{H_2} N \cdot \nabla c_{H_2}) \\ N \cdot \nabla c_{OH^-} = 0. \end{aligned}$$

In effetti, nei canali dove O_2 ed H_2 escono possiamo misurare la concentrazione di ogni specie e quindi possiamo misurare le condizioni di Dirichlet per ognuna.

Inoltre possiamo misurare il valore della temperatura in un punto leggermente fuori dal bordo, in direzione normale, e sottrarlo al valore sul punto ortogonale del bordo, ottenendo così una stima di $N \cdot \nabla T$. Quindi troviamo

$$\text{Misurazioni: } (N \cdot \nabla T, c_{e^-}|_{\partial\Omega}, c_{H_2O}|_{\partial\Omega}, c_{O_2}|_{\partial\Omega}, c_{H_2}|_{\partial\Omega}, c_{OH^-}|_{\partial\Omega})$$

Inoltre, possiamo misurare anche il voltaggio tra due punti sul bordo, ovvero ottenere una misura di $(\nabla\phi)^\parallel$: possiamo di conseguenza stimare anche

$$(\nabla\tilde{\phi})^\parallel = \partial_T \tilde{\phi} (\nabla T)^\parallel + \sum_{i=1}^M \partial_{c_i} \tilde{\phi} (\nabla c_i)^\parallel + (\nabla_x \tilde{\phi})^\parallel \text{ su } \partial\Omega.$$

3. Esistenza e unicità della soluzione

Definiamo

$$\dot{C}^1(\mathbb{R}^n \times \overline{\Omega}) = \left\{ f \in C_{loc}^1(\mathbb{R}^n \times \overline{\Omega}) : \sup_{(z,x) \in \mathbb{R}^n \times \overline{\Omega}} |\nabla f(z,x)| < +\infty \right\},$$

dove $\nabla f = (\nabla_z f, \nabla_x f)$.

Si dimostra un teorema di esistenza e unicità della soluzione del problema modello, nel caso in cui i termini sorgente e il coefficiente di diffusione dipendono solo dalla posizione [1].

TEOREMA 22. *Siano $M \in \mathbb{N}$, $k > 0$, $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un dominio C^1 limitato, $g_i \in L^{\frac{6}{5}}(\Omega)$, $\phi(t, y, x) \in \dot{C}^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^M \times \overline{\Omega}, \mathbb{R})$, $q_i \in L^{\frac{3}{2}}(\Omega)$, $D_i \in L^\infty(\Omega)$, con $k \leq D_i(x)$ q.o. e $k \leq \partial_t \phi(t, y, x)$ per ogni $(t, y, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^M \times \overline{\Omega}$, per ogni $1 \leq i \leq M$. Allora per ogni $m_i \in \mathbb{R}$, $\tau \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$, $\sigma_i \in H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$, $1 \leq i \leq M$, che soddisfi le condizioni di compatibilità*

$$(47) \quad \int_{\partial\Omega} \sigma_i = \int_{\Omega} g_i(x) d^3x \quad \forall 1 \leq i \leq M,$$

esiste un'unica soluzione debole $(T, c) \in H^1(\Omega) \times (H^1(\Omega))^M$ che risolve il sistema di PDE

$$(48) \quad -\operatorname{div}(D_i \nabla c_i) = g_i \text{ in } \Omega, \quad N \cdot (D_i \nabla c_i) = \sigma_i \text{ su } \partial\Omega, \quad \int_{\Omega} c_i d^3x = m_i, \quad 1 \leq i \leq M$$

$$(49) \quad \begin{aligned} & -\operatorname{div} \left(\partial_t \phi(T(x), c(x), x) \nabla T + \sum_{i=1}^M \partial_{y_i} \phi(T(x), c(x), x) \nabla c_i + \nabla_x \phi(T(x), c(x), x) \right) = \\ & = \sum_{i=1}^M \tilde{q}_i c_i(x) \text{ in } \Omega, \quad T|_{\partial\Omega} = \tau \text{ su } \partial\Omega, \end{aligned}$$

dove $c(x) = (c_1(x), \dots, c_M(x))$.

DIMOSTRAZIONE. Osserviamo innanzitutto che per ogni $1 \leq i \leq M$, grazie alle condizioni di compatibilità (47), i risultati sui problemi lineari di Neumann assicurano esistenza e unicità della soluzione

$$c_i \in H^1(\Omega)$$

per (48). Rimane dunque da provare esistenza e unicità di $T \in H^1(\Omega)$ dato $c \in (H^1(\Omega))^M$.

Esistenza: Vogliamo applicare il teorema di Leray-Schauder. A tale scopo consideriamo, per $v \in L^2(\Omega)$ fissato, le seguenti PDE

$$(50) \quad \begin{aligned} & -\operatorname{div} \left(\partial_t \phi(v(x), c(x), x) \nabla T + \sum_{i=1}^M \partial_{y_i} \phi(v(x), c(x), x) \nabla c_i + \nabla_x \phi(v(x), c(x), x) \right) = \\ & = \sum_{i=1}^M \tilde{q}_i c_i(x), \quad T|_{\partial\Omega} = \tau \text{ su } \partial\Omega. \end{aligned}$$

Per ipotesi $0 < k \leq \sup_{(t,y,x) \in \mathbb{R}^{1+M} \times \overline{\Omega}} \partial_t \phi(t, y, x) < +\infty$ e dalla teoria standard di esistenza

e unicità della soluzione di problemi ellittici, per ogni $v \in L^2(\Omega)$ fissato esiste un unico $T_v \in H^1(\Omega)$ che risolve (50).

Consideriamo il seguente operatore (non lineare)

$$(51) \quad \begin{aligned} A : (L^2(\Omega), \|\cdot\|_{L^2(\Omega)}) & \rightarrow (H^1(\Omega), \|\cdot\|_{L^2(\Omega)}) \\ v & \mapsto T_v. \end{aligned}$$

Dimostriamo che A è continuo e compatto. Siano dunque $v_1, v_2 \in L^2(\Omega)$ e denotiamo $u_k := A(v_k) = T_{v_k}$, per $k = 1, 2$. Segue allora dalla definizione di soluzione debole che

$$(52) \quad \begin{aligned} - \int_{\Omega} \partial_t \phi(v_k, c, x) \nabla u_k \cdot \nabla \psi d^3x &= - \sum_{i=1}^M \int_{\Omega} \tilde{q}_i c_i(x) \psi d^3x \\ &+ \sum_{i=1}^M \int_{\Omega} \partial_{y_i} \phi(v_k, c, x) \nabla c_i \cdot \nabla \psi d^3x \\ &+ \int_{\Omega} \nabla_x \phi(v_k, c, x) \cdot \nabla \psi d^3x, \end{aligned}$$

per ogni $\psi \in H_0^1(\Omega)$ e $k = 1, 2$. Osserviamo che per ipotesi $u_k|_{\partial\Omega} = \tau$, per $k = 1, 2$, e dunque $u_1 - u_2 \in H_0^1(\Omega)$. Ponendo allora $\psi = u_1 - u_2 = \bar{u}$ in (52), otteniamo

$$\begin{aligned}
(53) \quad k \|\nabla \bar{u}\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq \int_{\Omega} \partial_t \phi(v_1, c, x) \nabla \bar{u} \cdot \nabla \bar{u} d^3x = \\
&= \int_{\Omega} \partial_t \phi(v_1, c, x) \nabla u_1 \cdot \nabla \bar{u} d^3x - \int_{\Omega} \partial_t \phi(v_1, c, x) \nabla u_2 \cdot \nabla \bar{u} d^3x = \\
&= \int_{\Omega} \partial_t \phi(v_1, c, x) \nabla u_1 \cdot \nabla \bar{u} d^3x - \int_{\Omega} (\partial_t \phi(v_1, c, x) - \partial_t \phi(v_2, c, x)) \nabla u_2 \cdot \nabla \bar{u} d^3x \\
&\quad - \int_{\Omega} \partial_t \phi(v_2, c, x) \nabla u_2 \cdot \nabla \bar{u} d^3x = \\
&= \sum_{i=1}^M \int_{\Omega} (\partial_{y_i} \phi(v_2, c, x) - \partial_{y_i} \phi(v_1, c, x)) \nabla c_i \cdot \nabla \bar{u} d^3x \\
&\quad + \int_{\Omega} (\nabla_x \phi(v_2, c, x) - \nabla_x \phi(v_1, c, x)) \cdot \nabla \bar{u} d^3x \\
&\quad - \int_{\Omega} (\partial_t \phi(v_1, c, x) - \partial_t \phi(v_2, c, x)) \nabla u_2 \cdot \nabla \bar{u} d^3x.
\end{aligned}$$

Per Cauchy-Schwarz, si ha

$$\begin{aligned}
(54) \quad k \|\nabla \bar{u}\|_{L^2(\Omega)} &\leq \sum_{i=1}^M \|(\partial_{y_i} \phi(v_2(\cdot), c(\cdot), \cdot) - \partial_{y_i} \phi(v_1(\cdot), c(\cdot), \cdot)) \nabla c_i\|_{L^2(\Omega)} + \\
&\quad + \|\nabla_x \phi(v_2(\cdot), c(\cdot), x) - \nabla_x \phi(v_1(\cdot), c(\cdot), x)\|_{L^2(\Omega)} + \\
&\quad + \|(\partial_t \phi(v_1(\cdot), c(\cdot), x) - \partial_t \phi(v_2(\cdot), c(\cdot), x)) \nabla u_2\|_{L^2(\Omega)}.
\end{aligned}$$

Dimostriamo ora la continuità dell'operatore A . Osserviamo ora che, se $v \in L^2(\Omega)$ e $\{v_m\}_m \subset L^2(\Omega)$ tale che $v_m \rightarrow v$ in $L^2(\Omega)$, nella disuguaglianza di sopra possiamo porre v al posto di v_2 , $A(v)$ al posto di u_2 , v_m al posto di v_1 e $A(v_m)$ al posto di u_1 . In questo modo ∇u_2 risulta indipendente da m e quindi, poiché tutte le derivate di ϕ sono continue e globalmente limitate, si ha per convergenza dominata che ogni sottosuccessione di v_m ammette a propria volta una sottosuccessione tale che $\nabla A(v_m) \rightarrow \nabla A(v)$ in $L^2(\Omega)$. Poiché $A(v) - A(v_m) \in H_0^1(\Omega)$, per la disuguaglianza di Poicaré si ha che $A(v_m) \rightarrow A(v)$ in $L^2(\Omega)$.

Dimostriamo ora la compattezza. Da (54) segue che

$$k \|\nabla \bar{u}\|_{L^2(\Omega)} \leq a \left(\sum_{i=1}^M \|c_i\|_{L^2(\Omega)} + \|\nabla u_2\|_{L^2(\Omega)} + \sqrt{\text{vol}(\Omega)} \right),$$

dove $a := 2 \sup_{(t,y,x) \in \mathbb{R}^{1+M} \times \bar{\Omega}} |\nabla \phi(t, y, x)|$, per ogni $v_1, v_2 \in L^2(\Omega)$.

Denotando $b = \frac{a}{\sqrt{\text{vol}(\Omega)}}$, per Poicaré si ha

$$\|\bar{u}\|_{H^1(\Omega)} \leq \frac{C_P + 1}{k} b \left(\sum_{i=1}^M \|c_i\|_{L^2(\Omega)} + \|\nabla u_2\|_{L^2(\Omega)} + 1 \right).$$

Per arbitrarietà di $v \in L^2(\Omega)$, poniamo v al posto di v_1 e 0 al posto di v_2 , per cui

$$(55) \quad \|A(v)\|_{H^1(\Omega)} \leq \|A(0)\|_{H^1(\Omega)} + \frac{C_P + 1}{k} b \left(\sum_{i=1}^M \|c_i\|_{L^2(\Omega)} + \|\nabla A(0)\|_{L^2(\Omega)} + 1 \right),$$

dove $C_P > 0$ è la costante della disuguaglianza di Poincaré. Concludiamo che A mappa $L^2(\Omega)$ in un sottoinsieme limitato di $H^1(\Omega)$ e quindi, per la compattezza dell'immersione $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$, è compatto. Infine, poiché $(L^2(\Omega), \|\cdot\|_{L^2(\Omega)})$ è uno spazio di Banach e $A(v)$ è globalmente limitato in $L^2(\Omega)$, segue dal teorema di Leray-Schauder che A ammette un punto fisso, che è la soluzione di (49).

Unicità: sappiamo già che le soluzioni $c_i \in H^1(\Omega)$, $1 \leq i \leq M$, di (48) sono uniche. Siano ora $T_1, T_2 \in H^1(\Omega)$ due soluzioni di (49). Denotiamo $\hat{\phi}_k(x) = \phi(T_k(x), c(x), x)$, $k = 1, 2$. Si ha

$$\nabla \hat{\phi}_k(x) = \partial_t \phi(T_k(x), c(x), x) \nabla T_k + \sum_{i=1}^M \partial_{y_i} \phi(T_k(x), c(x), x) \nabla c_i + \nabla_x \phi(T(x), c(x), x)$$

$$\text{e } \hat{\phi}_k|_{\partial\Omega}(x) = \phi(T_k|_{\partial\Omega}(x), c|_{\partial\Omega}(x), x), \text{ con } c|_{\partial\Omega} = (c_1|_{\partial\Omega}, \dots, c_M|_{\partial\Omega}).$$

Da (49) si ha $\Delta \hat{\phi}_k(x) = - \sum_{i=1}^M \tilde{q}_i c_i(x)$ e ponendo $\bar{\phi} = \hat{\phi}_1(x) - \hat{\phi}_2(x)$, concludiamo che $\Delta \bar{\phi} = 0$

e $\bar{\phi}|_{\partial\Omega} = 0$, per cui $\bar{\phi} = 0$ in Ω per la teoria standard sulle equazioni ellittiche con condizioni di Dirichlet. Quindi $\hat{\phi}_1(x) = \hat{\phi}_2(x)$ per q.o. $x \in \Omega$. Inoltre, per ipotesi, sappiamo che $\partial_t \phi(t, y, x) \geq k > 0$. Dunque, fissati $y \in \mathbb{R}^M$ e $x \in \bar{\Omega}$, $t \mapsto \phi(t, y, x)$ è strettamente crescente e quindi iniettiva. Concludiamo quindi che $\phi(T_1(x), c(x), x) = \phi(T_2(x), c(x), x)$ implica $T_1(x) = T_2(x)$, perciò la soluzione di (49) è unica. $\square$

Si può dimostrare esistenza e unicità anche quando le condizioni al contorno sono di Dirichlet.

TEOREMA 23. *Siano $M \in \mathbb{N}$, $k > 0$, $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un dominio C^1 limitato, $g_i \in L^{\frac{6}{5}}(\Omega)$, $\phi(t, y, x) \in \dot{C}^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^M \times \bar{\Omega}, \mathbb{R})$, $q_i \in L^{\frac{3}{2}}(\Omega)$, $D_i \in L^\infty(\Omega)$, con $k \leq D_i(x)$ q.o. e $k \leq \partial_t \phi(t, y, x)$ per ogni $(t, y, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^M \times \bar{\Omega}$, per ogni $1 \leq i \leq M$. Allora per ogni $\tau, \gamma_i \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$ esiste un'unica soluzione debole $(T, c) \in H^1(\Omega) \times (H^1(\Omega))^M$ che risolve il sistema di PDE*

$$(56) \quad -\operatorname{div}(D_i \nabla c_i) = g_i \text{ in } \Omega, c_i|_{\partial\Omega} = \gamma_i \text{ su } \partial\Omega, 1 \leq i \leq M$$

$$(57) \quad \begin{aligned} & -\operatorname{div} \left(\partial_t \phi(T(x), c(x), x) \nabla T + \sum_{i=1}^M \partial_{y_i} \phi(T(x), c(x), x) \nabla c_i + \nabla_x \phi(T(x), c(x), x) \right) = \\ & = \sum_{i=1}^M \tilde{q}_i c_i(x) \text{ in } \Omega, T|_{\partial\Omega} = \tau \text{ su } \partial\Omega, \end{aligned}$$

dove $c(x) = (c_1(x), \dots, c_M(x))$.

DIMOSTRAZIONE. Per la teoria sulle PDE ellittiche lineari con condizioni di Dirichlet, concludiamo che le soluzioni $c_i \in H^1(\Omega)$, $1 \leq i \leq M$, di (56) esistono e sono uniche. Esistenza

e unicità di una soluzione debole $T \in H^1(\Omega)$ per (57) si dimostrano esattamente come nel Teorema 22. $\square$

Nel prossimo teorema studiamo l'esistenza della soluzione nel caso in cui i coefficienti di diffusione D_i e le sorgenti g_i dipendono anch'esse dalla temperatura T e dalle concentrazioni c_i : il caso è quindi quasi-lineare.

TEOREMA 24. *Siano $M \in \mathbb{N}$, $k > 0$, $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un dominio C^1 limitato, $g_i \in C^0(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^M \times \overline{\Omega})$, $\phi(t, y, x) \in \dot{C}^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^M \times \overline{\Omega}, \mathbb{R})$, $q_i \in L^{\frac{3}{2}}(\Omega)$, $D_i \in C^0(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^M \times \overline{\Omega})$, con $k \leq D_i(x)$ q.o. e $k \leq \partial_t \phi(t, y, x)$ per ogni $(t, y, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^M \times \overline{\Omega}$, per ogni $1 \leq i \leq M$. Allora per ogni $\tau, \gamma_i \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$ esiste un'unica soluzione debole $(T, c) \in H^1(\Omega) \times (H^1(\Omega))^M$ che risolve il sistema di PDE*

$$(58) \quad -\operatorname{div}(D_i(T(x), c(x), x) \nabla c_i) = g_i(T(x), c(x), x) \text{ in } \Omega, c_i|_{\partial\Omega} = \gamma_i \text{ su } \partial\Omega, 1 \leq i \leq M$$

$$(59) \quad \begin{aligned} & -\operatorname{div} \left(\partial_t \phi(T(x), c(x), x) \nabla T + \sum_{i=1}^M \partial_{y_i} \phi(T(x), c(x), x) \nabla c_i + \nabla_x \phi(T(x), c(x), x) \right) = \\ & = \sum_{i=1}^M \tilde{q}_i(x) c_i(x) \text{ in } \Omega, T|_{\partial\Omega} = \tau \text{ su } \partial\Omega, \end{aligned}$$

dove $c(x) = (c_1(x), \dots, c_M(x))$.

DIMOSTRAZIONE. Come nel Teorema 22, il nostro obiettivo è applicare il teorema di Leray-Schauder. Fissato dunque $(v, w) = (v, w_1, \dots, w_M) \in L^2(\Omega)^{1+M}$, consideriamo le PDE

$$(60) \quad -\operatorname{div}(D_i(v, w, x) \nabla c_i) = g_i(v, w, x) \text{ in } \Omega, c_i|_{\partial\Omega} = \gamma_i \text{ su } \partial\Omega, 1 \leq i \leq M$$

$$(61) \quad \begin{aligned} & -\operatorname{div} \left(\partial_t \phi(v, w, x) \nabla T + \sum_{i=1}^M \partial_{y_i} \phi(v, w, x) \nabla c_i + \nabla_x \phi(v, w, x) \right) = \\ & = \sum_{i=1}^M \tilde{q}_i(x) c_i(x) \text{ in } \Omega, T|_{\partial\Omega} = \tau \text{ su } \partial\Omega, \end{aligned}$$

Grazie alle ipotesi su D_i e $\partial_t \phi$, dalla teoria standard sulle equazioni ellittiche concludiamo che, per $(v, w) \in (L^2(\Omega))^{1+M}$ fissato, esiste un'unica soluzione debole $(T_{v,w}, c_{v,w})$ al problema (60)-(61). Possiamo allora definire l'operatore

$$(62) \quad \begin{aligned} A : ((L^2(\Omega))^{1+M}, \|\cdot\|_{L^2(\Omega)}) & \rightarrow ((H^1(\Omega))^{1+M}, \|\cdot\|_{L^2(\Omega)}) \\ (v, w) & \mapsto (T_{v,w}, c_{v,w}). \end{aligned}$$

Dimostriamo che A è un operatore continuo e compatto. Studiamo innanzitutto le concentrazioni. Siano $(v_1, w_1), (v_2, w_2) \in (L^2(\Omega))^{1+M}$ e denotiamo $c^k := c_{v_k, w_k}$ e $T_k := T_{v_k, w_k}$, per $k = 1, 2$. Dalla formulazione debole di (60), concludiamo

$$\int_{\Omega} D_i(v_k, w_k, x) \nabla c^k \cdot \nabla \psi(x) d^3x = \int_{\Omega} g_i(v_k, w_k, x) \psi(x) d^3x, \quad \forall \psi \in H_0^1(\Omega).$$

Osserviamo che $\bar{c}_i = c_i^1 - c_i^2 \in H_0^1(\Omega)$ e quindi possiamo prendere $\psi = \bar{c}_i$. Dalla formulazione debole di cui sopra e dalle assunzioni di ellitticit , otteniamo

$$\begin{aligned} k \|\nabla \bar{c}_i\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq \int_{\Omega} D_i(v_1, w_1, x) \nabla \bar{c}_i \cdot \nabla \bar{c}_i d^3x = \\ &= \int_{\Omega} (g_i(v_1, w_1, x) - g_i(v_2, w_2, x)) \bar{c}_i d^3x + \\ &+ \int_{\Omega} (D_i(v_1, w_1, x) - D_i(v_2, w_2, x)) \nabla c_i^2 \cdot \nabla \bar{c}_i d^3x \end{aligned}$$

e applicando le disuguaglianze di Poincar  e di Cauchy-Schwarz arriviamo alla stima

$$(63) \quad k \|\nabla \bar{c}_i\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq C_P \|g_i(v_1, w_1, \cdot) - g_i(v_2, w_2, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} + \|(D_i(v_1, w_1, \cdot) - D_i(v_2, w_2, \cdot)) \nabla c_i^2\|_{L^2(\Omega)}.$$

Siano adesso $(v, w) \in (L^2(\Omega))^{1+M}$ e $\{(v_m, w_m)\}_m \subset (L^2(\Omega))^{1+M}$ convergente a (v, w) in $L^2(\Omega)$. Ponendo in (63) (v_m, w_m) al posto di (v_1, w_1) e (v, w) al posto di (v_2, w_2) , concludiamo, per convergenza dominata e per il fatto che in questo caso $c_i^2 = c_{i,(v,w)}$   indipendente da m , che $\|\nabla c_i^m - \nabla c_i\|_{L^2(\Omega)} \rightarrow 0$, dove $c_i^m = c_{i,(v_m, w_m)}$ e $c_i = c_{i,(v,w)}$. Poich  $c_i^m - c_i \in H_0^1(\Omega)$, per la disuguaglianza di Poincar  si ha

$$(64) \quad c_{i,(v_m, w_m)} \rightarrow c_{i,(v,w)} \text{ in } H_0^1(\Omega), \quad 1 \leq i \leq M.$$

Analogamente, possiamo prendere la formulazione debole di (61) per ricavare la seguente stima (denotando $\bar{T} = T_1 - T_2$)

$$\begin{aligned} k \|\nabla \bar{T}\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq \int_{\Omega} \partial \phi(v_1, w_1, x) \nabla \bar{T} \cdot \nabla \bar{T} d^3x \\ &= \int_{\Omega} (\partial_t \phi(v_2, w_2, x) - \partial_t \phi(v_1, w_1, x)) \nabla T_2 \cdot \nabla \bar{T} d^3x \\ &+ \sum_{i=1}^M \int_{\Omega} \tilde{q}_i(x) \bar{c}_i(x) T d^3x \\ (65) \quad &+ \sum_{j=1}^M \int_{\Omega} \partial_{y_j} \phi(v_1, w_1, x) (\nabla c_j^2 - \nabla c_j^1) \cdot \nabla \bar{T} d^3x \\ &+ \int_{\Omega} (\nabla_x \phi(v_2, w_2, x) - \nabla_x \phi(v_1, w_1, x)) \cdot \nabla \bar{T} d^3x \\ &+ \sum_{h=1}^M \int_{\Omega} (\partial_{y_h} \phi(v_2, w_2, x) - \partial_{y_h} \phi(v_1, w_1, x)) \nabla c_h^2 \cdot \nabla \bar{T} d^3x. \end{aligned}$$

Siano di nuovo $(v, w) \in (L^2(\Omega))^{1+M}$ e $\{(v_m, w_m)\}_m \subset (L^2(\Omega))^{1+M}$ convergente a (v, w) in $L^2(\Omega)$. Poniamo in (65) (v_m, w_m) al posto di (v_1, w_1) e (v, w) al posto di (v_2, w_2) . Dalle stime (64) e (65), dalla disuguaglianza di H lder, dall'immersione di Sobolev $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^6(\Omega)$ e dal teorema di convergenza dominata, si ha che $\|\nabla T(v_m, w_m) - \nabla T(v, w)\|_{L^2(\Omega)} \rightarrow 0$. Poich  $T(v_m, w_m) - T(v, w) \in H_0^1(\Omega)$, segue dalla disuguaglianza di Poincar  che $T(v_m, w_m) - T(v, w) \in H^1(\Omega)$ e questo sostanzialmente garantisce la continuit  dell'operatore (62) rispetto alla norma $H^1(\Omega)$ nel codominio, quindi rispetto anche alla norma $L^2(\Omega)$.

Per quanto riguarda la compattezza di A , possiamo fissare $(v, w) \in (L^2(\Omega))^{1+M}$, $(v_1, w_1) = (v, w)$ e $(v_2, w_2) = (0, 0)$ in (63) e (65). Sfruttando la limitatezza globale delle quantità coinvolte troviamo innanzitutto che $\|c_{i,(v,w)}\|_{H^1(\Omega)} < C$, con $1 \leq i \leq M$, per qualche $0 < C < +\infty$ indipendente da (v, w) e quindi anche che $\|T, (v, w)\|_{H^1(\Omega)} < C$ è superiormente limitata e indipendente da (v, w) . Concludiamo che A mappa $(L^2(\Omega))^{1+M}$ in un sottoinsieme limitato di $((H^1(\Omega))^{1+M}, \|\cdot\|_{H^1(\Omega)})$, quindi la compattezza dell'immersione $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$ implica la compattezza dell'operatore A . Infine, poiché $\|A(v, w)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|A(v, w)\|_{H^1(\Omega)} \leq K$, per qualche $0 < K < +\infty$ indipendente da (v, w) , possiamo applicare il teorema di Leray-Schauder e dedurre l'esistenza di un punto fisso per A , che corrisponde alla soluzione debole del problema originale (58)-(59). $\square$

CAPITOLO 4

Esperimenti numerici

Nel presente capitolo si simula il trasporto di materia e calore nel canale di una cella elettrolitica AEM, risolvendo il sistema di PDE trovato nella derivazione del capitolo precedente. Si è già osservato che le concentrazioni delle specie chimiche sono legate tra loro e pertanto nella simulazione se ne calcola una sola.

Il sistema di equazioni si riduce dunque al seguente:

$$(66) \quad \begin{cases} \operatorname{div}(D(x)\nabla c(x)) = -g_0(x) & x \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, \\ \operatorname{div}(\partial_T \phi \nabla T + \partial_c \phi \nabla c + \nabla_x \phi) = -qc & x \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, \\ \partial_\nu c(x) = \psi(x) & x \in \partial\Omega, \\ T|_{\partial\Omega} = T_0 & x \in \partial\Omega, \\ \phi = \phi(T, c, x) & x \in \overline{\Omega}. \end{cases}$$

La simulazione numerica analizza il trasporto di materia e calore all'interno di un singolo canale del bipolar plate. Il dominio di calcolo rappresenta una sezione bidimensionale piana del canale, parallela al flusso, schematizzata come un quadrato di lato adimensionale. Verrà utilizzato il metodo risolutivo alle differenze finite. Per garantirne la stabilità numerica, evitando problemi di malcondizionamento delle matrici, le grandezze fisiche sono state opportunamente scalate e adimensionalizzate.

Nelle sezioni a seguire viene discussa l'implementazione. In particolare, nella sezione 1.2 si illustra l'algoritmo iterativo scelto per la risoluzione dell'equazione della temperatura e nella sezione 1.1 si descrivono tutti i parametri fisici e numerici di input necessari per inizializzare e risolvere il modello. Il capitolo si conclude con la discussione dei risultati della simulazione.

1. Implementazione

1.1. Descrizione dei Parametri di Input. Gli algoritmi richiedono in ingresso i seguenti parametri fisici e numerici per l'inizializzazione e la risoluzione del modello:

- h : Passo di discretizzazione spaziale. Definisce la risoluzione della griglia bidimensionale su cui vengono risolte le equazioni differenziali.
- D_{val} : Valore base del coefficiente di diffusione di massa, impiegato per generare un campo di diffusione D uniforme su tutto il dominio.
- g_{val}, g : Termine sorgente per l'equazione di conservazione della massa. Rappresenta la generazione interna di specie chimiche (es. ioni), assunta spazialmente costante.
- q_{val} : Coefficiente di proporzionalità per l'effetto Joule. Mette in relazione la concentrazione locale con il calore generato per dissipazione elettrica nel termine sorgente dell'equazione termica.

- T_{cella} : Temperatura di riferimento (operativa) della cella elettrolitica. Viene imposta come condizione al contorno di Dirichlet sui bordi del dominio.
- Ψ_{in} : Flusso di massa in ingresso attraverso il contorno del dominio (condizione di Neumann).
- Ψ_{out} : Flusso netto di massa in uscita. Insieme a Ψ_{in} , garantisce la chiusura del bilancio di massa globale per il problema ellittico.
- U_{dir} : Matrice che implementa le condizioni al contorno di Dirichlet per la temperatura.
- λ : Parametro di regolarizzazione di Tikonov per la risoluzione del sistema lineare nella function Neumann.
- δ : Tolleranza per il criterio di convergenza. Determina l'interruzione del ciclo iterativo quando l'errore relativo tra due iterazioni successive del campo di temperatura scende al di sotto di questa soglia.

1.2. Algoritmo principale. La simulazione completa della risoluzione del sistema di PDE è descritta nell'Algoritmo 1. Come descritto nella section 1.3, viene innanzitutto risolta la PDE ellittica che regola il profilo di concentrazione, utilizzando le differenze finite:

$$\text{div}(D(x)\nabla c(x)) = -g_0(x).$$

Esso viene successivamente impiegato come parametro noto per la risoluzione del campo termico. Nella PDE che governa la temperatura si fissa un valore arbitrario iniziale T_0 :

$$\text{div}(\partial_T \phi(T_0, c, x) \nabla T + \partial_c \phi(T_0, c, x) \nabla c + \nabla_x \phi(T_0, c, x)) = -qc.$$

Viene quindi isolato e calcolato un nuovo termine sorgente, che include il riscaldamento per effetto Joule (proporzionale alla concentrazione locale) e i contributi legati alla divergenza del potenziale:

$$\text{div}(\partial_T \phi(T_0, c, x) \nabla T) = -[qc + \text{div}(\partial_c \phi(T_0, c, x) \nabla c) + \text{div}(\nabla_x \phi(T_0, c, x))].$$

Poiché l'equazione della temperatura dipende in modo non lineare dalla temperatura stessa, il sistema viene risolto implementando il seguente metodo iterativo:

$$\begin{cases} T_0 \text{ arbitrario,} \\ \text{div}(\partial_T \phi(T_k, c, x) \nabla T_{k+1}) = -[qc + \text{div}(\partial_c \phi(T_k, c, x) \nabla c) + \text{div}(\nabla_x \phi(T_k, c, x))]. \end{cases}$$

All'interno di un apposito ciclo **while**, viene richiamata ripetutamente la function **Dirichlet**, aggiornando i coefficienti a ogni step fino al raggiungimento di una tolleranza prefissata (valutata tramite la norma infinito dell'errore relativo).

Nei successivi algoritmi $\odot$ e $\oslash$ denotano rispettivamente il prodotto e la divisione puntuali tra vettori.

Le function **Neumann**, **divergenza** e **Dirichlet** verranno trattate in Appendice A.

1.3. L'equazione principale. In questa sezione verrà trattata la discretizzazione di una PDE ellittica utilizzando le differenze finite. Questo metodo è stato utilizzato per calcolare sia il profilo di concentrazione c sia il campo termico T .

La PDE che regola la concentrazione c è data da

$$\text{div}(D\nabla c) = -g.$$

Algorithm 1 Simulazione Termo-Chimica Accoppiata del Canale Elettrolitico

```
1: function SIMULACANALE( $h, D_{val}, g_{val}, q_{val}, T_{cella}, \Psi_{in}, \Psi_{out}, \lambda, \delta$ )
2:   inizializza griglia bidimensionale  $X, Y$  con passo  $h$ 
3:    $D \leftarrow D_{val} \cdot \mathbf{1}$  ▷ Imposta matrice diffusione costante
4:    $g \leftarrow g_{val} \cdot \mathbf{1}$  ▷ Imposta generazione di massa uniforme
5:    $c \leftarrow \mathbf{Neumann}(h, X, D, g, \Psi_{in}, \Psi_{out}, \lambda)$  ▷ Risolve PDE concentrazione
6:    $c \leftarrow c - \min(c) + 1$  ▷ Traslazione per garantire positività stretta
7:    $T_0 \leftarrow c$  ▷ Guess iniziale per il campo di temperatura
8:    $\log_c \leftarrow \log(c)$  ▷ Pre-calcolo per ottimizzazione computazionale
9:    $errore \leftarrow 1.0, i \leftarrow 1$ 
10:  while  $i < 100$  and  $errore > \delta$  do
11:     $\phi = T_0 \odot \log_c$  ▷ Calcola potenziale in-plane di Nernst
12:     $\partial_c = T_0 \odot c$ 
13:     $div = \mathbf{divergenza}(h, X, X, \partial_c, c)$  ▷ Divergenza dei gradienti incrociati
14:     $g_{term} = q_{val} \odot c - div$  ▷ Calore da Effetto Joule e variazioni chimiche
15:     $T = \mathbf{Dirichlet}(h, X, X, \log_c, g_{term}, T_{cella})$  ▷ Risolve PDE termica
16:     $errore = \frac{\|T - T_0\|_\infty}{\|T\|_\infty}$  ▷ Valuta convergenza con norma  $L_\infty$ 
17:     $T_0 \leftarrow T$  ▷ Aggiorna la temperatura per la prossima iterazione
18:     $i \leftarrow i + 1$ 
19:  return  $c, T$ 
```

Espandendo l'operatore di divergenza si ottiene:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial c}{\partial y} \right) = -g.$$

Per entrambe le direzioni si discretizza la derivata più esterna con una differenza centrale:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right) &\approx \frac{1}{h} \left[\left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right) \Big|_{i+1,j} - \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right) \Big|_{i-1,j} \right] \approx \\ &\approx \frac{1}{h} \left[D_{i+1,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h} - D_{i-1,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h} \right]. \end{aligned}$$

Quindi

$$\frac{1}{h} \left[D_{i+1,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h} - D_{i-1,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h} \right] + \frac{1}{h} \left[D_{i,j+1} \frac{c_{i,j+1} - c_{i,j}}{h} - D_{i,j-1} \frac{c_{i,j} - c_{i,j-1}}{h} \right] = -g_{i,j}$$

e riorganizzando i coefficienti:

$$\begin{aligned} &-(D_{i+1,j} + D_{i-1,j} + D_{i,j+1} + D_{i,j-1})c_{i,j} + \\ &+ D_{i+1,j}c_{i+1,j} + D_{i-1,j}c_{i-1,j} + D_{i,j+1}c_{i,j+1} + D_{i,j-1}c_{i,j-1} = -g_{i,j}h^2. \end{aligned}$$

Nella Figura 1 illustriamo lo stencil per l'equazione ellittica.

Si osserva che l'errore numerico commesso è proporzionale al quadrato del passo di discretizzazione spaziale ($\mathcal{O}(h^2)$). Quindi se per esempio si decidesse di infittire la griglia dimezzando il passo spaziale, l'errore associato all'approssimazione numerica si ridurrebbe a un quarto.

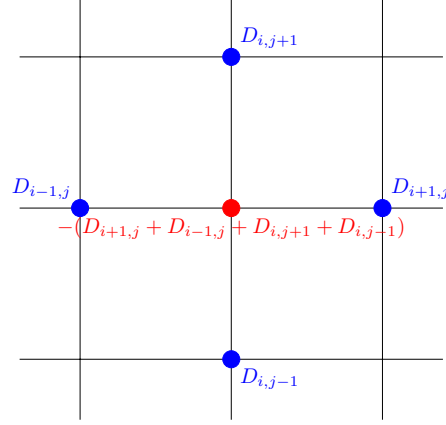


FIGURA 1. Stencil per l'equazione ellittica

1.4. La derivata normale. Per implementare la derivata normale mantenendo l'accuratezza del secondo ordine $\mathcal{O}(h^2)$ dello schema spaziale, si approssima il gradiente al contorno utilizzando le differenze finite centrali e introducendo un nodo fittizio (*ghost node*) esterno al dominio. Considerando, ad esempio, un bordo con normale orientata lungo l'asse y (come il bordo Nord), l'approssimazione diventa:

$$\left. \frac{\partial c}{\partial y} \right|_{i,j} \approx \frac{c_{i,j+1} - c_{i,j-1}}{2h} = q_{i,j},$$

dove $c_{i,j+1}$ rappresenta il nodo fittizio. Da questa relazione è possibile esplicitare il valore della concentrazione all'esterno del dominio in funzione del gradiente imposto $q_{i,j}$:

$$c_{i,j+1} = c_{i,j-1} + 2hq_{i,j}$$

Sostituendo questa espressione per il nodo fittizio nell'equazione generale di bilancio dei nodi di frontiera, il sistema si chiude e può essere risolto senza l'ausilio di incognite esterne alla griglia fisica.

È importante notare la convenzione sui segni: affinché questa condizione rappresenti un **flusso entrante** nel dominio (come in questo esempio di bordo Nord), il termine $q_{i,j}$ deve assumere un valore positivo. In questo modo, la concentrazione nel nodo fittizio risulta strettamente maggiore di quella nel nodo interno adiacente ($c_{i,j+1} > c_{i,j-1}$), generando il gradiente necessario a guidare il flusso diffusivo verso l'interno della griglia di calcolo.

Nella Figura 2 illustriamo lo stencil per la derivata normale.

2. Risultati numerici

2.1. Scelta dei parametri e discussione. Il modello richiede la definizione di parametri fisici e numerici che garantiscano sia la rappresentatività fisica del canale dell'elettrolizzatore sia la stabilità e la coerenza del solutore matematico.

Di seguito vengono discusse le motivazioni alla base di ciascuna scelta:

- **Dominio e discretizzazione** ($L = 2$, $h = 0.05$): Il dominio di calcolo è stato schematizzato come un quadrato adimensionale $[-1, 1] \times [-1, 1]$ per privilegiare

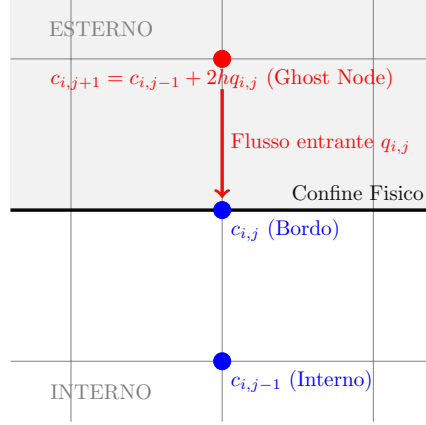


FIGURA 2. Stencil derivata normale

la semplicità computazionale. Il passo di discretizzazione $h = 0.05$ rappresenta un compromesso ottimale per garantire l'accuratezza del secondo ordine $\mathcal{O}(h^2)$ del metodo alle differenze finite, contenendo al contempo l'onere computazionale.

- **Temperatura di riferimento** ($T_{cella} = 80^\circ\text{C}$): Tale valore riflette la temperatura operativa nominale tipica di un elettrolizzatore di scala industriale. Viene imposta rigorosamente come condizione di Dirichlet ai bordi del dominio per simulare l'effetto di termostatazione fornito dalle piastre bipolari massicce e dal fluido in ingresso.
- **Generazione ionica** ($g_{val} = 50$) e **Flussi di massa** ($\Psi_{in} = -20$, $\Psi_{out} = 120$): La scelta di questi tre parametri è strettamente vincolata dalla *condizione di compatibilità* richiesta dal problema ellittico stazionario con condizioni al contorno di Neumann. Tale analisi è discussa successivamente.
- **Coefficiente per l'effetto Joule** ($q_{val} = 0.5$): Questo parametro di proporzionalità è stato tarato empiricamente per indurre un modesto e realistico surriscaldamento del bulk del fluido (nell'ordine di pochi gradi) rispetto alle pareti termostatate, replicando fedelmente il comportamento termico del sistema reale.
- **Parametro di regolarizzazione** ($\lambda = 10^{-7}$): Necessario per la risoluzione del campo di concentrazione. Trattandosi di un problema di Neumann puro (che genererebbe intrinsecamente una matrice dei coefficienti singolare), l'introduzione di questo parametro di Tikhonov rende il sistema invertibile e computazionalmente stabile, senza alterare in modo tangibile la fisica del problema.
- **Tolleranza di convergenza** ($\delta = 0.05$): Selezionata per interrompere il ciclo iterativo della temperatura quando l'errore relativo tra due iterazioni successive scende al di sotto di questa soglia, assicurando un bilancio ideale tra precisione del risultato e velocità di convergenza.
- **Coefficiente di diffusione base** ($D_{val} = 1$): Fissato all'unità per mantenere l'adimensionalità del problema, fungendo da valore di base per la generazione del campo di diffusione uniforme su tutto il dominio.

Condizioni di compatibilità. Il problema di diffusione stazionario con condizioni al contorno di Neumann, come implementato nel codice, richiede il rispetto della **condizione di**

compatibilità:

$$(67) \quad \iint_{\Omega} g(x, y) dx dy = \oint_{\partial\Omega} \Psi_{bordo} ds.$$

I parametri del termine sorgente e dei flussi sono stati scelti per rispettare le condizioni di compatibilità. Calcolando i due membri dell'equazione di compatibilità:

$$(68) \quad \text{Generazione Totale} = \iint_{\Omega} 50 dA = 50 \times 4 = 200$$

$$(69) \quad \text{Flusso Netto Uscente} = (\Psi_{out} \times L) + (\Psi_{in} \times L) = (120 \times 2) + (-20 \times 2) = 240 - 40 = 200$$

e quindi la condizione di compatibilità è perfettamente soddisfatta.

Potenziale in-plane (ϕ): In una sezione trasversale parallela agli elettrodi, il campo elettrico principale applicato dall'alimentatore è perpendicolare al piano di vista. Le variazioni di potenziale nel piano sono guidate quasi esclusivamente dai gradienti chimici. Pertanto, il potenziale elettrico locale ϕ è stato modellato secondo una dipendenza di tipo Nernst, proporzionale al prodotto $T \cdot \ln(c)$.

Nelle sezioni successive il modello con questi parametri sarà chiamato **configurazione standard**.

2.2. Configurazione standard. In questa prima fase, viene analizzato la configurazione standard con i parametri di default impostati precedentemente. Il codice ha dimostrato un'ottima stabilità numerica: il calcolo della temperatura è arrivato a convergenza in sole 5 iterazioni, registrando un errore relativo pari a 0.0125.

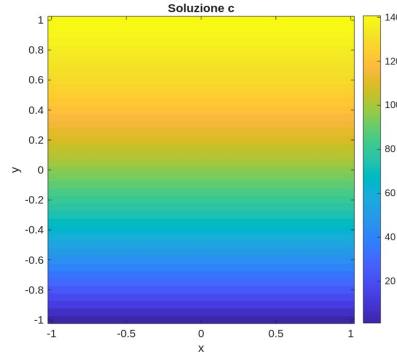


FIGURA 3. Profilo di concentrazione c all'interno della sezione del canale.

Come si evince dalla Figura 3, il campo di concentrazione presenta un gradiente puramente monodimensionale lungo l'asse y , che rappresenta la direzione del flusso. Questo comportamento è fisicamente coerente con le ipotesi del modello: assumendo pareti laterali solide (assenza di flussi lungo l'asse trasversale x) e un termine di generazione ionica spazialmente uniforme ($g = 50$), il profilo rimane costante in direzione x . L'evoluzione della concentrazione, che varia da un massimo in prossimità dell'ingresso fino a valori prossimi a 0 all'uscita, è guidata interamente dal bilancio di massa imposto tramite le condizioni di Neumann sulle sezioni trasversali di Nord (ingresso fluido) e Sud (uscita fluido).

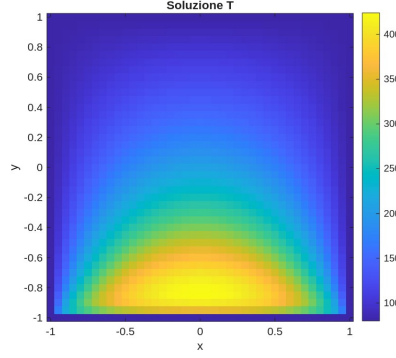


FIGURA 4. Profilo di temperatura T all'interno della sezione del canale.

La Figura 4 illustra il corrispondente campo termico. Sui bordi del dominio si osserva il rigoroso rispetto delle condizioni di Dirichlet: in questo test di base, sia le pareti solide del canale ($x = \pm 1$) che le sezioni di ingresso e uscita del fluido ($y = \pm 1$) sono state mantenute isotermicamente al valore di specifica operativa ($T_{cella} = 80^\circ C$), visibile nella colorazione blu scuro perimetrale.

All'interno del canale, l'effetto Joule induce un notevole surriscaldamento del bulk del fluido. È particolarmente interessante notare l'asimmetria del profilo termico lungo l'asse y : il picco di temperatura (hotspot) non è situato nel centro geometrico del dominio, ma risulta traslato lungo la direzione del flusso, verso l'uscita. Questa asimmetria è una diretta conseguenza dell'accoppiamento matematico tra le due fisiche: il calore generato per effetto Joule dipende dalla concentrazione locale ($q \cdot c$). Man mano che l'elettrolita scorre verso Sud arricchendosi di ioni, la generazione di calore aumenta, spostando l'hotspot nella zona a maggior concentrazione.

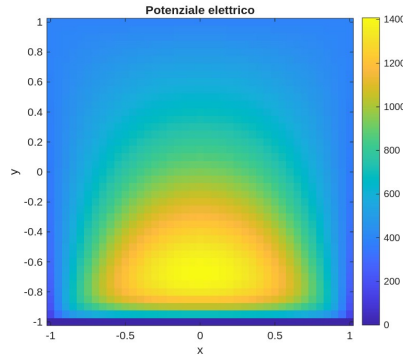


FIGURA 5. Distribuzione del potenziale elettrico ϕ all'interno del dominio.

A completamento dell'analisi dello scenario di base, la Figura 5 mostra la mappa spaziale del potenziale elettrico. Nel presente modello, il potenziale non è un parametro indipendente, ma è accoppiato ai campi scalari precedentemente calcolati tramite la relazione analitica $\phi = T \ln(c)$.

Osservando il grafico, risulta evidente come la morfologia del campo di potenziale sia fortemente dominata dal profilo termico (Figura 4), ereditandone la forma a campana asimmetrica con l'hotspot concentrato nella porzione terminale del canale. Tuttavia, l'effetto modulante del termine logaritmico $\ln(c)$ accentua ulteriormente questo picco: poiché la concentrazione di ioni c aumenta progressivamente spostandosi verso l'uscita, il prodotto tra i due termini genera un potenziale massimo che supera il valore di 1200 proprio in corrispondenza della zona di massimo accumulo di calore e massa.

Questo risultato conferma la corretta implementazione dell'accoppiamento multifisico del modello: le disomogeneità nella distribuzione di specie ioniche e di temperatura all'interno del flusso si combinano, generando gradienti di potenziale localizzati che influenzerebbero significativamente le correnti locali.

Osservazione critica: Si nota che la temperatura massima raggiunta nel bulk del fluido supera i $400^\circ C$. Pur essendo un risultato numericamente valido, risulta fisicamente irrealistico per una soluzione acquosa all'interno di un canale reale (dove l'elettrolita andrebbe incontro a ebollizione istantanea). Questo giustifica e introduce la necessità di una successiva analisi parametrica per allineare il modello a condizioni operative verosimili.

2.3. Test 1: Introduzione di un Gradiente Termico Trasversale. In questa prima variazione parametrica, è stato simulato un raffreddamento asimmetrico sulle pareti del canale. Nello specifico, la temperatura della parete sinistra è stata impostata a $T_{raffreddamento} = 60^\circ C$, mantenendo la parete destra e le sezioni di ingresso/uscita a $T_{cella} = 80^\circ C$. Contestualmente, il coefficiente di generazione di calore interno è stato ridotto di un ordine di grandezza ($q = 0.05$). Il solutore ha mantenuto un'ottima stabilità, convergendo in 5 iterazioni con un errore relativo di 0.0126.

L'impatto delle modifiche è visibile nel campo termico (Figura 6). L'introduzione della parete raffreddata rompe la simmetria trasversale del sistema: si nota un gradiente termico lungo l'asse x , evidenziato dalla fascia blu scuro in prossimità del bordo sinistro. Di conseguenza, l'hotspot termico risulta deformato e spinto verso la parete destra, che si trova a temperatura maggiore.

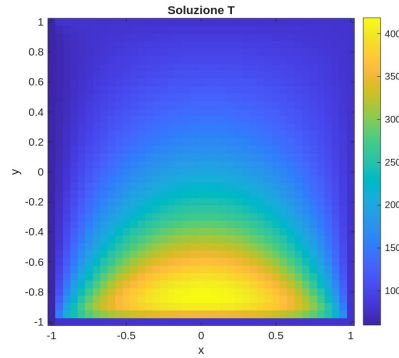


FIGURA 6. Profilo della temperatura T nel Test 1.

Osservazione critica: Nonostante la drastica riduzione del parametro q , la temperatura di picco nel bulk del fluido si mantiene su valori elevatissimi (intorno ai $400^\circ C$). Questo

è un risultato ingegneristicamente molto rilevante: dimostra che per questa specifica geometria e fluidodinamica, il raffreddamento convettivo di una singola parete non è sufficiente a smaltire il calore accumulato. Evidentemente, la resistenza termica trasversale del fluido è troppo alta, suggerendo che in una cella reale bisognerebbe intervenire aumentando la portata dell'elettrolita per favorire lo smaltimento termico lungo la direzione del flusso.

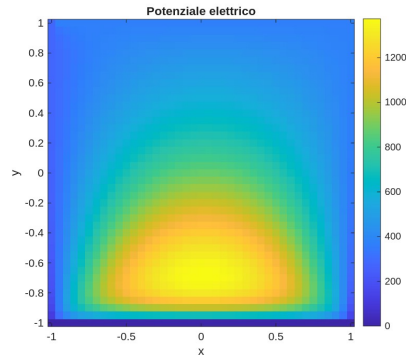


FIGURA 7. Distribuzione del potenziale elettrico ϕ nel Test 1.

Infine, la Figura 7 illustra il nuovo assetto del potenziale elettrico. Essendo definito dalla relazione analitica $\phi = T \ln(c)$, il campo assorbe e amplifica l'asimmetria del campo termico. La zona a minor potenziale si allarga in prossimità della parete raffreddata, mentre il picco massimo si sposta verso il quadrante in basso a destra. Dal punto di vista applicativo, questo disallineamento è cruciale: in una cella reale provocherebbe una distribuzione disomogenea delle linee di corrente, concentrando il lavoro elettrochimico e l'usura sulla parete meno raffreddata.

2.4. Test 2: Aumento della Portata e Limiti del Modello Conduttivo. Per tentare di mitigare le elevate temperature registrate nel bulk del fluido durante il Test 1, si è proceduto a simulare un aumento della portata dell'elettrolita all'interno del canale. Dal punto di vista numerico, ciò è stato implementato incrementando i flussi nelle condizioni di Neumann per l'equazione del trasporto di massa: il flusso in ingresso (Nord) è stato quintuplicato passando da -20 a -100 , adeguando contestualmente il flusso in uscita (Sud) a 200 per garantire la chiusura del bilancio di massa globale. Il modello ha mantenuto un'eccellente stabilità, convergendo in 5 iterazioni (errore 0.0111).

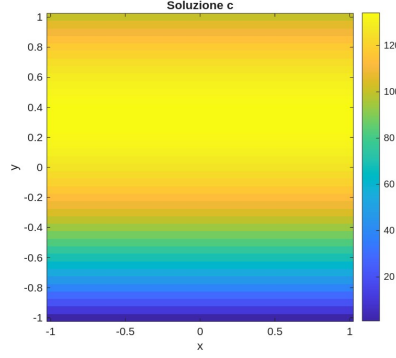


FIGURA 8. Profilo di concentrazione c nel Test 2, a seguito dell'aumento della portata.

Come evidenziato nella Figura 8, l'imposizione di flussi di massa più elevati ai bordi ha alterato il campo scalare della concentrazione c . Pur mantenendo un profilo rigorosamente monodimensionale, i valori assoluti non sono aumentati molto. Raggiungono un valore prossimo a 100 all'uscita del canale, con un picco di 130 verso l'interno. Questo accumulo di massa avrà ripercussioni dirette sul bilancio termico.

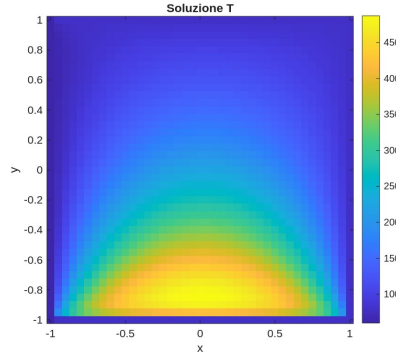


FIGURA 9. Profilo di temperatura T nel Test 2 a seguito dell'aumento dei gradienti di flusso.

L'analisi della Figura 9 rivela infatti un risultato apparentemente controintuitivo: contrariamente alle aspettative, l'incremento della portata non ha raffreddato il sistema, ma ha provocato un ulteriore innalzamento della temperatura di picco, che ora sfiora i 470°C .

Questo fenomeno evidenzia un aspetto cruciale e un limite intrinseco della formulazione matematica attualmente adottata per il bilancio energetico. Nel presente modello, l'equazione che governa il campo termico è di natura puramente diffusiva (equazione di Poisson per la conduzione del calore). Essa è priva del termine di convezione termica (proporzionale a $\mathbf{v} \cdot \nabla T$), che in un sistema fluidodinamico reale è il meccanismo primario deputato all'asportazione del calore sensibile lungo la direzione del flusso.

Poiché la generazione di calore per effetto Joule è modellata come un termine sorgente direttamente proporzionale alla concentrazione locale ($q \cdot c$), l'aumento di quest'ultima (mostrato in Figura 8) ha generato una potenza termica maggiore. In assenza di smaltimento

convettivo, questo calore addizionale rimane confinato nel bulk del fluido, potendo essere dissipato esclusivamente per conduzione trasversale verso le pareti laterali (a $60^{\circ}C$ e $80^{\circ}C$), le quali oppongono una resistenza termica troppo elevata.

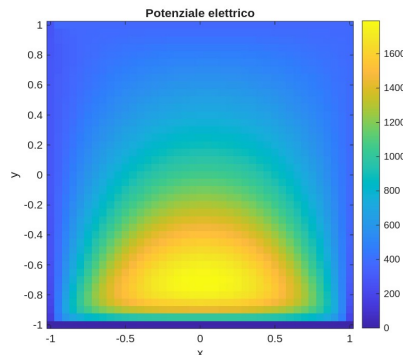


FIGURA 10. Distribuzione del potenziale elettrico ϕ nel Test 2.

Tale surriscaldamento si riflette direttamente sul campo del potenziale elettrico (Figura 10). Guidato dalla relazione $\phi = T \ln(c)$, l'aumento simultaneo sia della variabile termica che della variabile di massa spinge il potenziale di picco a superare la soglia di 1700.

Conclusioni dell'analisi parametrica: L'analisi dei risultati ha messo in luce limitazioni intrinseche che aprono la strada a diverse linee di ricerca e miglioramenti modellistici:

- **Condizioni miste al contorno:** Le condizioni di Dirichlet per la temperatura non sono realistiche. Sarebbero più opportune delle condizioni miste ma si perderebbe la garanzia di esistenza e unicità da parte dei teoremi.
- **Inclusione del trasporto convettivo:** La questione aperta più rilevante riguarda l'assenza del termine di convezione termica ($\mathbf{v} \cdot \nabla T$) nell'equazione della temperatura. Come evidenziato dai test ad alta portata, un modello puramente conduttivo non è in grado di simulare l'asportazione di calore sensibile, portando a picchi termici fisicamente non realistici. L'estensione verso un modello di convezione-diffusione rappresenta il passo successivo necessario per la validazione industriale.
- **Accoppiamento con la Fluidodinamica (Navier-Stokes):** Un'evoluzione naturale del codice prevede l'integrazione delle equazioni di Navier-Stokes per determinare un campo di moto realistico, capace di influenzare localmente sia il trasporto di massa che la dissipazione del calore.
- **Geometrie complesse e domini generici:** La simulazione è stata condotta su un dominio quadrato adimensionale. Sviluppi futuri potrebbero prevedere l'utilizzo di mappe conformi o di metodi a elementi finiti (FEM) per gestire geometrie di canale più realistiche, inclusi ostacoli o superfici elettrodeiche rugose che aumentano la turbolenza e lo scambio termico.
- **Termini di smorzamento e sorgenti non uniformi:** Il termine sorgente di generazione ionica g è stato considerato uniforme. Una modellizzazione più avanzata dovrebbe prevedere una dipendenza locale dalla sovratensione elettrochimica, eventualmente introducendo termini di smorzamento per stabilizzare la convergenza in

presenza di gradienti estremi o per modellare fenomeni di saturazione dei siti attivi sul catalizzatore.

- **Simulazioni tempo-dipendenti:** Il lavoro si è focalizzato sullo stato stazionario. L'introduzione della variabile temporale permetterebbe di studiare i transitori di accensione e spegnimento della cella, nonché la risposta del sistema a carichi elettrici intermittenti, tipici dell'alimentazione da fonti rinnovabili come il solare o l'eolico.

In conclusione, sebbene il modello attuale fornisca una solida base teorica e numerica per comprendere l'interazione tra potenziale, concentrazione e temperatura, la sua espansione verso una formulazione multifisica completa appare indispensabile per una progettazione accurata dei sistemi di raffreddamento e per l'ottimizzazione dell'efficienza energetica dei reattori reali.

3. Conclusioni

In questo lavoro di tesi è stato condotto uno studio rigoroso sulle equazioni differenziali alle derivate parziali ellittiche, finalizzato alla modellizzazione matematica di una cella elettrolitica a membrana a scambio anionico (AEM).

Dal punto di vista teorico, avvalendosi degli strumenti dell'analisi funzionale e in particolare del teorema di punto fisso di Leray-Schauder, è stata dimostrata l'esistenza (e l'unicità sotto opportune ipotesi) di soluzioni deboli per il sistema termo-chimico accoppiato che governa la fisica del reattore.

Dal punto di vista computazionale, il modello astratto è stato implementato simulando una sezione bidimensionale del canale. Riassumendo, si sono utilizzate le differenze finite per risolvere numericamente il seguente sistema di PDE per la concentrazione c e la temperatura T :

$$(70) \quad \begin{cases} -\operatorname{div}(D\nabla c) = g \\ -\operatorname{div}(\partial_T \phi(T, c, x) \nabla T + \partial_c \phi(T, c, x) \nabla c + \nabla_x \phi(T, c, x)) = q \cdot c. \end{cases}$$

Per ovviare al fatto che l'equazione della temperatura è implicita e non-lineare, si è utilizzato un semplice ma robusto algoritmo iterativo.

Le simulazioni numeriche hanno permesso non solo di verificare la stabilità dell'algoritmo, ma anche di far emergere in modo critico i limiti fisici di una formulazione puramente diffusiva. Come osservato nei test parametrici, l'assenza di un termine di convezione termica porta a surriscaldamenti irrealistici, dimostrando che un incremento della portata, in un modello puramente conduttivo, innalza paradossalmente la temperatura a causa della maggior generazione per effetto Joule non smaltita dal flusso.

L'analisi parametrica condotta sulle simulazioni ha messo in luce alcune limitazioni intrinseche dell'attuale formulazione matematica, aprendo la strada a diverse questioni e prospettive di ricerca per il futuro:

- **Condizioni al contorno:** L'imposizione di condizioni di Dirichlet per la temperatura si è rivelata poco realistica per un'applicazione industriale. Sarebbe più opportuno adottare condizioni miste, sebbene ciò comporterebbe la perdita delle attuali garanzie teoriche di esistenza e unicità della soluzione.
- **Inclusione del trasporto convettivo:** La questione aperta più critica riguarda l'assenza del termine di convezione termica nell'equazione della temperatura. Come

dimostrato dai test ad alta portata, un modello puramente conduttivo non è in grado di simulare la corretta asportazione del calore sensibile, portando allo sviluppo di picchi termici fisicamente irrealistici. L'estensione verso un modello completo di convezione-diffusione risulta quindi un passo indispensabile per la validazione industriale.

- **Accoppiamento fluidodinamico:** Un'evoluzione naturale del modello prevede l'integrazione delle equazioni di Navier-Stokes. Questo permetterebbe di calcolare un campo di moto realistico, capace di influenzare localmente la dissipazione del calore e il trasporto di massa.
- **Geometrie complesse:** Attualmente la simulazione è limitata a un dominio quadrato adimensionale. Gli sviluppi futuri dovranno prevedere l'impiego di metodi a elementi finiti (FEM) o mappe conformi per gestire geometrie di canale realistiche, comprensive di ostacoli o superfici elettrodiche rugose.
- **Termini sorgente non uniformi:** La generazione ionica è stata finora assunta come spazialmente costante. Modelli più avanzati richiederanno una dipendenza locale dalla sovratensione elettrochimica e l'introduzione di termini di smorzamento per modellare la saturazione dei siti attivi sul catalizzatore.
- **Simulazioni tempo-dipendenti:** Il lavoro si è concentrato sullo stato stazionario. Introdurre la dipendenza temporale consentirebbe di studiare i transitori termici e chimici durante l'accensione e lo spegnimento della cella, nonché la risposta del reattore a carichi elettrici intermittenti, tipici dell'alimentazione da fonti rinnovabili.

In sintesi, sebbene l'attuale modello fornisca una solida base per comprendere le interazioni tra potenziale, concentrazione e temperatura, la sua espansione verso una formulazione multifisica completa si conferma necessaria per l'ottimizzazione e la progettazione dei reattori reali.

APPENDICE A

Altri dettagli di implementazione

1. Funzioni ausiliarie

1.1. Function Neumann. La simulazione procede innanzitutto con la risoluzione del campo di concentrazione c richiamando la function dedicata **Neumann**, che implementa il metodo delle differenze finite per discretizzare l'equazione differenziale ellittica. Il dominio bidimensionale viene mappato in un vettore monodimensionale tramite apposite matrici di geometria e indicizzazione. Per i nodi interni, l'operatore differenziale viene approssimato utilizzando uno stencil a 5 punti, valutando il coefficiente di diffusione spazialmente variabile tramite medie aritmetiche sulle interfacce delle celle di calcolo. Per imporre le condizioni al contorno di Neumann (flussi), il dominio viene espanso virtualmente introducendo dei "nodi fittizi" (ghost nodes) esterni ai bordi fisici; ciò consente di approssimare le derivate prime al contorno con differenze finite centrate, mantenendo l'accuratezza dello schema. Dal punto di vista computazionale, il sistema lineare viene assemblato sfruttando matrici sparse (**spalloc**) per ottimizzare l'allocazione di memoria e i tempi di esecuzione. Poiché un problema di Neumann puro genera una matrice dei coefficienti singolare, la risoluzione del sistema viene stabilizzata applicando una regolarizzazione di Tikhonov (introducendo un parametro $\lambda = 10^{-7}$), che rende la matrice invertibile e permette l'estrazione di una soluzione definita.

Dal punto di vista analitico, un problema ellittico di pura diffusione con condizioni al contorno di Neumann (flusso imposto) ammette infinite soluzioni che differiscono tra loro per una costante additiva. Per questo motivo, la matrice della concentrazione restituita dal solutore numerico subisce una traslazione (sottraendo il valore minimo assoluto della griglia e aggiungendo 1). Questa operazione, matematicamente lecita, è strettamente necessaria per garantire la positività del campo scalare in ogni punto del dominio: la concentrazione, infatti, costituisce l'argomento di una funzione logaritmica nel successivo calcolo del potenziale elettrochimico di Nernst.

1.2. Function Dirichlet. La function **Dirichlet** adotta un'architettura di discretizzazione analoga alla function **Neumann**, impiegando il metodo delle differenze finite su uno stencil a 5 punti e l'assemblaggio efficiente tramite matrici sparse. Il trattamento delle condizioni al contorno, tuttavia, differisce radicalmente: non richiedendo il calcolo di gradienti ai bordi, non si avvale di nodi fittizi. I punti appartenenti al perimetro del dominio assumono il valore termodinamico imposto a priori. Durante la costruzione del sistema lineare, quando lo stencil di un nodo interno intercetta un nodo di bordo, l'incognita associata viene sostituita con il valore noto di Dirichlet; tale contributo viene poi moltiplicato per il rispettivo coefficiente di diffusione e traslato al secondo membro dell'equazione (nel vettore dei termini noti b). Questa procedura riduce i gradi di libertà del sistema e genera una matrice dei coefficienti non singolare e strettamente diagonalmente dominante. Il sistema lineare algebrico

Algorithm 2 Risoluzione PDE di Diffusione con Condizioni di Neumann

```
1: function NEUMANN( $h, x, D, g, \Psi_{in}, \Psi_{out}, \lambda$ )
2:    $n \leftarrow \text{length}(x) + 2$ 
3:   inizializza matrice topologica  $G$  e matrice di indicizzazione 1D  $I$ 
4:    $A \leftarrow \text{spalloc}(\dots)$   $\triangleright$  Preallocazione efficiente della matrice sparsa
5:    $b \leftarrow \mathbf{0}$   $\triangleright$  Inizializzazione vettore dei termini noti
6:   for  $j = 1$  to  $n$  do
7:     for  $i = 1$  to  $n$  do
8:       if nodo  $(j, i)$  è nel dominio valido (esclusi gli angoli) then
9:          $c \leftarrow I(j, i)$   $\triangleright$  Indice lineare del nodo centrale
10:        if  $G(j, i) \in \{1, 2\}$  then  $\triangleright$  Nodi interni al dominio
11:           $D_E, D_W, D_N, D_S \leftarrow$  calcola media di  $D$  alle interfacce
12:           $A(c, \text{vicini}) \leftarrow$  pesi di diffusione  $D_{interfacce}$ 
13:           $A(c, c) \leftarrow -(D_E + D_W + D_N + D_S)$ 
14:           $b(c) \leftarrow -h^2 \cdot g(j, i)$ 
15:        else  $\triangleright$  Punti fittizi per condizioni al contorno
16:          if  $i = 1$  or  $i = n$  then  $\triangleright$  Bordi Ovest/Est (Muri a flusso zero)
17:             $A(c, c) \leftarrow -D(j, i)$ 
18:             $A(c, \text{riflesso}) \leftarrow D(j, \text{riflesso})$ 
19:          else if  $j = 1$  then  $\triangleright$  Bordo Nord (Ingresso fluido)
20:             $A(c, c) \leftarrow -D(j, i)$  e  $A(c, I(j + 2, i)) \leftarrow D(j + 2, i)$ 
21:             $b(c) \leftarrow -\Psi_{in} \cdot 2h$ 
22:          else if  $j = n$  then  $\triangleright$  Bordo Sud (Uscita fluido)
23:             $A(c, c) \leftarrow -D(j, i)$  e  $A(c, I(j - 2, i)) \leftarrow D(j - 2, i)$ 
24:             $b(c) \leftarrow \Psi_{out} \cdot 2h$ 
25:    $v_{sol} \leftarrow (A^T A + \lambda \mathbf{I})^{-1} (A^T b)$   $\triangleright$  Risoluzione del sistema lineare regolarizzato
26:    $sol \leftarrow \mathbf{0}_{n \times n}$ 
27:   Mappa i valori di  $v_{sol}$  in  $sol$  usando la matrice degli indici  $I$ 
28:   return sottomatrice interna  $sol(2 : n - 1, 2 : n - 1)$ 
```

risultante viene risolto per inversione diretta e il vettore soluzione viene infine rimappato nella matrice bidimensionale originaria, restituendo la mappa termica del canale.

Algorithm 3 Risoluzione PDE di Diffusione con Condizioni di Dirichlet

```
1: function DIRICHLET( $h, x, y, D, g, U_{dir}$ )
2:    $nx \leftarrow \text{length}(x), ny \leftarrow \text{length}(y)$ 
3:   inizializza matrice topologica  $G$  e matrice di indicizzazione 1D  $I$ 
4:    $A \leftarrow \mathbf{0}_{cont \times cont}, b \leftarrow \mathbf{0}_{cont}$   $\triangleright$  Inizializzazione sistema lineare ridotto
5:   for  $j = 2$  to  $ny - 1$  do
6:     for  $i = 2$  to  $nx - 1$  do
7:        $c \leftarrow I(j, i)$   $\triangleright$  Indice lineare del nodo centrale interno
8:        $D_E, D_W, D_N, D_S \leftarrow$  calcola media di  $D$  alle interfacce adiacenti
9:        $b(c) \leftarrow -h^2 \cdot g(j, i)$ 
10:       $A(c, c) \leftarrow -(D_E + D_W + D_N + D_S)$ 
11:       $\triangleright$  Valutazione contributi Ovest/Est
12:      if  $G(j, i - 1) == 2$  then  $b(c) \leftarrow b(c) - D_W \cdot U_{dir}(j, i - 1)$ 
13:      else  $A(c, I(j, i - 1)) \leftarrow D_W$ 
14:      if  $G(j, i + 1) == 2$  then  $b(c) \leftarrow b(c) - D_E \cdot U_{dir}(j, i + 1)$ 
15:      else  $A(c, I(j, i + 1)) \leftarrow D_E$ 
16:       $\triangleright$  Valutazione contributi Nord/Sud
17:      if  $G(j - 1, i) == 2$  then  $b(c) \leftarrow b(c) - D_N \cdot U_{dir}(j - 1, i)$ 
18:      else  $A(c, I(j - 1, i)) \leftarrow D_N$ 
19:      if  $G(j + 1, i) == 2$  then  $b(c) \leftarrow b(c) - D_S \cdot U_{dir}(j + 1, i)$ 
20:      else  $A(c, I(j + 1, i)) \leftarrow D_S$ 
21:       $v_{sol} \leftarrow A^{-1}b$   $\triangleright$  Risoluzione algebrica del sistema
22:       $sol \leftarrow \mathbf{0}_{ny \times nx}$ 
23:      for ogni nodo  $(j, i)$  nel dominio do
24:        if nodo  $(j, i)$  è interno ( $G == 1$ ) then
25:           $sol(j, i) \leftarrow v_{sol}(I(j, i))$   $\triangleright$  Mappatura soluzione calcolata
26:        else
27:           $sol(j, i) \leftarrow U_{dir}(j, i)$   $\triangleright$  Imposizione dei valori di bordo
28:      return  $sol$ 
```

1.3. Function Divergenza. Infine, la valutazione dei termini differenziali complessi all'interno del ciclo iterativo è delegata alla function **divergenza**. Questa function è preposta al calcolo numerico dell'operatore differenziale spaziale, necessario per quantificare l'impatto dei gradienti di concentrazione e del potenziale locale sul bilancio termico globale del canale. I gradienti spaziali della grandezza in esame (la concentrazione) vengono valutati numericamente lungo le direzioni principali della griglia bidimensionale e successivamente moltiplicati per il coefficiente locale aggiornato ad ogni iterazione (il termine dipendente dalla temperatura). A tali flussi viene poi applicata la function di MatLab *divergence* che restituisce una matrice scalare.

Essa verrà sottratta al contributo volumetrico dell'effetto Joule per definire il termine sorgente termico complessivo g .

Algorithm 4 Calcolo Operatore Divergenza su Griglia 2D

```
1: function DIVERGENZA( $h, x, y, D, c$ )
2:    $ny_c, nx_c \leftarrow \text{size}(c)$ 
3:    $ny_D, nx_D \leftarrow \text{size}(D)$ 
4:                                      $\triangleright$  Calcolo numerico del gradiente con differenze finite
5:    $grad_x, grad_y \leftarrow \text{gradient}(c, h, h)$ 
6:                                      $\triangleright$  Prodotto elemento per elemento del gradiente per il coefficiente spaziale
7:    $flusso_x \leftarrow D \odot grad_x$ 
8:    $flusso_y \leftarrow D \odot grad_y$ 
9:                                      $\triangleright$  Applicazione dell'operatore divergenza sul campo vettoriale risultante
10:   $div \leftarrow \text{divergence}(x, y, flusso_x, flusso_y)$ 
11:  return  $div$ 
```

Bibliografia

- [1] Giovanni S Alberti, Wadim Gerner, and Matteo Santacesaria. Inverse problems for quasi-linear elliptic systems modeling electrolyzers. *arXiv preprint arXiv:2602.16906*, 2026.
- [2] Matthias Block. Hydrogen as tracer gas for leak detection. In *16th WCNDT*, 2004.
- [3] Ya-Zhe Chen and Lan-Cheng Wu. *Second order elliptic equations and elliptic systems*, volume 174. American Mathematical Soc., 1998.
- [4] David Gilbarg, Neil S Trudinger, David Gilbarg, and NS Trudinger. *Elliptic partial differential equations of second order*, volume 224. Springer, 1977.
- [5] WT Grubb. Batteries with solid ion exchange electrolytes: I. secondary cells employing metal electrodes. *Journal of the Electrochemical Society*, 106(4):275–278, 1959.
- [6] WT Grubb. Ionic migration in ion-exchange membranes. *The Journal of Physical Chemistry*, 63(1):55–58, 1959.
- [7] Peter Häussinger, Reiner Lohmüller, and Allan M Watson. Hydrogen, 6. uses. *Ullmann’s Encyclopedia of Industrial Chemistry*, 2000.
- [8] Rajendar Kumar and Ashwani Kumar. Assessment of impact of hydrogen cooled generator on power system loadability enhancement. In *2015 International Conference on Energy, Power and Environment: Towards Sustainable Growth (ICEPE)*, pages 1–6. IEEE, 2015.
- [9] S Shiva Kumar and Hankwon Lim. An overview of water electrolysis technologies for green hydrogen production. *Energy reports*, 8:13793–13813, 2022.
- [10] Khaled Lawand, Suhas Nuggehalli Sampathkumar, Zoé Mury, and Jan Van Herle. Membrane electrode assembly simulation of anion exchange membrane water electrolysis. *Journal of Power Sources*, 595:234047, 2024.
- [11] Yongjun Leng, Guang Chen, Alfonso J Mendoza, Timothy B Tighe, Michael A Hickner, and Chao-Yang Wang. Solid-state water electrolysis with an alkaline membrane. *Journal of the American Chemical Society*, 134(22):9054–9057, 2012.
- [12] Alastair C Lewis. Optimising air quality co-benefits in a hydrogen economy: a case for hydrogen-specific standards for no x emissions. *Environmental Science: Atmospheres*, 1(5):201–207, 2021.
- [13] Naef AA Qasem and Gubran AQ Abdulrahman. A recent comprehensive review of fuel cells: history, types, and applications. *International Journal of Energy Research*, 2024(1):7271748, 2024.
- [14] JH Russell, LJ Nuttall, and AP Fickett. Hydrogen generation by solid polymer electrolyte water electrolysis. *Am. Chem. Soc. Div. Fuel Chem. Prepr*, 18:24–40, 1973.
- [15] Sandro Salsa. *Equazioni a derivate parziali: Metodi, modelli e applicazioni*, volume 98. Springer, 2016.
- [16] Gaetano Squadrito, Gaetano Maggio, and Agatino Nicita. The green hydrogen revolution. *Renewable Energy*, 216:119041, 2023.
- [17] Xu Wu and Keith Scott. $\text{Cu}_x\text{Co}_{3-x}\text{O}_4$ ($0 \leq x < 1$) nanoparticles for oxygen evolution in high performance alkaline exchange membrane water electrolyzers. *Journal of Materials Chemistry*, 21(33):12344–12351, 2011.