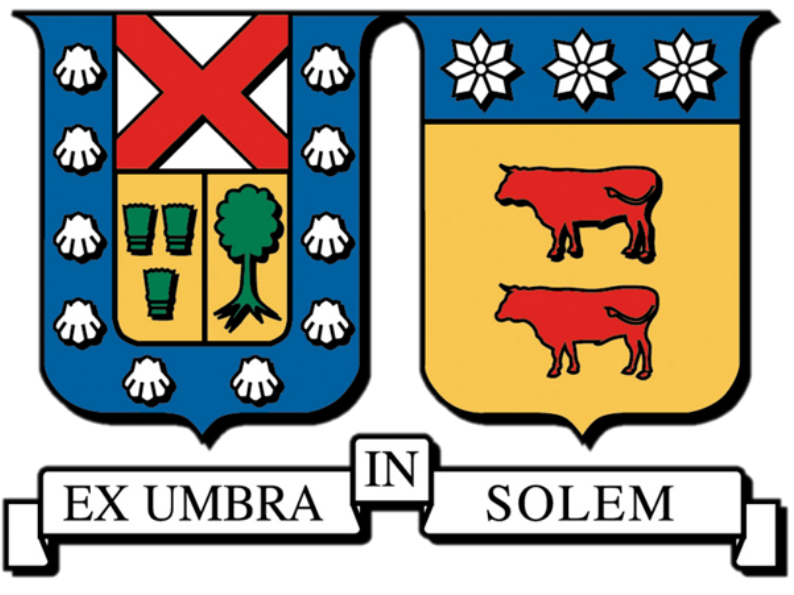


Uso de modelos fraccionarios a difusión en sólidos



Rogelio Arancibia Bustos, Profesora Guía: Aldonza Jaques

Departamento de Matemáticas, UTFSM Profesor: Pablo Aguirre

Ingeniería Civil Matemática, Mat-282 Lab. de Modelación I, Semestre 2016 II

rogelio.arancibia.13@sansano.usm.cl, aldonza.jaques@gmail.com, UTFSM



Descripción y Objetivo

Mediante el análisis de los resultados de concentración en la difusión en sólidos, es posible realizar gráficos del perfil de concentración a través de la penetración z hecha por esta. Se conoce que al realizar un gráfico entre el logaritmo de la concentración promedio versus la potencia $6/5$ de la profundidad de penetración, la pendiente de dicho gráfico entrega información sobre las propiedades naturales de difusión del borde de grano del material. Pero hacer un gráfico con respecto a $z^{6/5}$ no ha tenido una explicación física hasta el momento por la comunidad científica [1], es por esto que se busca la posibilidad de modelar la concentración promedio en los procesos de difusión en sólidos mediante las funciones de concentración que no obedecen a las ecuaciones clásicas de difusión de Fick, usadas en [2], las cuales consideran comportamientos fraccionarios que podrían explicar este fenómeno.

Introducción

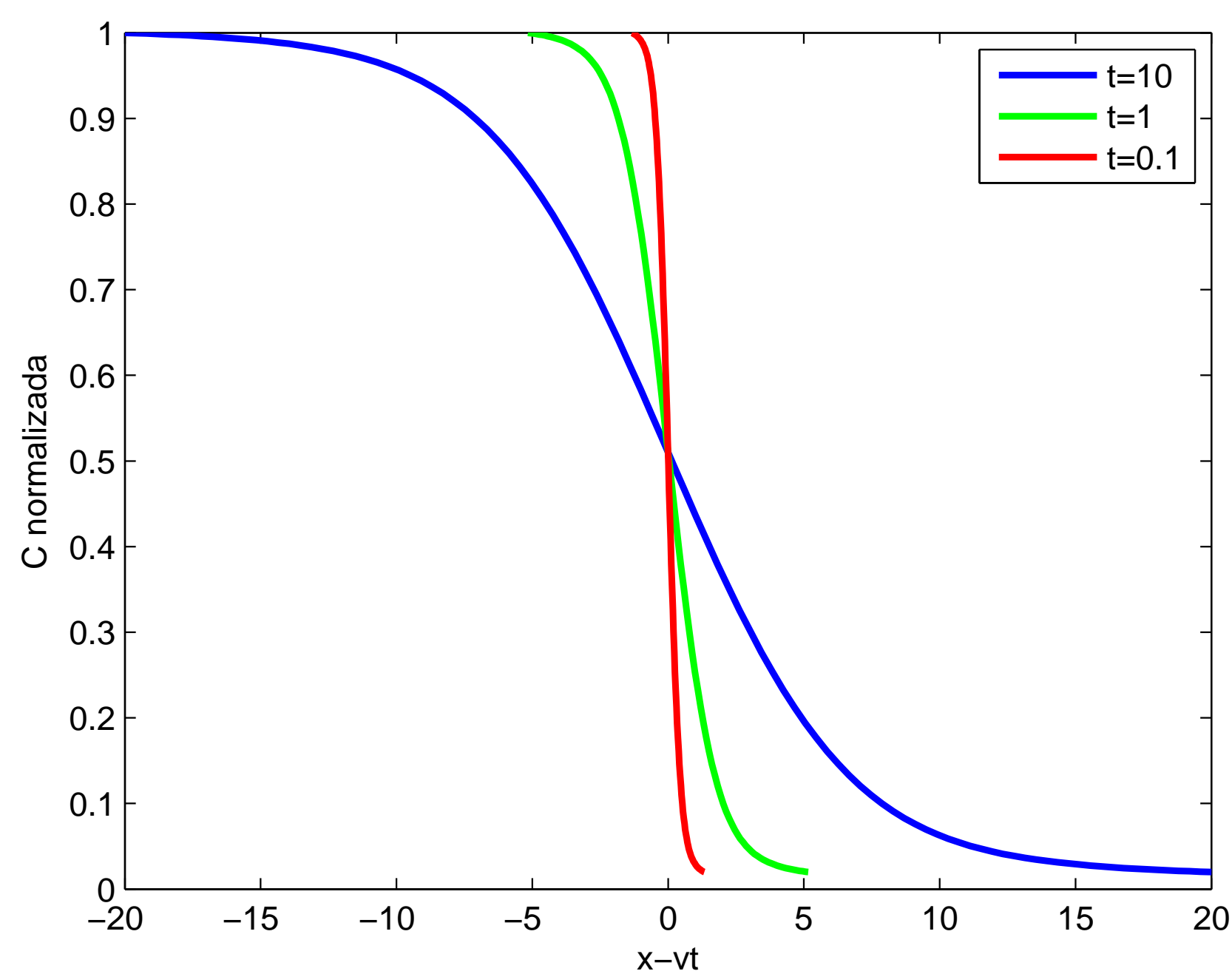
Los modelos de difusión en los experimentos hechos en los llamados "sandbox" revelan que el modelo propuesto por la ley de Fick, no logra ajustarse al comportamiento de cola pesada que se aprecia en los datos experimentales [2], por lo cual mediante el uso del modelo de paso aleatorio o *movimiento browniano* con posibilidad de saltos a todo el espacio se logra modelar la concentración C a través de la posición x en un instante de tiempo t por

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + \mathcal{D} \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha}, \quad (1)$$

donde v representa el flujo de difusión, \mathcal{D} es el coeficiente de difusión y α representa el orden de la derivada espacial. Dicha ecuación puede ser resuelta mediante la transformada de Fourier y con métodos numéricos, obteniendo

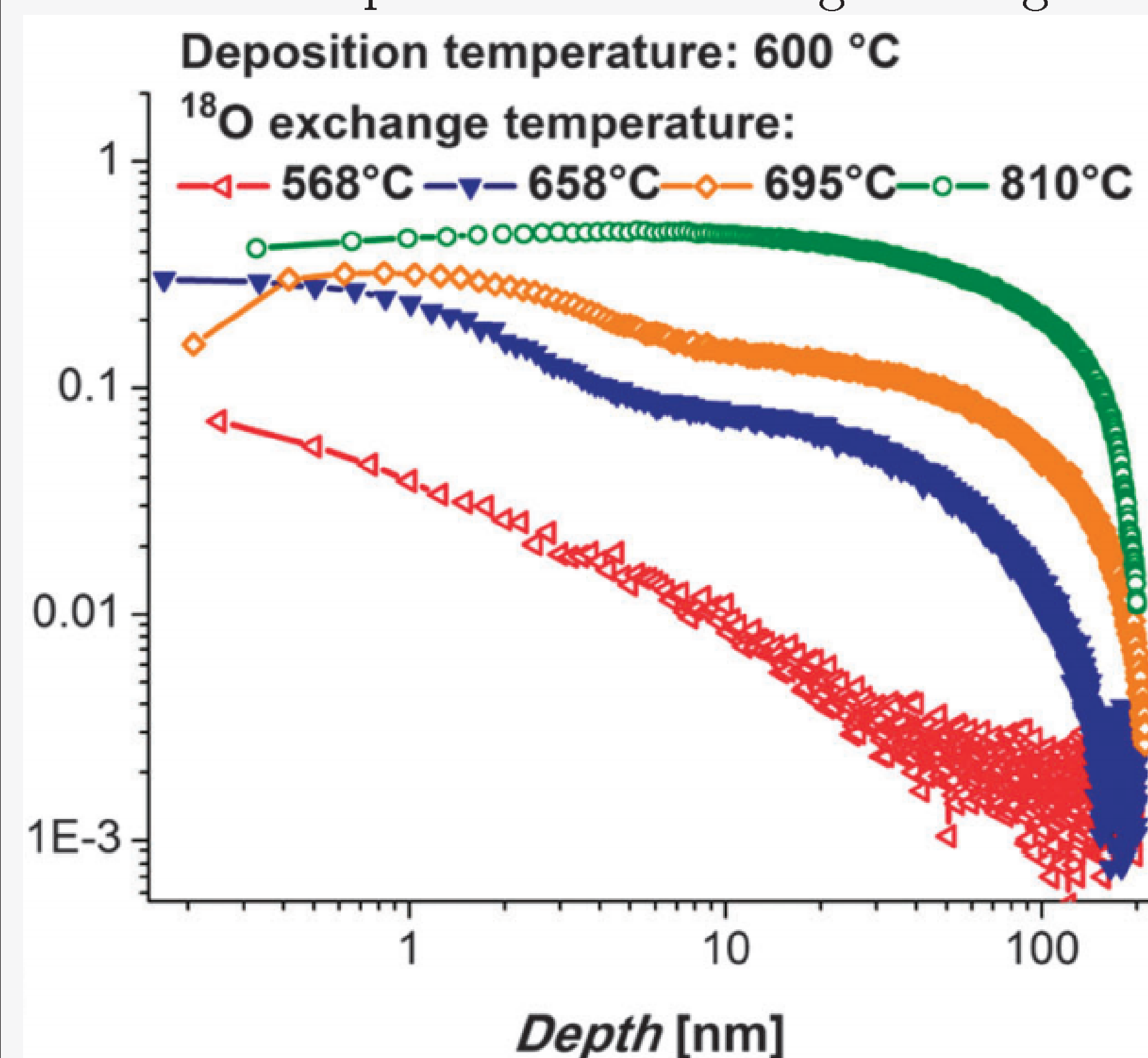
$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[1 - \text{serf}_\alpha \left(\frac{x - vt}{(\mathcal{B}t)^{1/\alpha}} \right) \right], \quad (2)$$

con C_0 concentración inicial y $\mathcal{B} := |\cos(\pi\alpha/2)|\mathcal{D}$ [3]. Dichas soluciones se representan en las siguientes gráficas



Donde se ha usado $\alpha = 1,7$ y $\mathcal{B} = 1$ con referencia $x = 0$ como la superficie de la muestra.

Ahora mediante el uso de estas curvas funciones de concentración se buscará estimar una aproximación a las curvas experimentales de [4], las cuales se presentan en la siguiente gráfica.



Función de concentración

Dado que la ecuación (1) que describe la concentración con el moldeo fraccionario, no posee solución analítica, es necesario implementarla en el software `Matlab`. Para esto y teniendo en cuenta que

$$\text{serf}_\alpha(z) = 2 \int_0^z f_\alpha(x) dx,$$

donde $f_\alpha(x)$ es la función de distribución α -estable de Lévy [3]. Por lo cual se usará la regla de integración de Simpson $h/6$, para estimar el valor de $\text{serf}_\alpha(z)$ en todo punto

$$\text{serf}_\alpha(z) \approx \sum_{i=0}^{N-1} \frac{h}{6} (f_\alpha^i + 4f_\alpha^{\text{medi}} + f_\alpha^{i+1}),$$

considerando una malla de nodos z_i con

$$0 = z_0 < z_1 < \dots < z_N = z,$$

equiespaciados por una distancia h y denotando f_α^i la función de distribución evaluada en el nodo i y f_α^{medi} la función de distribución evaluada en $(z_i + z_{i+1})/2$.

Curva de concentración

Mediante los gráficos de [4] y con la herramienta computacional `WebPlotDigitizer`, se obtienen los datos del perfil de concentraciones. Ahora bien para trazar la curva experimental, se usará el polinomio interpolador de Lagrange definido por

$$p(x) := \sum_{j=0}^n y_j \cdot L_j(x),$$

donde la función $L_j(x)$ se define como sigue

$$L_j(x) := \prod_{i=0, i \neq j}^n \frac{x - x_i}{x_j - x_i}.$$

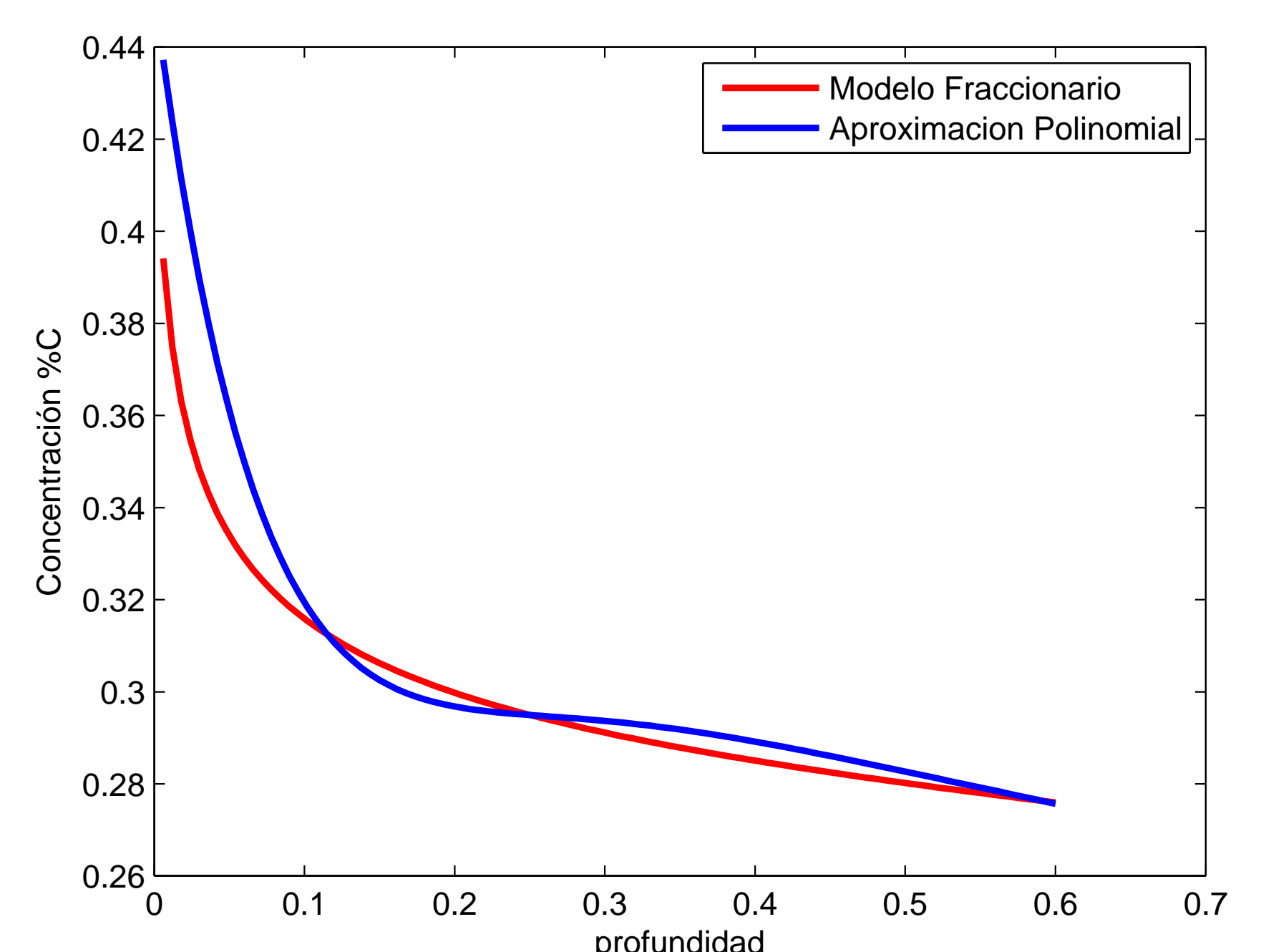
Así, para cada dato (x_i, y_i) de n disponibles de concentraciones y_i a una profundidad x_i , se genera un polinomio que pasa por cada dato como estimador de la curva que se describe en el perfil de concentraciones.

Este polinomio se implementará en una rutina para `Matlab`, mediante la cual, se podrá comparar al modelo propuesto.

Metodología

Debido a que la solución (2), depende de la concentración inicial C_0 , y los parámetros α y \mathcal{B} , es necesario ajustar dichos parámetros de tal manera de poder obtener la mejor aproximación a la curva de concentración. Para esto, en cada dato x_i , se estima el error $e_i = (C(x_i, t^*) - y_i)$ para valores α_0 y \mathcal{B}_0 iniciales y para un tiempo t^* fijo y así mediante desplazamientos locales buscar los valores de los parámetros tal que la suma de los errores cuadráticos se minimice, así tras sucesivas iteraciones locales, se obtiene que para la difusión a $T = 658[^\circ\text{C}]$ las mejores aproximaciones con este método son $\alpha = 0,3636$ y $\mathcal{B} = 0,2681$.

Resultado



Conclusiones y trabajo a futuro

- Se da la posibilidad de asociar el paso aleatorio en la difusión en sólidos para poder explicar el fenómeno $z^{6/5}$, pero es necesario implementar este modelo en más curvas de difusión y buscar un modelo de regresión no lineal que ajuste de mejor manera los parámetros para obtener mejores conclusiones.
- Es necesario obtener una mayor fuente de datos con mayor confiabilidad y exactitud, dado que los datos obtenidos de `WebPlotDigitizer` están sujetos a error de escalamiento.

Referencias

- [1] Mehrer H. *Diffusion in Solids*. SSS0155. Springer, 2007.
- [2] David A Benson, Stephen W Wheatcraft, and Mark M Meerschaert. Application of a fractional advection-dispersion equation. *Water Resources Research*, 36(6):1403–1412, 2000.
- [3] David A Benson, Stephen W Wheatcraft, and Mark M Meerschaert. The fractional-order governing equation of lévy motion. *Water Resources Research*, 36(6):1413–1423, 2000.
- [4] Edvinas Navickas, Tobias M Huber, Yan Chen, Walid Hetaba, Gerald Holzlechner, Ghislain Rupp, Michael Stöger-Pollach, Gernot Friedbacher, Herbert Hutter, Bilge Yildiz, et al. Fast oxygen exchange and diffusion kinetics of grain boundaries in sr-doped lamno 3 thin films. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(12):7659–7669, 2015.