

2 ej  
57



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

MÉTODOS NUMÉRICOS PARA MODELAR  
SUPERFICIES DE FRACTURA

TESIS QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

F I S I C O

P R E S E N T A

FRANCO TOLEDO DE LA CRUZ

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

MEXICO D. F.

8 JUN 1989

JUNIO DE 1989



NO ADEUDA LIBROS  
EN BIBLIOTECA  
CENTRAL



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## INDICE

### CAPITULO I.- INTRODUCCION

- I.1.-ORIGEN DEL PROBLEMA.
- I.2.-PRIMEROS ANALISIS.
- I.3.-ESTUDIOS NUMERICOS.
- I.4.-ACOPLAMIENTO DE LOS PROCESOS DIFUSIVOS.
- I.5.-OBJETIVO DEL TRABAJO.

### CAPITULO II.-DERIVACION DE LAS ECUACIONES DE DIFUSION.

- II.1.-GENERALIDADES.
- II.2.-ANALISIS BIDIMENSIONAL.
  - (a).-DIFUSION SOBRE LA SUPERFICIE DE LA CAVIDAD.
  - (b).-DIFUSION EN LA FRONTERA DE GRANO.
  - (c).-CONDICIONES DE FRONTERA.
- II.3.-ANALISIS TRIDIMENSIONAL.
  - (a).-DIFUSION SUPERFICIAL.
  - (b).-DIFUSION EN LA FRONTERA DE GRANO.
  - (c).-CONDICIONES DE FRONTERA.

### CAPITULO III.-METODOS NUMERICOS.

- III.1.ECUACIONES.
- III.2.-METODO EN DIFERENCIAS FINITAS.

III.3.-APLICACION A LAS CONDICIONES DE FRONTERA.

III.4.-ACOPLAMIENTO DE LOS PROCESOS DIFUSIVOS.

#### CAPITULO IV.-TEORIA DE SPLINES.

IV.1.-INTRODUCCION.

IV.2.-DEFINICION DE SPLINES DE TERCER GRADO.

IV.3.-EL ESPACIO VECTORIAL  $\mathcal{S}_3$ .

IV.4.-DETERMINACION DEL SPLINE DE INTERPOLACION.

IV.5.-EXISTENCIA Y UNICIDAD DEL SPLINE CUBICO.

IV.6.-PROPIEDADES ADICIONALES.

#### CAPITULO V.-RESULTADOS Y CONCLUSIONES.

V.1.-PROCEDIMIENTO DE DISCRETIZACION.

V.2.-DESCRIPCION DE LOS PROGRAMAS.

V.3.-MOVIMIENTO DE LA PUNTA DE LA CAVIDAD.

V.4.-RESULTADOS.

V.5.-CONCLUSIONES.

## CAPITULO I.

### INTRODUCCION.

#### I.1.-ORIGEN DEL PROBLEMA.

En estudios realizados sobre la fragilización de materiales sometidos a altas dosis de radiación [1], se ha observado que una de las causas principales del deterioro en sus propiedades mecánicas es la formación de burbujas de helio en las fronteras de grano de estos materiales. Debido a las dificultades que representa el estudio de la presencia de dichas burbujas, en las condiciones en que fueron observadas, fué necesario desarrollar diferentes métodos para simular los efectos esenciales en el laboratorio. S. H. GOODS y W. D. NIX [2] desarrollaron un método experimental para introducir burbujas de vapor de agua, de un tamaño y una distribución determinadas, en las fronteras de grano en materiales de plata policristalina pura. Supusieron que, como el helio es un gas inerte, la causa de la fragilización es la presencia de las cavidades y no la especie gaseosa en su interior. Por lo tanto, los resultados obtenidos pueden compararse con las observaciones originales. Posteriormente, T. G. NIEH y W. D. NIX [3]-[4] extendieron la técnica para introducir también burbujas de agua en materiales de cobre. Como se esperaba, las microestructuras de burbujas de agua, tanto en plata como en cobre simulan muy bien el efecto fragilizante de las burbujas de helio. Al analizar las superficies de fractura, se encontró además que, como la distribución de las cavidades antes de las pruebas y

después de la fractura coincidían, la causa se debió prácticamente solo al crecimiento de las cavidades y que se puede considerar, por tanto, que no se generaron más durante el proceso, cuando variaron la temperatura entre 200°C y 550°C.

### I.2.-PRIMEROS ANALISIS.

En la literatura [5]-[6], se han propuesto dos mecanismos diferentes para explicar el crecimiento de las cavidades; uno basado en procesos controlados por autodifusión atómica y otro por deformación plástica de los granos cristalinos, es decir, en el primer caso la causa del crecimiento es el desplazamiento y reacomodo de los átomos en la red cristalina y en el segundo es por la deformación inelástica de los granos. Sin embargo, NIEH y NIX [7] diseñaron un experimento para probar que el crecimiento de cavidades no se rige por deformación plástica. Para ello, demostraron que la introducción de algunas partículas de Mg O en una matriz de plata hace que adquiera un gran endurecimiento. Observaron además, que la rapidez de termofluencia para esta matriz se reduce de manera notable con respecto a la plata pura. Sin embargo, después de introducir burbujas de vapor de agua en las fronteras de grano de ambos materiales, sus propiedades de termofluencia resultaron esencialmente iguales. La independencia del tiempo de fractura con respecto a la dureza de los granos los condujo a concluir que la deformación plástica entonces, no rige el crecimiento de las cavidades. Por las experiencias expuestas anteriormente, el crecimiento de cavidades

intergranulares, en condiciones de termofluencia, se ha convertido en un problema clásico de la metalurgia mecánica. Generalmente, para atacar este problema, se supone que las cavidades se encuentran localizadas en las fronteras de grano del material, el cual se somete a tensión, y que crecen por el transporte difusivo de los átomos, desde la superficie de la cavidad hasta la frontera de grano adyacente. El fenómeno de la difusión atómica se puede efectuar por el movimiento de los átomos siguiendo dos caminos posibles; ya sea que los átomos se muevan solamente sobre la superficie de la cavidad hasta alcanzar la frontera de grano o que, de la superficie de la cavidad pasen a la red cristalina y de allí, a la frontera de grano. (Ver figura 1). Sin embargo, a temperaturas ordinarias, se ha demostrado [8], que el transporte atómico través de la red puede despreciarse porque es mucho más lento comparado con el transporte sobre la superficie y en la frontera de grano. Originalmente, el proceso se estudió en el caso en que la difusión en la frontera de grano es mucho más lenta que la difusión superficial. En este caso, como los procesos operan en serie, se dice que la difusión en la frontera de grano controla el proceso de crecimiento. El estudio fué hecho primero por D. HULL y R. E. RIMMER [8] y subsecuentemente extendido y modificado en otros trabajos [9], [10] y [11]. En ellos se toma en cuenta el trabajo de R. W. BALLUFFI y L. L. SEIGLE [12], en que demuestran que la creación de las vacancias suficientes para el crecimiento de las cavidades, se debe a la tensión normal que actúa sobre la frontera de grano. De acuerdo a esto, la fuerza motriz de la

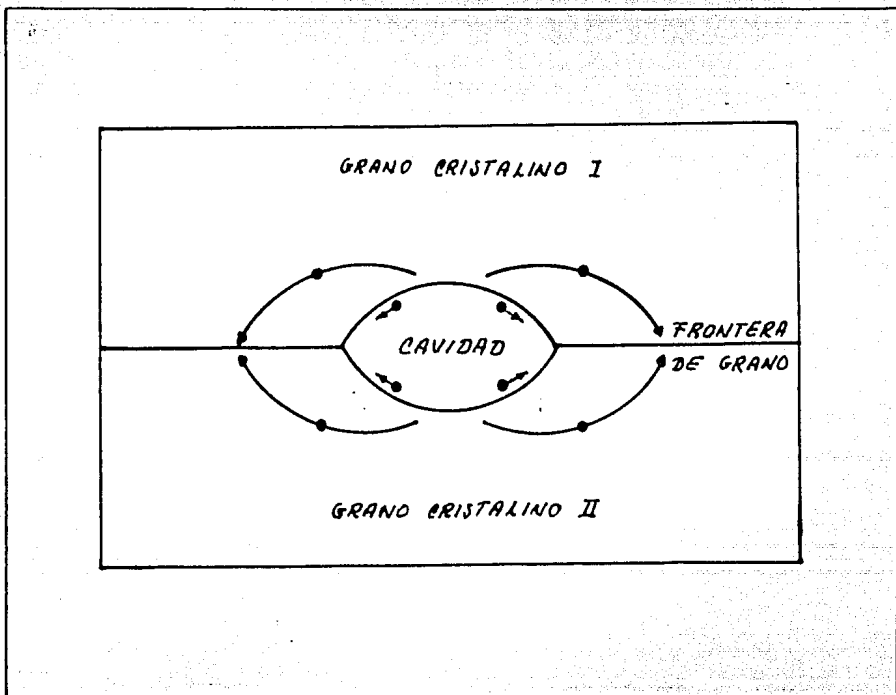


Figura 1.

difusión, como se verá mas adelante, se produce por gradientes de potencial químico que a su vez resulta de la distribución no uniforme de las tracciones normales a la frontera de grano, tal y como había sido calculado por C. HERRING [13]. La rapidéz del crecimiento de la cavidad que obtuvieron HULL y RIMMER fué proporcional a la difusividad en la frontera de grano y al esfuerzo aplicado. Una suposición implícita de estos tratamientos es que el perfil de las cavidades es un arco de circunferencia y



que mantienen esa forma durante todo el crecimiento, variando sólo el radio. Esta hipótesis se justifica porque como la difusión superficial es mucho más rápida que la difusión en la frontera de grano, cualquier diferencia en la curvatura de la cavidad, que se desarrolle durante el crecimiento, se elimina rápidamente por la difusión superficial.

Una consideración del caso en que la difusión superficial sea el proceso que controla el crecimiento de la cavidad, revela que existen cambios importantes tanto en la geometría de la cavidad como en la cinética del crecimiento. El primer trabajo, debido a M. YAMASAKI [14] realizado sobre cavidades elípticas, y de F. DOBES [15] sobre elipsoides, indicaron que el efecto de la difusión superficial como el proceso de control, es elongar la cavidad en la dirección normal al esfuerzo aplicado.

TZE-JER CHUANG y JAMES R. RICE [16] fueron los primeros en calcular, más que postular como en los dos casos anteriores, la forma de una superficie; hicieron esto resolviendo la Ecuación de Difusión Superficial de NERNST-EINSTEIN. Para determinar el perfil, resolvieron una ecuación diferencial ordinaria, no lineal de segundo orden, suponiendo que cada punto del perfil se mueve con la misma velocidad y que se preserva la forma durante el crecimiento, es decir se supone que se ha alcanzado un estado estacionario. La solución dió una superficie móvil elongada, en forma de punta de grieta como se muestra en la figura 2.

Cuando esta superficie en forma de punta de grieta se

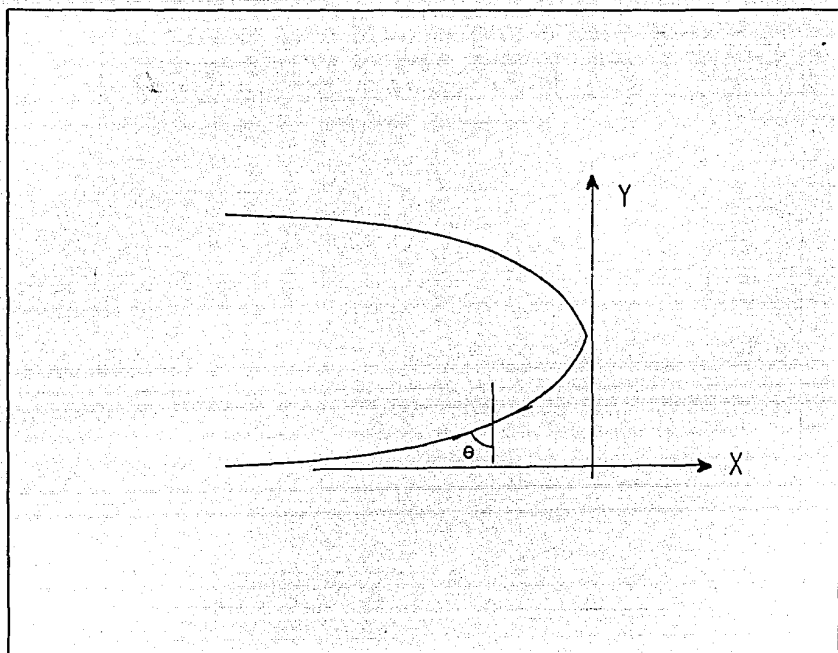


Figura 2.

usa para analizar el caso límite de control por difusión superficial, el resultado es una rapidéz de crecimiento proporcional a la difusividad superficial y a la tercera potencia del esfuerzo aplicado. En este caso límite de crecimiento, la fuerza termodinámica de la difusión está dada por gradientes de potencial químico que aparecen debido a que la curvatura de la cavidad no es uniforme [17]. En tanto que, en la frontera de grano, ahora cualquier diferencia en las tracciones normales se

elimina rápidamente porque la difusión allí es mucho más rápida que la superficial. Este tratamiento del problema por CHUANG y RICE se limitó al crecimiento de cavidades en forma de punta de grieta en estado estacionario, en el sentido ya mencionado.

### I.3.-ESTUDIOS NUMERICOS.

En los análisis anteriores, no se incluye una descripción de los procesos, por los cuales las cavidades formadas en equilibrio, evolucionan hasta tomar la forma de punta de grieta. G. M. PHARR y W. D. NIX [18] llevaron a cabo esta tarea posteriormente, usando una técnica numérica en diferencias finitas para resolver la ecuación de difusión en la superficie de cavidades, tridimensionales con simetría axial, y determinar la evolución de la forma. El mecanismo que estudiaron numéricamente fue el mismo que el de CHUANG y RICE, salvo que no usan la cavidad en forma de punta de grieta, sino que emplean una cavidad inicial como la de HULL y RIMMER. Mostraron que en la etapa inicial del crecimiento, aparecían unas protuberancias en la punta de las cavidades y que, una vez formadas, se comportaban como las puntas de grietas en estado estacionario. Esto explica por qué el modelo de CHUANG y RICE da una buena descripción del crecimiento en el límite de control por difusión superficial. Hasta ahora, se han dado las descripciones de dos casos límites de crecimiento de cavidades por difusión. Claramente, cuando la difusión en la frontera de grano es el proceso más lento, el análisis de HULL y RIMMER debe usarse. Por el contrario, cuando la difusión

superficial es mucho más lenta, se debe recurrir al análisis de CHUANG y RICE. Sin embargo, para la mayoría de los metales, la difusividad superficial y la difusividad, en la frontera de grano, no se diferencian bastante. Por tanto, es de esperarse que el crecimiento de la cavidad podría estar influida por los dos procesos difusionales simultáneamente. Para describir el crecimiento cavitacional, en estas condiciones, es necesario tratar las difusiones al mismo tiempo y acoplarlos usando condiciones de fronteras apropiadas en la punta de la cavidad. T. J. CHUANG, KEITH I. KAGAWA, J. R. RICE y LESLIE B. SILLS [19] han dado una solución a este problema en el caso en que las cavidades crecen en forma de punta de grieta. La solución mostró cómo la ley de potencias para el crecimiento cambia cuando la difusión en la frontera de grano influye sobre la rapidez del crecimiento. Encontraron que su solución no podía usarse cuando la difusión en la frontera de grano es el proceso más lento, porque la suposición de una cavidad en forma de punta de grieta no es válida en esta situación. Sugirieron que el modelo de HULL y RIMMER debía emplearse en este caso. Debido a que el tratamiento de CHUANG et. al., está basado en la geometría de punta de grieta, no puede emplearse tampoco para investigar la transición completa, durante el crecimiento, del proceso controlado por difusión superficial al controlado por difusión en la frontera de grano. Para esto es necesario que la cavidad pueda tomar la forma de punta de grieta o la forma redondeada, dependiendo de la cinética de los procesos difusionales, tanto de la superficie como de la frontera de grano.

#### I.4.-ACOPLAMIENTO DE LOS PROCESOS DIFUSIVOS.

El problema de la difusión en el caso en que los dos procesos influyen de manera preponderante en el proceso fue resuelto por L. MARTINEZ y W. D. NIX [1],[20] quienes usaron un método en diferencias finitas para resolver la ecuación de difusión sobre la superficie de una distribución uniforme de cavidades, con una solución en estado estacionario para la difusión en la frontera de grano, en el sentido que se indicará en el capítulo 2.. Cabe mencionar que, aunque inmediatamente después de aplicar la carga, la concentración de esfuerzos en la frontera de grano en estado estacionario, solo se alcanza cerca de la punta de la cavidad, para cavidades dénsamente espaciadas la distribución de tracciones cambia rápidamente conforme los átomos fluyen desde la superficie de la cavidad hasta la frontera de grano y desde la parte media de la frontera de grano hacia la punta de la cavidad. Así, después de un corto tiempo, la distribución en la frontera de grano alcanza el estado estacionario. A medida que las cavidades crecen y ocupan una fracción mayor de la frontera, el esfuerzo promedio sobre ésta aumenta y la distribución de tracciones cambia pero manteniendo el estado estacionario y el equilibrio mecánico. Debido a que este transitorio es mucho más rápido que el proceso completo de crecimiento de la cavidad, MARTINEZ y NIX consideraron la difusión en la frontera de grano en estado estacionario; la distribución de tracciones requerida, para que los átomos se vayan depositando de manera uniforme en la frontera, se establece rápidamente y se

mantiene durante el proceso. Aplicaron este método a cavidades tanto bidimensionales como tridimensionales con simetría axial, que inicialmente tenían un diámetro de  $0.1 \mu\text{m}$  con una separación de 10 veces el diámetro inicial y un ángulo de capilaridad de  $70^\circ$ . Manteniendo constante el esfuerzo aplicado, calcularon la evolución de la superficie para diferentes valores de la razón de la difusividad; la de la frontera de grano entre la de la superficie de la cavidad. Al comparar sus resultados con los obtenidos anteriormente por CHUANG et. al., encontraron que éstos concordaban cuando la razón de las difusividades era muy grande. Era de esperarse, ya que cuando la difusión en la frontera de grano es mucho más rápida que sobre la superficie de la cavidad, esto es, cuando la razón de las difusividades es muy grande, las cavidades tienen que crecer en forma de punta de grieta. En cambio cuando la razón es muy pequeña, la forma de la cavidad calculada no se asemeja a la de CHUANG et. al.. En este caso se logra una mejor concordancia con el modelo de HULL y RIMMER, cuando se hace la comparación con cavidades redondeadas y con el mismo ángulo de capilaridad en la punta. Como era también de esperarse, esta misma situación se tiene al comparar los tiempos de ruptura.

#### 1.5. - OBJETIVO DEL TRABAJO.

El objeto del presente trabajo es implementar un método numérico basado en el concepto de aproximación por interpolación mediante splines polinomiales de tercer grado [21], para resolver las ecuaciones de MARTINEZ y NIX. Las principales razones que

motivan el uso de esta técnica se encuentran en que, por un lado, permitiría seguir la evolución de la forma de la cavidad conforme transcurre el tiempo, lo que no es tan directo con el método en diferencias finitas. Por otro lado, los splines cúbicos tienen propiedades muy adecuadas para describir el fenómeno físico por estudiar. Por ejemplo, se sabe que los splines cúbicos son las funciones con segunda derivada continua que minimizan un promedio aproximado de la curvatura, entre todas las funciones que interpolan a una función dada y que cumplen con ciertas condiciones de frontera [22]. Considerando que en la superficie de la cavidad, la energía libre es proporcional a la curvatura de la cavidad, se vé la ventaja que se obtendría con este método. Además, determinar un spline apropiado es relativamente sencillo desde el punto de vista numérico ya que se reduce a resolver un sistema lineal de ecuaciones algebraicas, donde la matriz de los coeficientes es simétrica y diagonal dominante [23]. Este sistema se resuelve usando eliminación gaussiana sin pivoteo [24].

En general, dependiendo del problema que se trate de resolver, el conjunto de funciones de aproximación con el cual se trabaja, para propósitos prácticos, se toma con una estructura de espacio vectorial. En el caso de los splines cúbicos, a usar en este tratamiento y que son funciones formadas con polinomios cúbicos por tramos, de manera que el resultado global es una función continua con primera y segunda derivadas continuas, esta condición se cumple. Esto es, dado un conjunto de puntos en el dominio de la función, entre dos puntos vecinos se determina un

polinomio cúbico con la condición de que tanto el polinomio como su primera y su segunda derivada coincidan con el polinomio y las correspondientes derivadas en los intervalos adyacentes. Con la definición usual de suma de dos funciones y la multiplicación de una función por un escalar, este conjunto adquiere la estructura de un espacio vectorial de dimensión  $N+2$  [25], donde  $N$  es el número de puntos en que se unen los polinomios. A estos puntos se les conoce como nodos del spline. Debido a que, como se verá más adelante, las ecuaciones de difusión sobre la superficie de la cavidad contienen la segunda derivada de la curvatura con respecto a la longitud de arco, se presenta una dificultad por el hecho de que los splines polinomiales cúbicos de tercer orden poseen solamente derivada continua hasta de segundo orden. Esta dificultad se cubre usando la técnica en dos etapas; primero se determina el spline que interpola forma de la cavidad usando  $n$  puntos de interpolación y dos condiciones de frontera adicionales. El resultado es una función con segunda derivada continua de la cual podemos calcular la curvatura. Posteriormente calculamos el spline que interpola la curvatura, en los mismos puntos, con otras dos condiciones adicionales. De esta manera se tienen los elementos para determinar la forma posterior de la cavidad, durante un pequeño intervalo de tiempo. Aplicando reiterativamente este proceso, seguiremos la evolución de la cavidad conforme transcurre el tiempo.



## CAPITULO II. DERIVACION DE LAS ECUACIONES DE DIFUSION.

### II.1.-GENERALIDADES.

Como se indicó en la introducción, el problema a resolver consiste en el crecimiento difusional de una distribución uniforme de cavidades, situadas en una frontera de grano, el cual se acopla, mediante condiciones de frontera apropiadas, con la difusión en la frontera de grano. En este capítulo, se obtendrán las ecuaciones que describen el fenómeno y que se resolverán más adelante.

En ausencia de agentes externos, el flujo difusivo de los átomos por el movimiento de las vacancias o de los átomos intersticiales de la red cristalina, es proporcional al gradiente de la concentración  $C$  de estos defectos de la red, de acuerdo a la Ley de Fick [26]

$$J = - D \nabla C \quad (2.1)$$

donde  $D$  es el coeficiente de autodifusión,  $C$  el número de vacancias o átomos intersticiales por unidad de volumen y  $J$  la densidad de corriente que mide el número de los defectos que pasan a través de una unidad de superficie, perpendicular al gradiente de  $C$  y por unidad de tiempo. La constante  $D$  depende tanto de la sustancia como de la temperatura del material. En presencia de la tensión, como en el caso que nos ocupa, los defectos de la red

tenderán a moverse en direcciones que compensen las desigualdades en la tensión sobre el sistema en estudio. En estas circunstancias, es más conveniente escribir las ecuaciones de difusión en términos del potencial químico  $\mu$ , o sea en términos del trabajo requerido por átomo para colocar, reversiblemente una pequeña cantidad del material en la región dada del cristal. Procediendo así, el flujo difusivo  $J$  resulta proporcional al gradiente del potencial químico [13]

$$J = - D / (k T \Omega) \nabla \mu \quad (2.2)$$

donde  $k$  es la constante de Boltzmann,  $T$  la temperatura absoluta y  $\Omega$  el volumen atómico. Si la temperatura y el coeficiente de difusión son constantes, entonces tenemos que

$$\text{div } J = - D / (k T \Omega) \text{div } (\nabla \mu) \quad (2.3)$$

por otro lado, de la ecuación de conservación de la materia [27], que se puede escribir como

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \text{div } J = 0 \quad (2.4)$$

nos dice que si la divergencia del flujo difusivo es diferente de cero, entonces hay una variación local de la densidad de los defectos de la red, dando la suma total igual a cero. Esta expresión, en forma diferencial, tiene su contraparte integral que

se obtiene integrando (4) en una región  $\Omega$ , lo que nos da

$$\int_{\Omega} (\partial C / \partial t) dv + \int_{\Omega} \text{div } J dv = 0$$

Aplicando el teorema de la divergencia [28] a esta ecuación, suponiendo la suficiente regularidad tanto en la función como en la región de integración, tenemos que se transforma en

$$d/dt \left( \int_{\Omega} C dv \right) = \int_{\partial\Omega} J ds \quad (2.5)$$

donde  $\partial\Omega$  es la frontera de  $\Omega$  y  $ds$  es un vector normal a  $\partial\Omega$  apuntando hacia adentro de  $\Omega$ . Esta última ecuación tiene una interpretación sencilla que dice que la rapidez de variación de la cantidad de materia dentro de  $\Omega$  es igual flujo total que entra sobre la superficie  $\partial\Omega$ . En las deducciones que se harán mas adelante esta forma será usada escogiendo apropiadamente la región de integración. Como se mencionó en la introducción, sin embargo, los defectos se generan en la vecindad de la frontera de grano por efecto de la tensión existente en esa zona. Por tanto, podemos tomar, como buena aproximación en el interior del grano

$$\text{div } J = 0. \quad (2.6)$$

Mediante la ecuación (4) esta expresión se puede transformar, para el potencial químico, en la ecuación de Laplace

$$\nabla^2 \mu = 0 \quad (2.7)$$

De acuerdo a la teoría de ecuaciones diferenciales parciales [29], para determinar una solución única a la ecuación de Laplace en una región dada, se requiere conocer el valor de la solución en la frontera de la región en cuestión. Así, el flujo difusivo está determinado por el valor del potencial químico en la frontera de la región en consideración, esto es, en la frontera de grano y en la superficie de la cavidad.

En las secciones que siguen se determinará el potencial químico  $\mu$ , tanto en la frontera de grano como en la superficie de la cavidad, para calcular el flujo difusivo en cada caso, y usando la ecuación de la conservación de la materia, determinar el movimiento que experimenta cada punto de la cavidad. Cabe aclarar que el flujo de los defectos de la red cristalina, al que nos hemos estado refiriendo hasta ahora, se puede interpretar también como un flujo atómico. Por ejemplo, en el problema que nos interesa, el movimiento de las vacancias de la frontera de grano a la superficie de la cavidad puede verse como el movimiento de los átomos de la superficie de la cavidad a la frontera de grano. En lo sucesivo nos referiremos a ésta última.

## II.2.-ANÁLISIS BIDIMENSIONAL.

Consideremos para empezar, un arreglo de cavidades cilíndricas en la frontera de grano de un material, el cual se encuentra sujeto a un esfuerzo  $\sigma_{ap}$ . Supondremos que las cavidades tienen la misma forma de radio  $A$ , medido sobre la frontera de grano, con una separación constante igual a  $B$ . En la figura 3 se

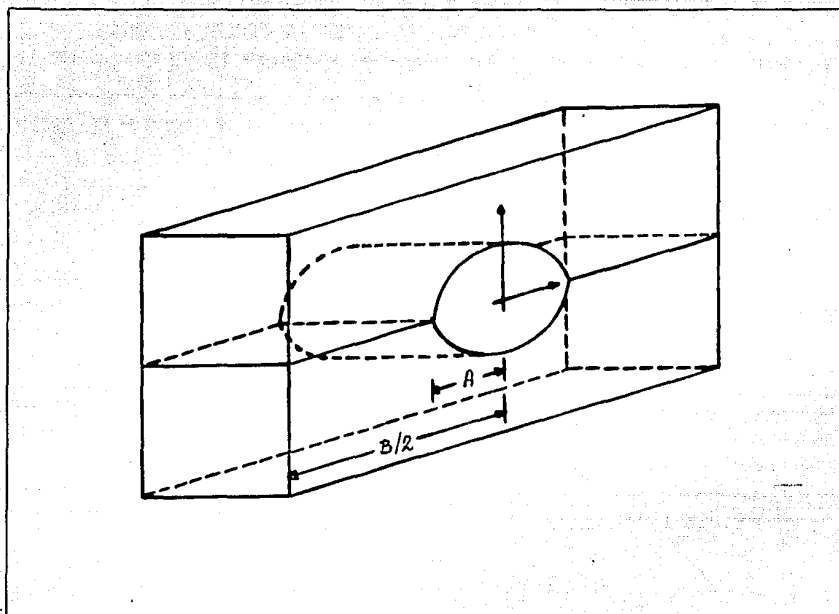


Figura 3.

muestra un corte del material en esta situación, donde el origen de coordenadas se localiza en el centro de la cavidad; el eje  $x$  paralelo a la frontera y el eje  $z$  perpendicular a esta. Usaremos la expresión  $z = u(x,t)$ , para describir la forma de la cavidad, en cualquier tiempo  $t$  como una función que varía con el tiempo  $t$  y con la variable espacial  $x$ .

#### II.2.-(a).-Difusión Sobre la Superficie de la Cavidad.

Veremos a continuación que sobre la superficie de la cavidad,

como ya se mencionó, la difusión se produce por gradientes del potencial químico que, a su vez se deben a diferencias en la curvatura. Estos resultados se obtendrán de las siguientes consideraciones. En primer lugar, tenemos que conforme transcurre el proceso difusional, el área de la superficie de la cavidad tiende a aumentar, lo que nos permite calcular el trabajo requerido para agregar una pequeña cantidad de materia, sobre la superficie, en función de la tensión superficial  $\sigma$  de la cavidad [15], que es igual al trabajo requerido para aumentar el área de la cavidad una unidad. Como los procesos que vamos a estudiar son a temperatura constante, la tensión superficial  $\sigma$  es igual a la energía libre de la superficie  $\gamma_s$  [15]. Para calcular el potencial químico sobre la cavidad, recurriremos a la ilustración de la figura 4, donde se muestra una sección de la superficie subtendida por un ángulo  $\Delta\theta$  con radio de curvatura  $\rho$  y veremos qué sucede cuando el radio de curvatura cambia a  $\rho - \Delta\rho$ . Cabe aclarar que el cambio de la curvatura aquí es un cambio con respecto al tiempo y no con respecto al cambio en la posición sobre la superficie, es decir, el cambio que estamos considerando se debe al paso de una superficie a otra y no al cambio sobre una misma. Como la cavidad es cilíndrica, bastará con tomar sección de profundidad arbitraria, digamos igual a  $L$ . Por lo tanto, el área inicial, correspondiente al radio de curvatura  $\rho$ , es igual a

$$S_\rho = L \Delta s$$

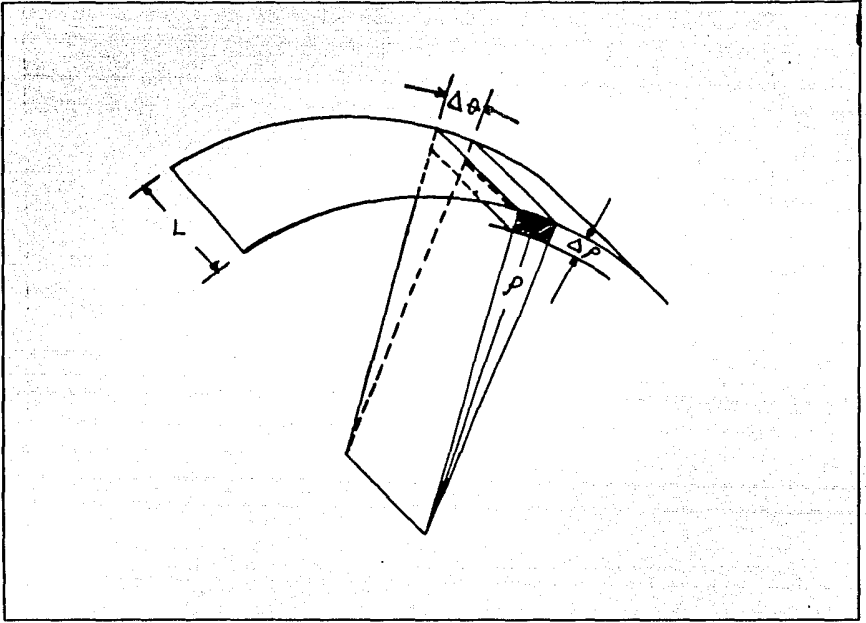


Figura 4.

donde  $\Delta s$  es la longitud de arco subtendido por el ángulo  $\Delta \theta$ , es decir  $\Delta s = \rho \Delta \theta$ . Así, tenemos

$$S_{\rho} = L \rho \Delta \theta$$

Se concluye así que la energía de esa sección de superficie es

$$E_{\rho} = \gamma_s S_{\rho} = \gamma_s L \rho \Delta \theta$$

donde  $\gamma_s$  es la energía libre de la superficie que se supone constante y que no depende de la orientación del cristal. Análogamente, la energía de la superficie final, cuando el radio de curvatura es  $\rho - \Delta\rho$ ,

$$E_{\rho - \Delta\rho} = \gamma_s L (\rho - \Delta\rho) \Delta\theta$$

Por lo tanto, el trabajo requerido para este proceso es

$$\Delta E = E_{\rho - \Delta\rho} - E_{\rho} = -\gamma_s L \Delta\rho \Delta\theta$$

Como el potencial químico  $\mu$  se medirá como la energía por átomo, tenemos que dividir esta cantidad entre el número de átomos que ingresan, que a su vez se puede calcular como el aumento del volumen  $\Delta V$  entre el volumen atómico  $\Omega$ . El aumento del volumen resulta ser, haciendo referencia a la figura 4, igual a  $\Delta V = L (\rho \Delta\theta) \Delta\rho$ . Finalmente, tenemos que el potencial químico sobre la superficie se puede expresar como

$$\Delta\mu = \frac{\Delta E}{\Delta V / \Omega} = \frac{-\Omega \gamma_s}{\rho} = -\Omega \gamma_s K \quad (2.8)$$

donde  $K$  es la curvatura del perfil de la superficie en ese punto. Por conveniencia, y por el desarrollo seguido para encontrar las fórmulas, la curvatura se tomará como positiva para superficies



cóncavas. La componente del flujo atómico en la dirección tangencial a la superficie, se obtiene de la ecuación (2) como

$$J_s = -D_s / (k T \Omega) \frac{\partial \mu}{\partial s} = -\frac{D_s \gamma_s}{k T} \frac{\partial K}{\partial s} \quad (2.9)$$

donde  $D_s$  es el coeficiente de difusión superficial, y  $\partial s$  el elemento de longitud de arco.

De la ecuación de la conservación de la materia, se determinará la velocidad con que se mueve cada punto sobre la superficie de la cavidad. Para ello recurriremos a la figura 5, donde se considera al flujo difusivo  $J_s$  como función de la longitud de arco en los puntos  $s$  y  $s+\Delta s$ . El aumento del volumen debido a estos dos flujos por unidad de tiempo en la región mostrada, es igual al número neto de átomos que entran a la región por unidad de tiempo, multiplicado por el volumen atómico, esto es

$$\Delta V / \Delta t = (J(s+\Delta s) - J(s)) \delta_s L \Omega$$

donde  $\delta_s$  es la anchura difusional de la superficie, o sea la profundidad dentro del material en que ocurre la difusión, que se considera constante;  $J(s+\Delta s)$  el número de átomos que abandonan la región y  $J(s)$  el número que ingresa. Por otro lado, la última cantidad es igual a la velocidad con que aumenta el volumen de la región y que, de la geometría es igual también a

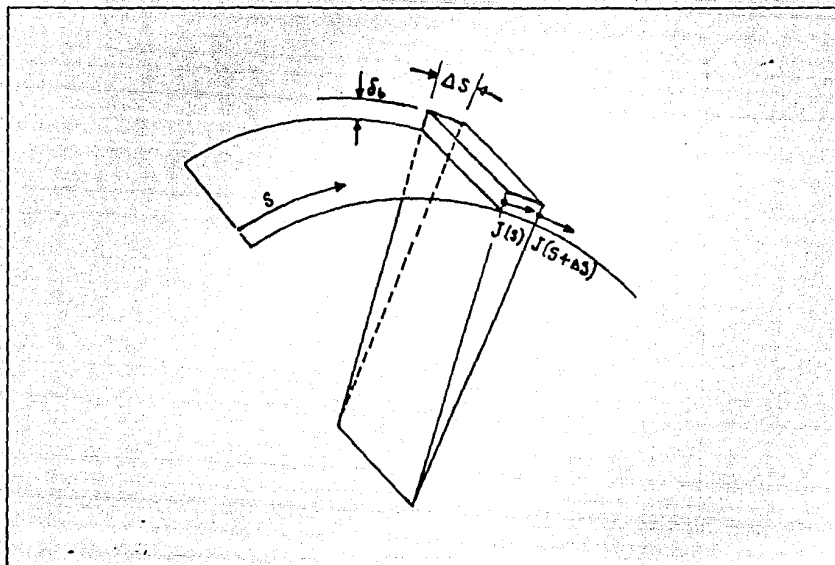


Figura 5.

$$\Delta V / \Delta t = L \Delta s \frac{d\rho}{dt}$$

Igualando estas dos expresiones y tomando el límite cuando  $\Delta s$  tiende a cero, resulta

$$J'_s(s) = \frac{1}{\delta_s \Omega} \frac{d\rho}{dt}$$

recurriendo a la ecuación (8), la velocidad con que se mueve cada punto en la dirección normal a la cavidad, o sea en la dirección del radio de curvatura, está dada por la siguiente expresión

$$\nu = \frac{D_s \gamma_s \delta_s \Omega}{k T} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial s^2} \quad (2.10)$$

Reescribiendo las ecuaciones en forma adimensional, donde las longitudes se miden en unidades de  $A_0$  donde  $2A_0$  es el diámetro inicial de la cavidad como se observa en la figura 4 y el tiempo se mide en unidades de

$$t_s = k T A_0^4 / D_s \delta_s \gamma_s \Omega$$

la ecuación para la velocidad se transforma en

$$\nu = \frac{\partial^2 \kappa}{\partial s^2} \quad (2.11)$$

donde la curvatura  $\kappa$  es igual a

$$\kappa(x, t) = \frac{-(\partial^2 u / \partial x^2)}{[1 + (\partial u / \partial x)^2]^{3/2}} \quad (2.12)$$

y la longitud de arco  $s$  es

$$s(x, t) = \int_0^x \sqrt{1 + (\partial u(\xi, t) / \partial x)^2} d\xi \quad (2.13)$$

Conociendo la velocidad normal, mediante las ecuaciones obtenidas, calculamos la forma posterior de la cavidad. Sin embargo, el movimiento de la punta de la cavidad no se puede

determinar solamente con estas ecuaciones. Para esto, es necesario analizar el fenómeno en la frontera de grano.

## II.2.(b).-Difusion sobre la frontera de grano.

Se ha establecido [13], que los esfuerzos cortantes que actúan sobre la frontera de grano, es decir, las componentes tangenciales de los esfuerzos a la frontera de grano, se eliminan rápidamente por el deslizamiento de las fronteras de grano en la interfase, quedando solamente las componentes normales a ella. El exceso de potencial químico de los átomos, relativo al estado libre de esfuerzos normales se obtiene tomando en cuenta que, como el área de la frontera de grano no crece por este efecto, el trabajo que se realiza es en contra del esfuerzo normal  $\sigma$  que actúa en esta parte. El exceso del potencial químico, con respecto al estado libre de esfuerzo [13], entonces es

$$\Delta \mu = - \Omega T_n \quad (2.14)$$

donde  $T_n$  se considera positiva para esfuerzos de tensión. El flujo atómico en dirección paralela a la frontera de grano (ver figura 3), conforme a la ecuación (3) resulta

$$J_b = D_b / (k T) \frac{\partial T_n}{\partial X} \quad (2.15)$$

donde  $D_b$  es la difusividad en la frontera de grano y  $\partial X$  es el elemento de longitud de la frontera de grano. La conservación de

la materia, aplicada a una rebanada de la frontera de grano, tal como se hizo con la cavidad, comprendida entre las coordenadas  $x$  y  $x+\Delta x$ ; de altura igual al espesor  $\delta_b$  de la frontera y de profundidad igual a la unidad, nos dice que

$$(J_b(x+\Delta x) - J_b(x)) \Omega \delta_b = - \Delta x \frac{\partial U}{\partial t}$$

ya que  $J_b$  es igual al número de átomos que atraviesan la unidad de superficie en la unidad de tiempo. Por eso tenemos que multiplicar por el volumen atómico para determinar el aumento volumétrico en el intervalo de longitud  $\Delta x$ . En el lado derecho,  $\partial U/\partial t$  es la rapidéz de acumulación de materia en la frontera de grano, en el intervalo  $\Delta x$ , y el signo negativo es porque si  $J_b$  disminuye el volumen aumenta y viceversa. Dividiendo la última ecuación entre  $\Delta x$  y tomando el limite cuando este se va a cero, nos queda la ecuación

$$J_b'(x) = - 1/(\Omega \delta_b) \frac{\partial U}{\partial t} \quad (2.16)$$

derivando, por otro lado la ecuación (14), igualando con la ecuación (15) y reordenando los términos nos queda

$$\frac{D_b \delta_b \Omega}{k T} \frac{\partial^2 T_n}{\partial X^2} + \frac{\partial U}{\partial t} = 0 \quad (2.17)$$

Como se mencionó en la introducción, podemos ignorar la difusión transitoria en la frontera de grano y tratar sólo el estado estacionario, en que la materia que se acumula, se acomoda por el crecimiento uniforme de los cristales vecinos. Así, la distribución de tracciones en el estado estacionario, sobre la frontera de grano se puede determinar tomando  $\partial U/\partial t$  como constante. Regresando a la ecuación (17), nos queda una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden, cuya solución es una familia de parábolas [30]. Para determinar una solución de manera única, necesitamos dos condiciones adicionales. Una condición se obtiene observando en la figura 4 que, por simetría, en el centro de la frontera de grano el flujo difusivo se anula, esto es, de la ecuación (15) resulta como primera condición que la derivada de  $T_n$  en  $X=B$  es cero. Como segunda condición usaremos el hecho de que el esfuerzo aplicado es igual a  $\sigma$ , o sea que al integrar  $T_n$  sobre la frontera de grano y dividir entre la longitud, debemos obtener  $\sigma$ . Usando estas dos condiciones, la solución a la ecuación (17), para la distribución de tracciones, se puede escribir como

$$T_n = \frac{\sigma}{1 - A/B} \left\{ \frac{c}{2} \left( \frac{X - A}{B - A} \right)^2 + c \left( \frac{X - A}{B - A} \right) + 1 - \frac{c}{3} \right\} \quad (2.18)$$

donde  $c$  es un parámetro por determinar posteriormente. Este resultado, junto con el obtenido para la superficie de la cavidad,

se usarán para determinar las condiciones de frontera en la punta de la cavidad, esto es, acoplar los dos procesos difusivos.

## II.2.(c).- Condiciones de Frontera.

### (i) Condiciones de Frontera en el Origen.

Como suponemos que las cavidades que vamos a estudiar son simétricas (ver figura 3.), para no trabajar con la cavidad completa, situamos nuestro sistema de coordenadas en el centro de una de ellas y consideramos sólo aquella parte del primer cuadrante. Como se puede ver en la figura 3, una condición directa es que la forma de la cavidad en  $x = 0$  tiene pendiente nula, lo que nos da la condición de frontera

$$u_x(0,t) = \tan(\theta_0) = 0 \quad (2.19)$$

Una segunda condición de frontera que resulta también de manera directa de la simetría de la cavidad consiste en que, como la curvatura es simétrica con respecto al origen, la derivada de la curvatura con respecto a la variable  $x$ , y por tanto con respecto a la longitud de arco, se anula. De esta forma tenemos la otra condición de frontera

$$\kappa_x(0,t) = 0 \quad (2.20)$$

donde el subíndice  $x$  denota derivación parcial con respecto a esa variable. Estas son las condiciones de frontera que se impondrán

en el origen durante todo el proceso, ya que se supone que la simetría se mantiene.

(ii) Condiciones de Frontera en el Extremo Movil.

Una condición de frontera en la punta de la cavidad, que resulta evidente de la geometría, es

$$u(x_{t,p}, t) = 0 \quad (2.21)$$

ya que la punta se mantendrá siempre sobre la frontera de grano. En esta ecuación,  $x_{t,p}$  denota la posición de la punta de la cavidad. Como esta crecerá conforme transcurre el tiempo,  $x_{t,p}$  será una función de  $t$ , lo que nos dice que además de determinar la evolución de la forma de la cavidad, tenemos que determinar cómo avanza la punta de la cavidad. Esta última consideración nos lleva a la conclusión de que necesitamos dos condiciones de frontera adicionales en este extremo.

Para mantener el equilibrio mecánico, la fuerza neta que actúa sobre la cavidad es cero, ya que la cavidad mantiene la misma posición durante todo el proceso. Esta condición nos permitirá obtener una ecuación más para la punta de la cavidad, que se puede encontrar como se ilustra en la figura 6, donde tenemos que las fuerzas que actúan en la punta se deben a la tensión de las superficies que concurren allí. Estas fuerzas, producidas por tensión superficial, como hemos visto se pueden escribir en función de la energía libre de la superficie. La fuerza ejercida debido a la tensión superficial de la cavidad,



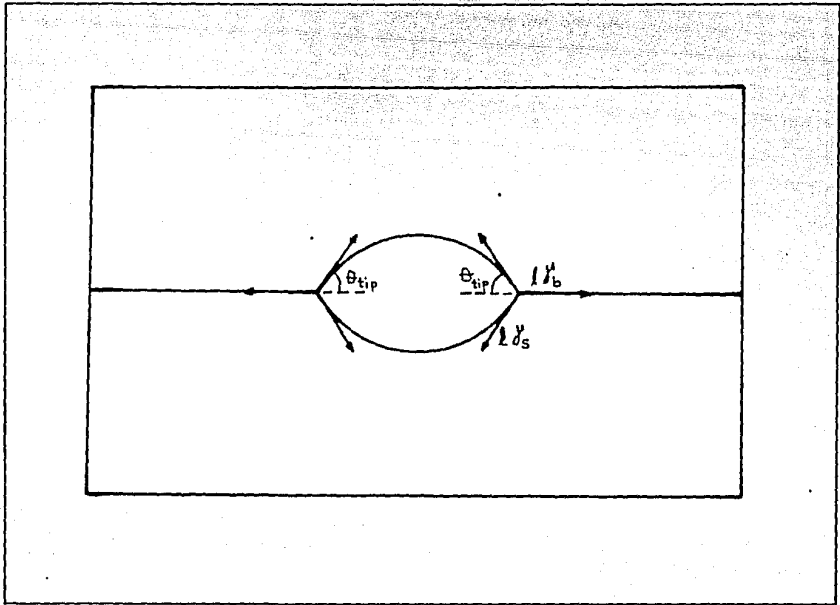


Figura 6.

sobre un segmento de longitud  $l$  de la frontera de la cavidad, en la dirección paralela a la frontera de grano es  $2 l \gamma_s \cos \theta_{tip}$ , donde  $\theta_{tip}$  se conoce como ángulo de capilaridad. Esta fuerza se debe equilibrar con la fuerza  $l \gamma_b$  producida por la frontera de grano, en la dirección contraria. Por tanto tenemos

$$2 l \gamma_s \cos \theta_{tip} = l \gamma_b$$

de donde se tiene que

$$\cos \theta_{tip} = \frac{\gamma_b}{2 \gamma_s} \quad (2.22)$$

Evidentemente, las componentes normales de las fuerzas se anulan. Para plata pura, el ángulo  $\theta_{tip}$  da un valor de  $70^\circ$  [15]. Como consecuencia, tenemos la siguiente condición de frontera

$$u_x(x_{tip}, t) = \tan(\pi - \theta_{tip}) = \tan(110^\circ) \quad (2.23)$$

El acoplamiento de los procesos difusionales sobre la superficie de la cavidad y en la frontera de grano se hace imponiendo condiciones de continuidad tanto en el potencial químico como en el flujo atómico en la punta de la cavidad. La continuidad del potencial químico, se expresa como  $(\Delta\mu)_s = (\Delta\mu)_b$ , mientras que la continuidad del flujo atómico es  $2 \delta_s J_s = \delta_b J_b$ . Estas dos condiciones nos conducen a la ecuación

$$\frac{2 D_s \delta_s \gamma_s}{k T A_0^2} \left( \frac{\partial \kappa}{\partial s} \right)_{tip} = \frac{D_b \delta_b \sigma}{k T} \frac{\epsilon}{(1 - A/B)^2} \quad (2.24)$$

Cuando se elimina  $\epsilon$  de de las ecuaciones (16) y (17),  $\kappa_{tip}$  se puede despejar dando como resultado

$$\kappa_{tip} = \frac{\Sigma}{1 - a/b} \left\{ 1 - \frac{2}{3} (1 - a/b)^2 \frac{b}{f \Sigma} \left( \frac{\partial \kappa}{\partial s} \right)_{tip} \right\} \quad (2.25)$$

con  $a=A/A_0$  y  $b=B/A_0$ , y donde el esfuerzo aplicado se expresa en forma adimensional como

$$\Sigma = \sigma A_0 / \gamma_s \quad (2.26)$$

y la razón de la difusividad entre la frontera de grano y la superficie de la cavidad como

$$f = D_b \delta_b / D_s \delta_s \quad (2.27)$$

Para el desarrollo posterior, la fórmula (26) conviene reescribirla en función de la variable  $x$  en lugar de la longitud de arco. Al hacer la transformación de la ecuación en la variable  $x$ , usaremos la regla de la cadena en la forma

$$\frac{\partial}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s}$$

donde  $\partial x / \partial s = 1 / (\partial s / \partial x)$  y,

$$\frac{\partial s}{\partial x} = \left( 1 + \tan^2(\theta_{tip}) \right)^{1/2} \quad (2.28)$$

De esta manera, el resultado que usaremos será la expresión

$$\left( \frac{\partial \kappa}{\partial x} \right)_{tip} = \frac{3f}{2b} \frac{\Sigma - \kappa_{tip} (1 - a/b)}{(1 - a/b)^2} \left( 1 + \tan^2(\theta_{tip}) \right)^{1/2} \quad (2.29)$$

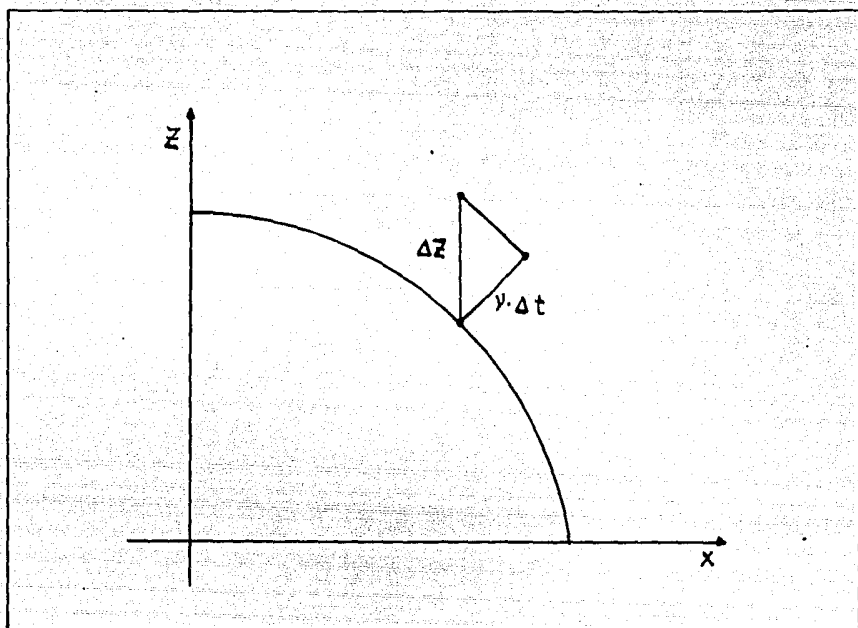


Figura 7.

Este mismo problema se puede replantear como un problema de una ecuación diferencial parcial con frontera móvil [31], de cuarto orden. La formulación en esos términos se obtendrá recurriendo a la ilustración de la figura 7, donde se muestra el perfil de la cavidad al tiempo  $t$  y el correspondiente al tiempo  $t+\Delta t$ , como resultado del desplazamiento de cada punto, durante un intervalo de longitud  $\Delta t$ .

Si  $z = u(x,t)$  representa a la superficie en el tiempo  $t$ ,  $z+\Delta z = u(x,t+\Delta t)$  la representará en  $t+\Delta t$ . Tenemos entonces que,

como conocemos la velocidad normal  $v$  en el punto  $(x,z)$ , la variación  $\Delta z$  se puede calcular como un desplazamiento tal que proyectado en la dirección normal al perfil en  $(x,z)$  nos dé el desplazamiento normal, que es igual a  $v \Delta t$ . De esta forma nos queda que

$$\Delta z = v \Delta t / \cos \theta$$

donde  $\theta$  es el ángulo que hace el vector normal con la dirección positiva del eje  $z$ . Este se puede evaluar en función del ángulo que hace la tangente al perfil con la dirección positiva del eje  $x$ , y mediante las identidades trigonométricas, expresar la ecuación anterior en términos de la derivada de  $z$  con respecto a  $x$   $\partial z / \partial x$ . Tenemos entonces

$$\Delta z = v (1 + (\partial u / \partial x)^2)^{1/2} \Delta t$$

En el límite cuando  $\Delta t$  tiende a cero, se tiene por resolver, la ecuación diferencial parcial no lineal

$$\partial u / \partial t = (1 + (\partial u / \partial x)^2)^{1/2} v \quad (2.30)$$

donde

$$v = \frac{\partial^2 \kappa}{\partial s^2} \quad (2.31)$$

$$\kappa = \frac{-\partial^2 u / \partial x^2}{\left(1 + (\partial u / \partial x)^2\right)^{3/2}} \quad (2.32)$$

y

$$s = \int_0^x \left(1 + (\partial u / \partial \xi)^2\right)^{1/2} d\xi \quad (2.33)$$

con las condiciones de frontera en el origen

$$\kappa(0, t) = 0 \quad (2.34)$$

$$\kappa_x(0, t) = 0. \quad (2.35)$$

Las condiciones de frontera en la punta de la cavidad son

$$u(x_{tip}, t) = 0 \quad (2.36)$$

$$u_x(x_{tip}, t) = \tan(\pi - 110^\circ) \quad (2.37)$$

y

$$\left(\frac{\partial \kappa}{\partial x}\right)_{x_{tip}} = \frac{3f}{2b} \frac{(\Sigma - \kappa_{tip}(1 - a/b))}{(1 - a/b)^2} \sqrt{1 + \tan^2(\theta_{tip})}$$

(2.38)

Así, el problema en el caso bidimensional, consiste en resolver la ecuación diferencial parcial no lineal de cuarto orden (31) donde  $\kappa$  esta dada por la expresion (32) y  $s$  por (33); condiciones de frontera en el origen (34), (35) y las condiciones de frontera en el extremo móvil (36), (37) y (38).

### II.3.-ANALISIS TRIDIMENSIONAL.

#### II.3.(a).-Difusion Superficial

En el caso tridimensional, para mayor facilidad del análisis consideraremos una cavidad con simetría axial, o sea que es simétrica con respecto a una recta que tomaremos como el eje z. Esta cavidad se supondrá situada en la frontera de grano de un material de forma cilíndrica, que consta de solo dos granos cristalinos, donde la frontera de grano es perpendicular al eje del cilindro. Por la simetría de la configuración, la forma de la cavidad conviene escribirla en coordenadas cilíndricas como

$$x = r(t) \cos \phi$$

$$y = r(t) \text{ sen } \phi$$

$$z = u(r(t), t)$$

De esta manera, si tomamos el perfil de la cavidad que se obtiene haciendo un corte con el plano perpendicular al plano xy y que contiene al eje de simetría, reducimos el problema a uno bidimensional. Evidentemente habrá algunos cambios, los cuales se indicarán conforme se vayan describiendo las ecuaciones correspondientes. Por la discusión hecha del caso bidimensional, tanto el potencial químico como el flujo atómico tienen la misma expresión para esta nueva situación, con la diferencia de que ahora, la curvatura  $\kappa$  está dada por

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2 \quad (2.38)$$

con  $\kappa_1$  y  $\kappa_2$  las curvaturas principales de la superficie de la cavidad tridimensional. Por la hipótesis de simetría axial, la curvatura principal  $\kappa_2$  [32], se calcula mediante la ecuación

$$\kappa_2 = \cos \theta / r \quad (2.39)$$

donde  $\theta$  es el ángulo que forma la tangente al perfil de la cavidad, en el punto correspondiente, con el plano xy. Nuevamente, la aplicación de la ecuación de conservación de la masa nos permite obtener una expresión para la velocidad normal que resulta

$$v = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial s} \left( r \frac{\partial \kappa}{\partial s} \right) \quad (2.40)$$

donde la velocidad  $v$ , la coordenada  $r$ , la curvatura  $\kappa$  y la longitud de arco se expresan en forma adimensional, en las mismas unidades que en el caso bidimensional.

### II.3.(b).-Difusion en la Frontera de Grano.

En la frontera de grano, como en la superficie de la cavidad, el potencial químico y el flujo atómico se expresan por ecuaciones análogas al caso bidimensional [18]. La ecuación de la conservación de la masa queda ahora como

$$\frac{D_b \delta_b \Omega}{k T} \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left( -\frac{\partial T}{\partial R} \right) + \frac{\partial U}{\partial t} = 0 \quad (2.41)$$



donde R es la coordenada de los puntos de la frontera, T es la tracción normal y  $\partial U/\partial t$  es la rapidéz con que se acumula el volúmen por unidad de área de frontera de grano, que también se supondrá constante. Como esta constante no se conoce de antemano, al resolver la ecuación (39) aparecerá un parámetro que se determina posteriormente de las condiciones de continuidad del potencial químico y del flujo atómico. La solución de la ecuación (39), usando nuevamente la condición de equilibrio mecánico y de flujo cero en el punto R = B, es

$$T(R) = \frac{2 \sigma [1 - (1 - A^2/B^2)\epsilon]}{4 \ln (B/A) - 3 + 4A/B - A/B} \times [ 2 \ln (R/A) - (R^2 - A^2)/B^2 ] + \sigma \epsilon \quad (2.42)$$

con  $\epsilon$  como el parámetro indeterminado que se mencionó anteriormente.

### II.3.(c).-CONDICIONES DE FRONTERA.

#### (1)Condicion de Frontera en el Origen.

Las condiciones de frontera en el origen se determinan fácilmente, como en el caso anterior, de las condiciones de simetría de la cavidad. Tenemos, por tanto

$$u_r(0,t) = 0$$

$$u_{rrr}(0,t) = 0$$

ya que tanto la forma de la cavidad como la curvatura son simétricas con respecto al origen.

(i) Condición de Frontera en el Extremo Movil.

El acoplamiento de los procesos difusionales, en la superficie y en la frontera de grano, se hace imponiendo la continuidad del flujo atómico y del potencial químico. La combinación de estas condiciones da

$$\kappa_{t1p} = \frac{\Sigma}{1 - a^2/b^2} \frac{a [ 4 \ln(b/a) - 3 + 4a^2/b^2 - a^4/b^4 ]}{2 \parallel (1 - a^2/b^2)} \left( \frac{\partial r}{\partial s} \right)_{t1p}$$

(2.43)

Para encontrar esta ecuación es necesario usar las dos condiciones referidas por el hecho de que la velocidad de acumulación de volumen en la frontera de grano es desconocida. Por el procedimiento que vamos a seguir, en la última expresión cambiamos el término entre paréntesis por

$$\left( \frac{\partial \kappa}{\partial s} \right)_{t1p} = \left( \frac{\partial \kappa}{\partial r} \right)_{t1p} \left( \frac{\partial r}{\partial s} \right)_{t1p}$$

o sea

$$\left(\frac{\partial \kappa}{\partial s}\right)_{t_{1p}} = \left(\frac{\partial \kappa}{\partial r}\right)_{t_{1p}} / \left(1 + \tan^2(\theta_{t_{1p}})\right)^{1/2}$$

De manera análoga, este problema se puede transformar en un problema en ecuaciones diferenciales parciales, donde la función incógnita  $z = u(r,t)$  se determina como la solución de la ecuación diferencial parcial, no lineal de cuarto orden con frontera móvil

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \left(1 + (\partial u / \partial r)^2\right) \nu \quad (2.44)$$

donde  $\nu$  es la velocidad normal dada por la ecuación

$$\nu = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \kappa}{\partial r} \right) \quad (2.45)$$

con  $\kappa = \kappa_1 + \kappa_2$  (2.46)

$$\kappa_1 = \frac{-\partial^2 u / \partial r^2}{\left(1 + (\partial u / \partial r)^2\right)^{3/2}} \quad (2.47)$$

y  $\kappa_2 = \cos \theta / r$  (2.48)

Las condiciones de frontera en el origen, quedan como

$$u_r(0,t) = 0 \quad (2.49)$$

$$u_{rrr}(0,t) = 0 \quad (2.50)$$

En tanto que en la punta móvil de la cavidad, tenemos

$$u(r_{tip}, t) = 0 \quad (2.51)$$

$$u_r(r_{tip}, t) = \tan(\Pi - \theta_{tip}) \quad (2.52)$$

$$\kappa_{tip} = \frac{\Sigma}{1 - \frac{a^2}{b^2}} - \frac{a [4 \ln(b/a) - 3 + 4a^2/b^2 - a^4/b^4]}{2 \int (1 - \frac{a^2}{b^2})} \left( \frac{\partial \kappa}{\partial s} \right)_{tip} \quad (2.53)$$

de hecho  $r_{tip}$ , es una función que se determina conjuntamente con la forma de la cavidad. Por esta razón, en la punta de la cavidad es necesario tener una condición adicional para poder resolver la ecuación diferencial.

### CAPITULO III. METODOS NUMERICOS.

#### III.1. - ECUACIONES.

El primer tratamiento por métodos numéricos del problema de crecimiento de cavidades fué realizado por G. M. PHARR y W. D. NIX [18] en un trabajo donde estudian el proceso gobernado por el mecanismo de difusión superficial, propuesto por T. J. CHUANG y J. R. RICE [16]. En su estudio, PHARR y NIX analizan de hecho dos casos usando cavidades con simetría axial. En el primero estudian una sola cavidad aislada con el fin de analizar efectos de capilaridad exclusivamente. En estas circunstancias, el esfuerzo en la frontera de grano es igual al esfuerzo aplicado. En el segundo caso analizan una distribución periódica de cavidades, que se diferencia del anterior en que, como la distancia entre las cavidades disminuye conforme éstas crecen, el esfuerzo en la frontera de grano cambia conforme transcurre el tiempo, aunque para un tiempo fijo lo toman constante en toda la frontera. En este sentido se dice que analizan la interacción de las cavidades [18].

La ecuación que obtuvieron [18] para el flujo atómico  $J_s$  en la superficie de la cavidad con simetría axial fué

$$J_s = \partial(\kappa_1 + \kappa_2) / \partial s, \quad (3.1)$$

donde  $\kappa_1$  y  $\kappa_2$  son las curvaturas principales [32] de la superficie

y  $\delta s$  es el elemento de longitud de arco medido sobre el perfil de la superficie. La velocidad normal resultó

$$v = \frac{1}{r} \frac{\partial (J_s r)}{\partial s} \quad (3.2)$$

que al derivar se transforma en

$$v = \frac{\partial J_s}{\partial s} + \frac{J_s}{r} \frac{\partial r}{\partial s} \quad (3.3)$$

Las condiciones de frontera en el origen se obtuvieron de consideraciones de simetría. Si  $\theta$  denota el ángulo que hace la tangente al perfil con el plano XY, este se anula porque la cavidad es simétrica con respecto al eje Z. Por otro lado, ya que el origen es el punto donde cambia de dirección el flujo atómico, este tiene que anularse para que cumpla con condiciones de continuidad. De esta manera, tenemos las siguientes condiciones de frontera

$$\theta = 0, \quad (3.4)$$

$$J_s = 0 \quad (3.5)$$

en el origen,  $x = 0$ .

En la punta de la cavidad, el ángulo  $\theta$ , es igual al ángulo de capilaridad  $\theta_0$ , cuyo valor tomaron igual a  $70^\circ$  para

comparar con los resultados experimentales en muestras de plata pura. Como el potencial químico sobre la superficie es

$$\Delta\mu = - \Omega \gamma_s (\kappa_1 + \kappa_2)$$

en tanto que el correspondiente sobre la frontera de grano

$$\Delta\mu = - \Omega \sigma_{11g}$$

tenemos la siguiente condición en la punta de la cavidad, tomando en cuenta la continuidad del potencial en la interfase

$$\gamma_s (\kappa_1 + \kappa_2) = \sigma_{11g}$$

Estas dos condiciones de frontera se escribirán como

$$\theta = \theta_0' \quad (3.6)$$

$$(\kappa_1 + \kappa_2) = \sigma_{11g} r_0 / \gamma_s \quad (3.7)$$

en donde la expresión  $\sigma_{11g}$  indica el esfuerzo existente en la frontera entre las cavidades y  $r_0$  es el radio inicial de la cavidad, que aparece por la normalización de las dimensiones.

### III.2.-METODO EN DIFERENCIAS FINITAS.

La base del método numérico usado consistió en seguir el movimiento de un conjunto discreto de puntos sobre la superficie

inicial de la cavidad; calcular las cantidades de interés en cada punto por diferencias finitas y finalmente, determinar la velocidad normal y la posición subsecuente de estos puntos. Este proceso corresponde a la aproximación de una función  $z = u(r,t)$ , por medio de una discretización del dominio  $D$  de la función, esto es, la selección de un conjunto finito de puntos en  $D$ , donde se determinan los valores de la función. Como la función depende de dos variables, la selección de los puntos se realiza en un subconjunto del plano. La selección de los puntos se lleva a cabo en dos etapas. Primero se divide la variable temporal en un número finito  $M$  de subintervalos, mediante los puntos  $\{t_0, t_1, \dots, t_M\}$  en donde los valores correspondientes de la función son

$$z_i = u(r, t_i); \quad i = 0, 1, \dots, M$$

En segundo lugar, para cada valor de  $i$ , se selecciona otro conjunto finito de puntos, pero ahora con respecto a la variable  $r$ , en donde nuevamente se aproximarán los valores de la función. Al discretizar el perfil inicial, como se muestra en la figura 8, se tienen  $N$  puntos con coordenadas  $(r_i, z_i)$ ; con  $i = 1, 2, \dots, N$ . Como el avance normal requiere conocer la velocidad en la forma dada por la ecuación (2), se tiene que evaluar el flujo difusivo también en cada uno de esos puntos. El flujo en el  $j$ -ésimo punto se aproxima reemplazando la relación en la ecuación (1) por la aproximación en diferencia finita



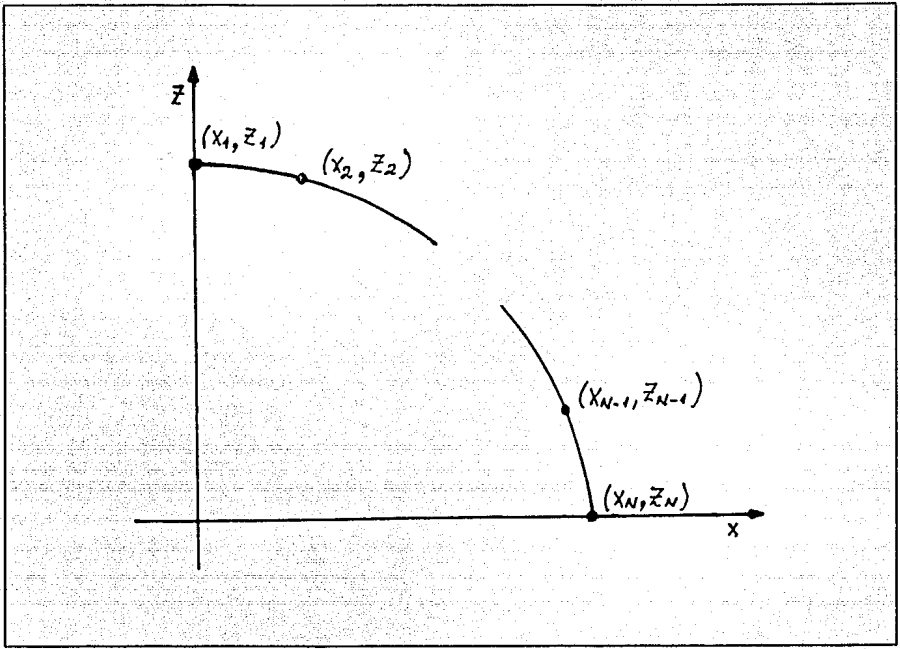


Figura 8.

$$J_j = [(\kappa_1 + \kappa_2)_j - (\kappa_1 + \kappa_2)_{j-1}] / \Delta s_{j-1}^j \quad (3.8)$$

aquí  $\Delta s_{j-1}^j$  representa la distancia entre los puntos  $j-1$  y  $j$ .

Las curvatura  $\kappa_1$  y  $\kappa_2$  se determinan de las ecuaciones

$$(\kappa_1)_j = 1/\rho_j \quad (3.9)$$

$$(\kappa_2)_j = \text{sen } \beta_j / r_j \quad (3.10)$$

en donde  $\rho_j$  se calcula como el radio de la circunferencia que pasa por el punto  $j$ -ésimo y sus dos vecinos;  $j-1$  y  $j+1$ . La curvatura  $\kappa_2$  [32] se ha escrito en forma conveniente en términos del ángulo  $\beta$  que hace la normal a la superficie con el plano XY, ya que numéricamente es más fácil de evaluar. La velocidad en ese punto, de acuerdo a la ecuación (2), se calcula recurriendo a la aproximación

$$v_j = \frac{(J_s)_{j+1} - (J_s)_j}{[\Delta s]_j^{j+1}} + \frac{(J_s)_j}{r_j} \operatorname{sen} \beta_j \quad (3.11)$$

Una vez que se tiene la velocidad y la dirección en que se mueve el  $j$ -ésimo punto, se escoge un pequeño intervalo de tiempo  $\Delta t$  y se determinan las nuevas coordenadas mediante las siguientes expresiones

$$r_j(t + \Delta t) = r_j(t) + v_j \Delta t \cos \beta_j \quad (3.12)$$

$$z_j(t + \Delta t) = z_j(t) + v_j \Delta t \operatorname{sen} \beta_j \quad (3.13)$$

Todos los puntos se mueven de acuerdo a este esquema, excepto el primero y el último, con los cuales se debe tener especial cuidado porque muchas de las expresiones anteriores dejan de tener significado. Estos dos puntos se trataron por separado ya que satisfacen condiciones de frontera diferentes.

### III.3.-CONDICIONES DE FRONTERA.

Para el punto en el origen, o sea el punto situado inicialmente en la parte superior de la cavidad, las condiciones de frontera nos dan inmediatamente que

$$(\theta)_1 = 0 \quad (3.14)$$

$$(J_s)_1 = 0 \quad (3.15)$$

Sin embargo, la velocidad  $v_1$  no se puede calcular de la expresión (9) porque conduce a una indeterminación. Para resolver esta dificultad, se hizo un análisis local del proceso difusivo y se determinó que en el origen

$$v = 2 \frac{d J_s}{d s}$$

lo que condujo a usar la aproximación

$$v_1 = 2 \frac{(J_s)_2 - (J_s)_1}{[\Delta s]_1^2} \quad (3.16)$$

Al calcular  $(J_s)_2$  se tiene, como lo indica la ecuación (8), que la expresión depende del valor de las curvaturas principales tanto en el punto correspondiente a  $j = 2$  como a  $j = 1$ . Esto obliga a hacer una nueva consideración del proceso, basada en la simetría, para que al calcular la curvatura en el primer punto se

use un punto adicional con  $j = 0$  situado a la izquierda del origen y simétrico al punto para  $j = 2$ .

En el último punto, correspondiente a  $j = N$ , la situación es un poco diferente ya que los argumentos de simetría no son aplicables. PHARR y NIX, hacen la observación de que como no pueden aplicar la ecuación (12) porque involucra las cantidades correspondientes a un punto con  $j = N+1$ , lo toman como si fuera un punto que flotara al vaiven del punto  $N-1$ , pero con el requisito de que cumpla con las condiciones de frontera en la punta de la cavidad. Así el último punto se considera que siempre se mueve sobre el plano XY, es decir su coordenada en la dirección del eje Z es  $z = 0$ , y que su posición en el plano es tal que el ángulo de capilaridad  $\theta_0$  se mantenga constante, como se muestra en la figura 10. De acuerdo a esto, la velocidad en el punto  $N-1$  determina el desplazamiento del  $N$ -ésimo. Tal como se puede observar en la ecuación (12), para determinar la velocidad en ese punto, se debe calcular primero el flujo en la punta de la cavidad, que a su vez depende del valor de la curvatura, de acuerdo a la expresión (8). Es aquí donde se usa la última condición de frontera que nos queda y que es la expresión (7) en que  $\sigma_{11g}$  se sustituye en términos del esfuerzo aplicado dependiendo del problema que se estudie. En el caso de una sola cavidad aislada el valor resulta

$$\sigma_{11g} = \sigma_{ap} \quad (3.17a)$$

en donde  $\sigma_{ap}$  es el esfuerzo aplicado. Cuando se tiene una

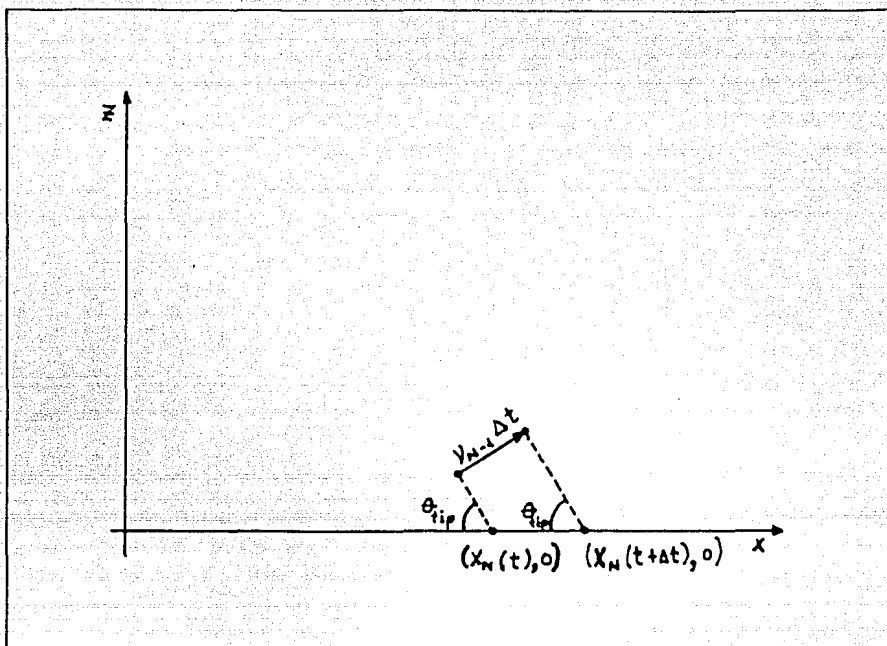


Figura 9.

distribución periódica de cavidades con simetría axial

$$\sigma_{11q} = \sigma_{sp} \left( \frac{\lambda^2}{\lambda^2 - \pi r^2} \right) \quad (3.17b)$$

con  $\lambda$  como la separación del centro de las cavidades. Dependiendo de la situación sin embargo, las ecuaciones (18) permiten calcular la curvatura en la punta de la cavidad y por lo tanto tener todos los elementos necesarios para seguir la evolución de la cavidad en cada caso.

Un estudio adicional del problema fue llevado a cabo por L. MARTINEZ y W. D. NIX [1],[20] quienes toman en cuenta que para algunos materiales, la difusión en la frontera de grano no es lo suficientemente rápido como para que el proceso sea controlado por la difusión superficial. Es decir, hay casos en que la razón de la difusividad  $f = D_b \delta_b / D_s \delta_s$  es muy grande, y por lo tanto, la difusión en la frontera de grano es mayor que en la superficie de la cavidad, pero que en otros resulta que  $f$  es muy pequeña y entonces, se tiene la situación contraria. Por lo tanto, MARTINEZ y NIX analizan el problema cuando la distribución de tracciones en la frontera de grano no es uniforme, aunque consideran que el depósito de materia sí se efectúa de uniformemente. En este sentido, se dice que analizan el problema en estado estacionario. Posteriormente, se calculó la distribución de tracciones, y por lo tanto el potencial químico, en la frontera de grano. Al imponer la condición de continuidad en el flujo atómico y en el potencial químico, se obtuvo la siguiente ecuación, en el caso bidimensional

$$\kappa_{tip} = \frac{\Sigma}{1 - a/b} \left\{ 1 - \frac{2}{3} (1 - a/b)^2 \frac{b}{f \Sigma} \left( \frac{\partial \kappa}{\partial s} \right)_{tip} \right\}$$

tal como se efectuó en el Capítulo II. Bajo estas hipótesis, las ecuaciones a resolver quedaron como

$$\nu = \frac{\partial^2 \kappa}{\partial s^2} \quad (3.18)$$

donde  $\kappa$  es la curvatura y  $s$  la longitud de arco en forma adimensional. Las condiciones de frontera en el origen quedan como

$$u_x(0, t) = 0 \quad (3.19)$$

$$u_{xxx}(0, t) = 0 \quad (3.20)$$

expresiones en que se han usado subíndices para indicar derivadas parciales. Finalmente, las condiciones de frontera en la punta de la cavidad resultaron

$$u(x_{tip}, t) = 0 \quad (3.21)$$

$$u_x(x_{tip}, t) = \tan(110^\circ) \quad (3.22)$$

$$K_{tip} = \frac{\Sigma}{1 - a/b} \left\{ 1 - \frac{2}{3} (1 - a/b)^2 \frac{b}{f \Sigma} \left( \frac{\partial \kappa}{\partial s} \right)_{tip} \right\} \quad (3.23)$$

Para resolver las ecuaciones (18)-(23), por diferencias finitas, se usaron las aproximaciones de PHARR y NIX, descritas anteriormente, tanto para calcular las cantidades involucradas en la superficie de la cavidad, como para imponer las condiciones de frontera en el origen. Además, para mantener el ángulo de capilaridad en la punta de la cavidad, usan la técnica de flotamiento del último punto conforme al movimiento del penúltimo. Sin embargo, nuevamente se tiene que para calcular la velocidad de éste, se necesita conocer la curvatura en la punta de la cavidad. Este problema se resuelve mediante la ecuación (23), al aproximar

la derivada de la curvatura con respecto a la longitud de arco por la expresión

$$\left( \frac{\partial \kappa}{\partial s} \right)_{tip} = \frac{\kappa_N - \kappa_{N-1}}{[\Delta s]_{N-1}^N} \quad (3.24)$$

Substituyendo en (23) y despejando  $\kappa_N$ , resulta que

$$\kappa_N = \frac{\sum / (1 - x_N/b) + \frac{2}{3} \frac{b}{\sum} (1 - x_N/b) \kappa_{N-1} / [\Delta s]_{N-1}^N}{1 + \frac{2}{3} \frac{b}{f} (1 - x_N/b) / [\Delta s]_{N-1}^N} \quad (3.25)$$

Con esta aproximación se puede calcular la velocidad en cada uno de los puntos, desde el primero hasta el penúltimo y entonces se puede seguir la evolución de la forma de la cavidad.

Tomando cavidades iniciales con un diámetro igual a  $0.1 \mu\text{m}$ , una separación de 10 veces este diámetro y un ángulo de capilaridad de  $70^\circ$ , compararon los crecimientos de cavidades la razón de las difusividades varía desde  $10^{-2}$  hasta  $10^4$ . Encontraron que cuando la razón de la difusividad es pequeña, sus resultados concordaban más con las predicciones de HULL y RIMMER [8], como se muestra en la figura 10 (a) en que se describe una secuencia del crecimiento y la evolución de la cavidad para un valor de  $f = 0.01$ . En cambio cuando la difusividad es mayor, la concordancia es mejor con el modelo de CHUANG et al. [19], como se muestra en la figura 10(b) con  $f = 1.0$ .

En el caso tridimensional, la situación es análoga, ya que



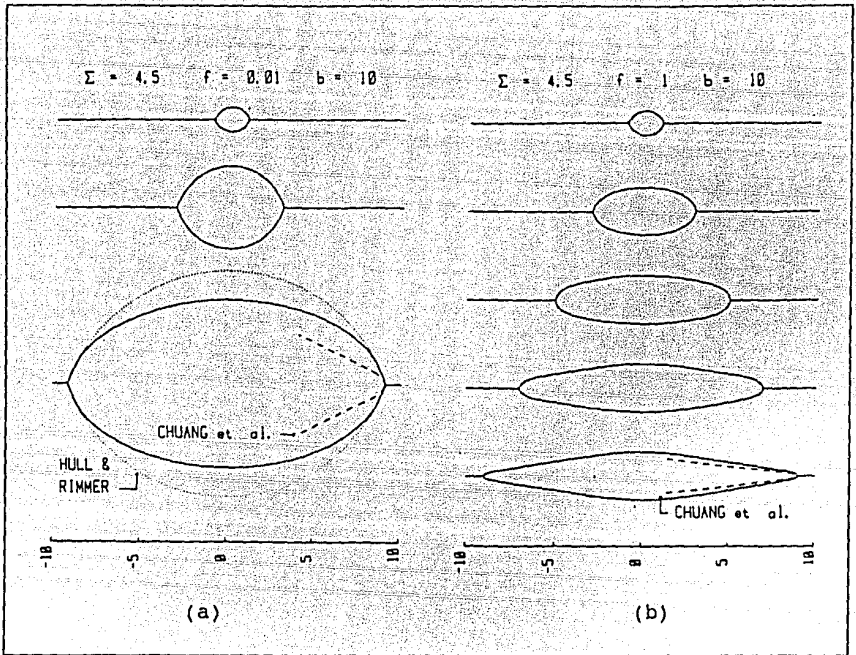


Figura 10.

como se hizo ver en el capítulo II, éste se reduce fácilmente al caso bidimensional cuando la cavidad posee simetría axial. La diferencia con el modelo de PHARR y NIX [18], es que el estado estacionario consiste en que el depósito de materia en la frontera de grano se lleva a cabo de manera uniforme, a diferencia de aquél en que la distribución de tracciones era la uniforme. En estas condiciones, la curvatura en la punta de la cavidad [20] se encontró igual a

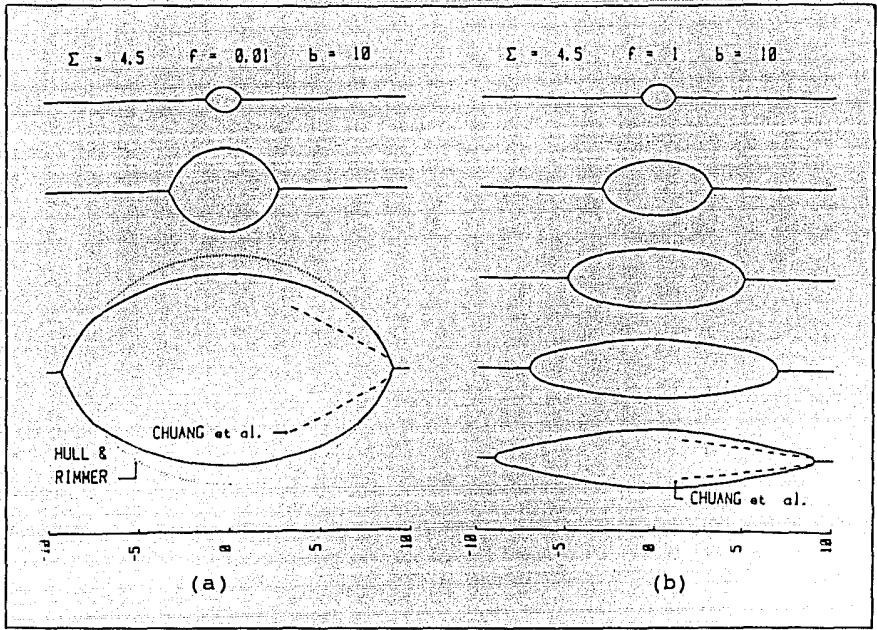


Figura 11

$$\kappa_{tip} = \frac{\Sigma}{1 - a^2/b^2} - \frac{a [4 \ln(b/a) - 3 + 4a^2/b^2 - a^4/b^4]}{2 f (1 - a^2/b^2)} \left( \frac{\partial \kappa}{\partial s} \right)_{tip} \quad (3.26)$$

Aproximando la derivada de la curvatura en la punta de la cavidad por la ecuación (24) y despejando, tenemos que la curvatura en el extremo móvil es

$$\kappa_N = [\Sigma / (1 - r_N^2/b^2) + H \kappa_{N-1} / [\Delta s]_{N-1}^N / [1 + H / [\Delta s]_{N-1}^N]] \quad (3.27)$$

con H igual a

$$H = \frac{r_N [\ln(b/r_N) - 3 + (4r_N/b)^2 - (r_N/b)^4]}{2f [1 - (r_N/b)^2]^2} \quad (3.28)$$

Usando los cambios mencionados, se calcula la velocidad en los puntos necesarios y la evolución de la cavidad se puede seguir. Los resultados obtenidos se muestran en la figura 11, en donde se puede ver que, para un valor de  $f = 0.01$  en (a) se tiene mejor aproximación al modelo de HULL y RIMMER, mientras que para  $f = 1.0$  el resultado se aproxima más al modelo de CHUANG et. al.

## CAPITULO IV

### TEORIA DE SPLINES

#### IV.1.-INTRODUCCION.

Durante mucho tiempo se usaron tiras de madera, finas y largas, o de cualquier otro material para trazar curvas suaves que se ajusten a un conjunto de puntos especificados. Estas tiras o splines se fijaban colocando objetos pesados de manera que variando la posición y el número de estos se podía trazar la curva deseada.

Si consideramos a la tira o spline como una viga delgada, entonces, de acuerdo a la ecuación de Bernoulli-Euler [23], se cumple que

$$M(x) = E I [1/R(x)] \quad (4.1)$$

Aquí,  $M(x)$  es el momento de tensión,  $E$  el módulo de Young,  $I$  el momento de inercia y  $R(x)$  el radio de curvatura de la forma que adopta la tira, esto es  $R(x) = 1/K(x)$ , donde  $K(x)$  denota la curvatura, por lo tanto

$$M(x) = E I [1 + (y')^2]^{3/2} / y'' \quad (4.2)$$

Para deflexiones pequeñas, la primera derivada es despreciable, lo que nos deja la ecuación anterior, al despejar, como

$$y'' = M(x)/EI \quad (4.3)$$

Si analizamos esta expresión y consideramos que los pesos actúan como soportes simples, la variación de  $M(x)$ , entre los pesos es lineal.

El spline matemático se obtiene aproximando la tira mencionada, por una expresión cúbica entre cada par de pesos adyacentes, con ciertas discontinuidades permitidas de sus derivadas en los puntos donde se unen, esto es, en los puntos en donde se colocan los contrapesos. En su forma más simple, el spline matemático es continuo y tiene primera y segunda derivada continua. Normalmente, sin embargo, tiene una discontinuidad de salto en la tercera derivada, lo cual corresponde, en las tiras para dibujar, a un cambio continuo en la curvatura y a un salto en la rapidez de cambio, en la posición de los contrapesos. Para muchas aplicaciones importantes, este modelo matemático es bastante bueno [23]. En la práctica, el dibujante no coloca los contrapesos en los puntos especificados por los que debe pasar la curva a trazar. Sin embargo, cuando se usa el análogo matemático, es común tomar a los puntos especificados para interpolar, exactamente igual a los puntos de unión.

A partir de estas ideas, el concepto de spline se ha generalizado en diferentes direcciones, en particular el uso de operadores diferenciales permite el estudio de los splines trigonométricos y los llamados splines en tensión, así como los splines de grado mayor. Aunque la mayoría de estos avances se han

logrado gracias a la herramienta que se dispone del Análisis Funcional, aplicado a Espacios de Hilbert [22], en este capítulo se tratarán solamente aspectos elementales de los splines cúbicos.

#### IV.2.- DEFINICIONN DE SPLINES DE TERCER GRADO

En muchos problemas cuya solución es difícil determinar en forma analítica, como es nuestro caso, se recurren a métodos numéricos para aproximar las soluciones, escogiendo los elementos aproximantes con ciertas propiedades que permitan su manejo. Como en el problema que se va a atacar la solución es una función, los elementos aproximantes son funciones que se conocen como splines y que se definirán a continuación.

Sea  $I = [a, b]$  un intervalo sobre la recta real y

$$\mathcal{P} = \{ a=x_1, x_2, x_3, \dots, x_{N-1}, x_N=b \}$$

una partición de dicho intervalo. Denotaremos por

$$I_i = [x_i, x_{i+1}]; \quad i = 1, 2, 3, \dots, N - 1.$$

a los subintervalos en que queda dividido  $I$ , mediante la partición. Un spline polinomial de tercer grado, que también se conoce simplemente como spline cúbico, es una función

$$\Delta_3: [a, b] \longrightarrow \mathbb{R}$$

con  $\alpha_3 \in C^2[a,b]$ , es decir, pertenece al conjunto de las funciones con segunda derivada continua y tal que en cada subintervalo  $I_i$  es un polinomio de tercer grado, esto es

$$\alpha_3|_{I_i} = P_i \quad i = 1, 2, \dots, n-1. \quad (4.4)$$

donde  $\text{grad}(P_i) \leq 3$ .

Debido a que las expresiones para el spline pueden cambiar, como polinomio cúbico en cada subintervalo, las condiciones de continuidad se escriben mediante límites laterales

$$\lim_{x \rightarrow x_i^-} \alpha_3(x) = \lim_{x \rightarrow x_i^+} \alpha_3(x) \quad (4.5)$$

$$\lim_{x \rightarrow x_i^-} \alpha_3'(x) = \lim_{x \rightarrow x_i^+} \alpha_3'(x) \quad (4.6)$$

$$\lim_{x \rightarrow x_i^-} \alpha_3''(x) = \lim_{x \rightarrow x_i^+} \alpha_3''(x) \quad (4.7)$$

para  $i = 2, 3, \dots, N-1$ . Obsérvese que en los puntos  $x_1$  y  $x_N$  no son aplicables estas expresiones debido a que estos son los extremos del intervalo  $I$ .

Al Reescribir estas expresiones de acuerdo a (4), tomamos en consideración que  $P_i$  es un polinomio cúbico. De esta manera las ecuaciones anteriores se transforman en

$$P_i (x_{i+1}) = P_{i+1} (x_{i+1}); \quad (4.8)$$

$$P'_i (x_{i+1}) = P'_{i+1} (x_{i+1}); \quad (4.9)$$

$$P''_i (x_{i+1}) = P''_{i+1} (x_{i+1}); \quad (4.10)$$

con  $i$  variando desde 1 hasta  $N-1$ .

Las propiedades anteriores serán de gran ayuda para el método numérico que se persigue, ya que como se verá mas adelante, al aproximar el perfil de la cavidad por las funciones definidas, tambien se obtendrán aproximaciones a la primera y segunda derivada. A continuación se enunciarán y se demostrarán algunas propiedades relevantes de esta funciones, concernientes a nuestro problema.

#### IV.3.-EL ESPACIO VECTORIAL $\mathcal{S}_3$ .

Generalmente, las funciones de aproximación usados en los métodos numéricos, se requiere que en conjunto, tengan propiedades adecuadas para su manejo de manera eficiente. Una de estas propiedades, es que al conjunto se le pueda dar una estructura de espacio vectorial, lo que permite hacer un análisis del conjunto con las herramientas ya conocidas de espacios de funciones [22]. Esto pasa precisamente con las funciones definidas como se verá a continuación.

Si denotamos por  $\mathcal{S}_3$  al conjunto de splines cúbicos,



junto con las operaciones de suma de funciones y la multiplicación por un escalar, como usualmente se definen, es decir

$$(f_1 + f_2)(x) = f_1(x) + f_2(x)$$

$$(\alpha f)(x) = \alpha f(x)$$

este forma un espacio vectorial [25].

El espacio vectorial  $\mathcal{S}_3$ , como puede verse fácilmente, de las siguientes consideraciones, es de dimensión mayor que el espacio de polinomios de grado menor o igual a 3, ya que cualquier elemento de este último satisface las condiciones que definen un spline. Además, se pueden construir splines cúbicos que no son necesariamente polinomios. De hecho, la dimensión de este espacio es  $N+2$ , lo cual se obtendrá durante el desarrollo de la sección 4, donde al tratar de determinar un elemento único de  $\mathcal{S}_3$  se bosquejará cómo determinar una base y el mismo desarrollo indicará de cuántos elementos consta dicha base.

#### IV.4.-DETERMINACION DEL SPLINE DE INTERPOLACION.

En esta sección se dará el procedimiento para determinar el spline cúbico que cumple con las condiciones apropiadas a nuestro problema. El desarrollo se basa en una técnica de aproximación a una función que posee cierto grado de suavidad, pero cuyo manejo numérico no resulta muy conveniente o cuando sólo se conocen algunos valores de la función en un número determinado

de puntos. En nuestra situación, vamos a aproximar los valores de una función de dos variables, en donde discretizamos primero con respecto a la variable  $t$  y luego, usando los splines cúbicos aproximamos en la variable  $r$ . El método de aproximación que se aplicará es el basado en la noción de interpolación, que se discute a continuación.

Dada una función  $f$ , el problema de interpolación consiste en determinar una función  $g$  elemento de algún conjunto previamente establecido, tal que su valor en algunos puntos coincida con los de  $f$ . Existen algunos casos en que se tienen que satisfacer condiciones adicionales, como es el nuestro, para determinar de manera única el elemento aproximante.

Empezaremos primero con el problema de determinar el spline polinomial cúbico que satisfic la siguiente condición de interpolación:

$$g_3(x_i) = f_i ; \quad i = 1, 2, \dots, N-1. \quad (4.11)$$

donde  $(x_i, f_i)$  es un conjunto de  $N$  datos por donde deseamos que pase nuestro spline.

Supondremos, por el momento, que conocemos la segunda derivada del spline en los nodos, esto es, en los puntos  $x_i$ . Denotaremos estos valores por  $z_i$ , con  $i = 1, 2, \dots, N-1$ . Consideremos ahora, qué pasa en cada subintervalo  $I_i$ ;  $i = 1, 2, \dots, N-1$ . Como en cada uno de estos intervalos el spline se reduce a un polinomio cúbico; su segunda derivada es una recta que se

puede escribir como

$$P_i'(x) = \frac{Z_{i+1}}{h_i} (x - x_i) + \frac{Z_i}{h_i} (x_{i+1} - x) \quad (4.12)$$

donde  $h_i = x_{i+1} - x_i$ , para  $i = 1, 2, \dots, N-1$ . Evidentemente, se cumple que  $P_i'(x_i) = Z_i$  y  $P_i'(x_{i+1}) = Z_{i+1}$ . Esta forma de trabajar nos permite asegurar que la segunda derivada es continua, aunque no conozcamos los valores de  $Z_i$ , porque en los extremos de cada uno de los subintervalos los segmentos de recta tanto del lado derecho  $P_{i+1}'$  como del lado izquierdo  $P_i'$  pasan por el mismo punto  $(x_{i+1}, Z_{i+1})$ .

Integrando  $P_i'$  dos veces, tenemos que  $P_i$  toma la siguiente forma

$$P_i(x) = \frac{Z_{i+1}}{6 h_i} (x - x_i)^3 + \frac{Z_i}{6 h_i} (x_{i+1} - x)^3 + c_i' x + d_i' \quad \dots(4.13)$$

donde  $c_i'$  y  $d_i'$  las constantes de integración. Como la suma de los dos últimos términos de la expresión anterior es una recta, esta se puede escribir como combinación lineal de  $(x - x_i)/h_i$  y de  $(x_{i+1} - x)/h_i$ . De esta manera, (13) queda como

$$\begin{aligned}
 P_i(x) = & \frac{Z_{i+1}}{6 h_i} (x - x_i)^3 + \frac{Z_i}{6 h_i} (x_{i+1} - x)^3 + \frac{c_i}{h_i} (x - x_i) \\
 & + \frac{d_i}{h_i} (x_{i+1} - x) \quad (4.14)
 \end{aligned}$$

Hasta este punto, sólo podemos asegurar la continuidad de la segunda derivada. A continuación impondremos las condiciones para que  $\phi_3$  sea continua.

De la misma manera que con la segunda derivada, pedimos que la función  $\phi_3$  pase por los puntos dados por (11), con la diferencia de que ahora estos puntos sí son conocidos. Usando los polinomios cúbicos  $P_i$ , esa ecuación se transforma como sigue

$$P_i(x_i) = f_i, \quad P_i(x_{i+1}) = f_{i+1}; \quad i = 1, 2, \dots, N-1.$$

Evaluando (14) en  $x_i$  y en  $x_{i+1}$  resulta

$$\frac{Z_i}{6} h_i^2 + d_i = f_i, \quad \frac{Z_{i+1}}{6} h_i^2 + c_i = f_{i+1} \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

de donde nos queda

$$d_i = f_i - \frac{Z_i}{6} h_i^2, \quad c_i = f_{i+1} - \frac{Z_{i+1}}{6}$$

Sustituyendo en (14), resulta

$$\begin{aligned}
 P_i(x) = & \frac{z_{i+1}}{6 h_i} \left[ (x - x_i)^3 - (x - x_i) h_i^2 \right] + \\
 & \frac{z_i}{6 h_i} \left[ (x_{i+1} - x)^3 - (x_{i+1} - x) h_i^2 \right] + \frac{f_{i+1}}{h_i} (x - x_i) + \\
 & \frac{f_i}{h_i} (x_{i+1} - x) \qquad \qquad \qquad (4.15)
 \end{aligned}$$

De esta manera, tenemos una expresión que es continua y tiene segunda derivada continua. Resta por dar las condiciones para la continuidad de la primera derivada, esto es

$$P'_i(x_{i+1}) = P'_{i+1}(x_{i+1}); \qquad i = 1, 2, \dots, N-1 \qquad (4.16)$$

Para ello, derivamos (15), quedandonos

$$P'_i(x) = \frac{z_{i+1}}{6 h_i} \left[ 3(x - x_i)^2 - h_i^2 \right] - \frac{z_i}{6 h_i} \left[ 3(x_{i+1} - x)^2 - h_i^2 \right] +$$

$$\frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} \quad (4.17)$$

Para aplicar (16), el miembro izquierdo resulta simplemente de calcular  $P_i$  en  $x_i$ . El miembro derecho se obtendrá evaluando  $P_i$  en  $x_{i+1}$  y después haciendo el cambio de  $i$  por  $i-1$ . Así, la continuidad en la primera derivada da el resultado

$$\frac{z_i}{3} h_i + \frac{z_{i+1}}{6} h_{i-1} + \frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}} = -\frac{z_{i+1}}{6} h_i - \frac{z_i}{6} h_i + \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i}$$

para  $i = 2, 3, \dots, N-1$ . Reordenando los términos de la expresión anterior nos queda finalmente

$$h_{i-1} z_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i) z_i + h_i z_{i+1} = 6 \left( \Delta f_i - \Delta f_{i-1} \right) \quad (4.18)$$

con  $\Delta f_i = (f_{i+1} - f_i)/h_i$  para  $i = 2, 3, \dots, N-1$ . Este es un conjunto de  $N-2$  ecuaciones en las incógnitas  $z_1, z_2, \dots, z_N$ ; las  $z_i$  que originalmente suponíamos conocidas.

En esta parte es conveniente hablar de la dimensión del espacio  $\mathcal{P}_3$ . Como se puede ver del desarrollo anterior, al imponer las condiciones de continuidad y de interpolación se obtiene un conjunto de sólo  $N-2$  ecuaciones, cuando que las incógnitas son  $N$ .

Esto nos dice que necesitamos dos condiciones mas para poder determinar univocamente el elemento del espacio, que junto con las  $N$  de la ecuación (11), da un total de  $N+2$ . Por lo tanto, si para determinar un elemento único de un espacio vectorial necesitamos  $N+2$  condiciones, la dimensión del espacio es precisamente  $N+2$ , como se afirmó en la sección anterior.

Para la determinación de todas las constantes usaremos las condiciones (2.19) y (2.23), las cuales nos dan la primera derivada en los extremos del intervalo  $[a,b]$ , o sea

$$P_1(x_1) = \tan(\theta_0) = 0 \quad (4.19)$$

$$P_{N-1}(x_N) = \tan(\pi - \theta_{tip}) = \tan(110^\circ) \quad (4.20)$$

Aplicando estas relaciones y ordenando los términos nos quedan las dos siguientes ecuaciones

$$2 h_1 z_1 + h_1 z_2 = 6 \Delta f_1 - 6 \tan(\theta_0) \quad (4.21)$$

$$h_{N-1} z_{N-1} + 2 h_{N-1} z_N = 6 \tan(110^\circ) - 6 \Delta f_{N-1} \quad (4.22)$$

Las ecuaciones (18), (21) y (22) se pueden escribir en





puede observar, esta es una matriz cuyos elementos diferentes de cero se encuentran sobre la diagonal principal y las dos diagonales adyacentes. Por esta razón se dice que es una matriz tridiagonal [23]. También se puede ver que la matriz es simétrica [23], esto es, que el elemento  $a_{ij}$  es igual al elemento  $a_{ji}$ . Se tiene, además, otra propiedad de gran importancia, que nos dice que la matriz es no singular [23], y es que A es diagonal dominante, esto es, que en cada renglón el valor absoluto del elemento en la diagonal es mayor que la suma de los valores absolutos de los demás elementos.

El sistema resultante se resuelve fácilmente usando eliminación Gaussiana sin pivoteo [25]. De esta manera, una vez calculados los valores de  $Z_i$ , al sustituir en (15) tenemos el spline buscado que satisface la condición de interpolación (11) y las condiciones de frontera (2.19) y (2.23).

#### IV.5.-EXISTENCIA Y UNICIDAD DEL SPLINE.

La existencia y unicidad del spline cúbico planteado en la sección anterior, se reduce a una aplicación del Teorema de Gershgorin [23] que establece

Dada una matriz A de n por n, si  $\sigma(A)$  denota el espectro de A, esto es, el conjunto

$$\sigma(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \exists x \neq 0 \ni Ax = \lambda x\}$$

entonces  $\sigma(A)$  es un subconjunto de la unión de  $\mathcal{E}_i$  para  $i = 1, \dots, n$  y

$$\mathcal{E}_i = \{z \in \mathbb{C} \mid |z - a_{ii}| < \sum_{j \neq i}^n |a_{ij}|\}$$

Este resultado nos permite deducir que cualquier matriz cuya diagonal principal es dominante ( $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$ ), como la matriz A de la sección anterior, es no singular ya que entre sus valores propios no se puede hallar el cero. Por lo tanto, el sistema de ecuaciones algebraicas correspondiente tiene solución y esta solución es única. Así, resulta que el spline de interpolación, con las condiciones de frontera descritas, existe y es única.

#### IV.5.-PROPIEDADES ADICIONALES DE LOS SPLINES.

##### Propiedad de la Curvatura Mínima.

La siguiente propiedad del spline cúbico surge de su conexión íntima, desde su origen, con La Teoría de Vigas [23] y que consiste en que la integral del cuadrado de la segunda derivada, en el intervalo  $[a,b]$ , alcanza su mínimo cuando se calcula para el spline cúbico, en un conjunto de funciones. Debido a que esta integral es una buena medida del promedio de la curvatura en el intervalo, se le conoce como la Propiedad de la Curvatura Mínima [23].

(Propiedad de la Curvatura Mínima) Si  $g$  es una función en  $\mathcal{C}^2[a,b]$  que interpola a la función  $f$  en los puntos  $\{(x_1, f_1), (x_2, f_2), \dots, (x_N, f_N)\}$  y satisface las condiciones

de frontera

$$g'(x_1) = f'(x_1) \quad \text{y} \quad g'(x_n) = f'(x_n)$$

entonces

$$\int_{x_1}^{x_n} (\phi_3'')^2 dx \leq \int_{x_1}^{x_n} (g'')^2 dx$$

donde  $\phi_3$  es el spline que interpola a  $f$  en los mismos puntos y satisface las mismas condiciones de frontera.

De esta característica de los splines cúbicos resulta natural pensar en su uso para el problema que estamos resolviendo ya que sobre la superficie de la cavidad la diferencia en el potencial químico es proporcional a la curvatura y el resultado anterior nos dice que el spline cúbico minimiza el promedio de la curvatura.

Otro resultado importante que se debe mencionar en favor del uso de los splines cúbicos es el que se dá a continuación y que se refiere a la convergencia del spline a la función que se interpola, cuando la distancia entre los nodos se hace cada vez menor. Este resultado se enuncia dando estimaciones del error en potencias de la máxima separación entre los nodos.

(Convergencia del Spline Cúbico) [24] Si  $f \in C^2[a,b]$ , y  $\phi_3$  es el spline que satisface las mismas condiciones del

resultado anterior, entonces para cualquier  $x \in [a, b]$  se cumple

$$|f(x) - s(x)| \leq \frac{5}{384} h^4 M_4$$

$$|f'(x) - s'(x)| \leq \frac{1}{24} h^3 M_4$$

$$|f''(x) - s''(x)| \leq \frac{3}{8} h^2 M_4$$

donde  $M_4 = \max_{[a, b]} |f^{(4)}(x)|$  y  $h = \max_{i=1, 2, \dots, n-1} |x_{i+1} - x_i|$ .

Este resultado, quizá el más importante para el desarrollo, nos dice que el spline se puede usar para determinar la segunda derivada de la función original con un error de segundo orden en  $h$ . En otras palabras, nos dice que si la separación entre los puntos se hace cada vez más pequeña, el error cometido también se hace más pequeño.

En el siguiente capítulo se describirá con detalle el procedimiento que se sigue para resolver las ecuaciones obtenidas y la manera en que se aplican las condiciones de frontera para

tener un total de  $N + 2$  datos. La diferencia mas notable es que el movimiento del punto correspondiente a la punta de la cavidad es independiente del punto  $N-1$  y su desplazamiento sobre la frontera de grano se calcula de las condiciones en la punta de la cavidad.

## CAPITULO V

### RESULTADOS Y CONCLUSIONES

#### V.1.-PROCEDIMIENTO DE DISCRETIZACION.

El procedimiento para determinar la evolución del perfil, conforme transcurre el tiempo, se basa en las siguientes consideraciones.

Primero. Hacemos una discretización con respecto a la variable  $t$ , y suponiendo que conocemos la forma del perfil al tiempo  $t_j$ , queremos determinar el cambio que sufre durante el intervalo  $\Delta t_j = t_{j+1} - t_j$ , o sea su forma al tiempo  $t_{j+1}$ . Esto quiere decir que discretizamos primero con respecto al tiempo.

Segundo. Escogemos un conjunto discreto de puntos sobre el perfil al tiempo  $t_j$  y determinamos el spline cúbico que interpola esa forma en los puntos seleccionados, junto con las condiciones de frontera. Esta parte corresponde a la discretización espacial.

Tercero. Usando el spline cúbico, calculamos la curvatura en cada uno de los puntos de interpolación.

Cuarto. Interpolamos nuevamente mediante los spline cúbicos los valores de la curvatura, usando las condiciones de frontera correspondientes.

Quinto. Con la información anterior, determinamos las derivadas de la curvatura con respecto a la longitud de arco, lo que nos da las velocidades de cada uno de los puntos.

Sexto. Escogemos el intervalo de tiempo apropiado  $\Delta t$ , para evitar el comportamiento inestable del proceso, y determinamos la

nueva posición de los puntos.

El perfil inicial se tomó como un arco de circunferencia que cumple con las condiciones de frontera en el origen y en los extremos. De esta configuración inicial se escogieron ocho puntos de interpolación igualmente espaciados. El ángulo de capilaridad se tomó igual a  $70^\circ$  y  $\Sigma = 4.5$

## V.2.-DESCRIPCION DE LOS PROGRAMAS.

La subrutina PTOSINI, calcula los puntos iniciales, sobre el perfil circular, normalizando las dimensiones de manera que el radio inicial de la cavidad sea igual a la unidad. Una vez que se tienen estos puntos, junto con las condiciones de frontera, la subrutina ECUACIONES, calcula el sistema de ecuaciones tridiagonal para determinar el spline de interpolación, y con TRI se encuentra la solución. Las condiciones de frontera de esta etapa están dadas por las ecuaciones (3.33) y (3.34).

Teniendo el spline, la curvatura en cada punto se obtiene de la expresión

$$\kappa(x, t) = \frac{-u_{xx}(x, t)}{\left(1 + u_x^2(x, t)\right)^{3/2}} \quad (4.1)$$

en que el signo negativo se usa para respetar la convención hecha de que superficies cóncavas poseen curvatura negativa. En la subrutina CURVATURA, esta expresión se usa para calcular la curvatura  $\kappa_i$ , en los puntos de interpolación. Como se puede

observar de la ecuación anterior, es necesario conocer la primera y la segunda derivada en esos puntos, estas se aproximan por las correspondientes del spline como se indica a continuación.

Usando las ecuaciones (4.17) y (4.12), calculamos el valor de  $P_i'(x_i)$  y de  $P_i''(x_i)$  para  $i = 1, 2, \dots, N-1$ , quedandonos los siguientes resultados

$$P_i'(x_i) = -\frac{Z_{i+1}}{6} h_i - \frac{Z_i}{3} h_i + \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} \quad (4.2)$$

$$P_i''(x_i) = Z_i; \quad i = 1, 2, \dots, N-1. \quad (4.3)$$

Sustituyendo estos valores en (1), tenemos  $\kappa_i$ . El valor de la curvatura en el último punto  $x_N$ , se encuentra evaluando  $P_{N-1}'(x_N)$  y  $P_{N-1}''(x_N)$  de las mismas fórmulas, y resultan

$$P_{N-1}'(x_N) = \frac{Z_N}{3} h_{N-1} + \frac{Z_{N-1}}{6} h_{N-1} + \frac{f_N - f_{N-1}}{h_{N-1}} \quad (4.4)$$

$$P_{N-1}''(x_N) = Z_N \quad (4.5)$$

Teniendo resuelta la primera parte, procedemos a abordar la siguiente, que consiste en interpolar la curvatura en los mismos puntos. Esencialmente, el desarrollo se vuelve a repetir, excepto que solo cambia la condición de frontera en el punto  $x_N$ , en donde la derivada de la curvatura viene dada por la ecuación (2.38) y  $\kappa_{tip}$  se sustituye por  $\kappa_N$ . Recurriendo nuevamente a



ECUACIONES y a TRI, se determina el spline que interpola los valores de la curvatura.

Finalmente, con el spline de interpolación de la curvatura, se procede a calcular la velocidad con que se mueven cada uno de los puntos sobre la superficie de la cavidad, dada por la expresión (2.31). Sin embargo, como en esta ecuación la segunda derivada es con respecto a la longitud de arco, se tiene que transformar en función de la variable  $x$ . Para ello usamos la regla de la cadena de la siguiente manera

$$v = \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{\partial \kappa}{\partial s} \right) = \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{\partial \kappa}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s} \right).$$

Como la longitud de arco está dada por

$$s(x, t) = \int_0^x \sqrt{1 + u_x^2(\xi, t)} \, d\xi \quad (4.6)$$

nos queda

$$\frac{\partial x}{\partial s} = \frac{1}{\sqrt{1 + u_x^2}} \quad (4.7)$$

por tanto, la expresión para la velocidad se transforma en

$$v = \frac{\partial}{\partial s} \left\{ \frac{\partial \kappa / \partial x}{\sqrt{1 + u_x^2}} \right\}$$

volviendo a aplicar la regla de la cadena y el resultado (7),

$$v = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial \kappa / \partial x}{\sqrt{1 + u_x^2}} \right\} \frac{1}{\sqrt{1 + u_x^2}}$$

Después de efectuar las derivadas indicadas y agrupar términos, la velocidad resulta

$$v = \frac{\partial^2 \kappa / \partial x^2}{1 + (u_x)^2} + \kappa (\partial \kappa / \partial x) \frac{u_x}{\sqrt{1 + (u_x)^2}}, \quad (4.8)$$

Mediante las fórmulas anteriores, en la subrutina VEL calculamos la primera y segunda derivada de  $\kappa$ , y con los valores de  $u$  y  $u_x$  que ya se tienen, determinamos la velocidad normal  $v_i$  en cada punto  $x_i$  de la superficie de la cavidad. Una vez que se tienen las velocidades, se determina el cambio

$$\Delta x_i = x_i(t_{j+1}) - x_i(t_j) \quad (4.9)$$

$$\Delta z_i = z_i(t_{j+1}) - z_i(t_j) \quad (4.10)$$

en la posición de los puntos durante el intervalo de tiempo  $\Delta t_j$ , mediante las relaciones

$$\Delta x_i = v_i \Delta t_j \cos(\theta_i), \quad (4.11)$$

$$\Delta z_i = v_i \Delta t_j \sin(\theta_i); \quad i = 1, 2, \dots, N-1. \quad (4.12)$$

Del conjunto de ecuaciones (9)-(11), resulta que el movimiento de los puntos, durante el intervalo  $\Delta t_j$ , queda como

$$x_i(t_{j+1}) = x_i(t_j) + v_i \Delta t_j \cos(\theta_i) \quad (4.13)$$

$$z_i(t_{j+1}) = z_i(t_j) + v_i \Delta t_j \sin(\theta_i) \quad (4.14)$$

con  $i = 1, \dots, N-1$ . La subrutina PUNTOS, basada en las relaciones descritas, calcula las nuevas coordenadas, después de que la subrutina TIEMPO ha calculado el intervalo de tiempo  $\Delta t_j$ .

### V.3.-MOVIMIENTO DE LA PUNTA DE LA CAVIDAD.

El punto en el origen obedece las ecuaciones de movimiento (13) y (14) ya que es un punto que se halla siempre en la superficie de la cavidad.

El último punto, cuando  $i = N$ , es el punto que se encuentra siempre en la punta de la cavidad, por tanto no se moverá en la dirección normal, sino sobre el eje horizontal. Para determinar la ecuación de movimiento de este punto, partimos de la

condición de frontera

$$u(x_{tip}(t), t) = 0. \quad (4.15)$$

donde  $x_{tip}(t)$  es la posición de la punta de la cavidad al tiempo  $t$ . Derivando (15), con respecto al tiempo, nos queda

$$u_x(x_{tip}(t), t) x'_{tip}(t) + u_t(x_{tip}(t), t) = 0 \quad \dots(4.16)$$

Como el ángulo de capilaridad es constante, tenemos

$$u_x(x_{tip}(t), t) = \tan(\pi - \theta_{tip}) = -\tan(\theta_{tip})$$

en tanto que, de la ecuación (2.30) se tiene

$$u_t = v \sqrt{1 + u_x^2}$$

Sustituyendo estas dos últimas expresiones en (12) nos queda

$$x'_{tip}(t) = v_{tip} / \sin(\theta_{tip}) \quad (4.17)$$

Entonces, el incremento de la posición del punto  $x_N$

$$\Delta x_N = x_N(t_{j+1}) - x_N(t_j) \quad (4.18)$$

viene dada por

$$\Delta x_N = v_N \Delta t / \text{sen}(\theta_{t_{ip}}), \quad (4.19)$$

mientras que

$$\Delta z_N = 0. \quad (4.20)$$

de acuerdo a la condición

$$u(x_{t_{ip}}(t), t) = 0 \quad (4.21)$$

Así, nos queda que las nuevas coordenadas del último punto se calculan de acuerdo a

$$x_N(t_{j+1}) = x_N(t_j) + v_N / \text{sen}(\theta_{t_{ip}}) \quad (4.22)$$

$$z_N(t_{j+1}) = z_N(t_j) \quad (4.23)$$

en que  $v_N$  representa la velocidad con que se movería el punto si se le permitiera el movimiento normal al perfil. La ecuación (22) es semejante a la usada por G. M. PHARR - W. D. NIX [18] y por L. MARTINEZ-W. D. NIX [20], con la diferencia de que en lugar de  $v_N$  sustituyen  $v_{N-1}$ . Esta observación hace ver la equivalencia entre nuestro problema y el resuelto por los anteriores autores.

#### V.4.-RESULTADOS.

En las figuras 12 y 13, se muestran los resultados que se obtuvieron al aplicar el método descrito, mediante el programa CAVIDADES, en lenguaje FORTRAN77, cuyo listado se incluye en un apéndice al final de este capítulo. En la parte superior de la figura 12, se presenta la forma de la cavidad inicial, y en la inferior, la forma que tiene cuando ha crecido al doble de su tamaño original, para un valor de la razón de la difusividad igual a 0.1. Como se puede observar, la concordancia con el modelo de HULL y RIMMER [8], es bastante aceptable, a este tamaño se obtiene para un tiempo, en unidades de

$$t_g = k T A_0^4 / D_s \delta_s \gamma_s f$$

como se describió en el capítulo II, igual a 9.1217. Para hacer las gráficas se usaron los puntos dados en la tabla 1, obtenidos directamente de CAVIDADES. Por otro lado, en la figura 13, tenemos la evolución de la misma cavidad inicial, pero para un valor de  $f = 1.0$ . En estas condiciones, resulta que la forma de la cavidad, cuando ha crecido al doble del tamaño inicial, se aleja notablemente del modelo predicho por HULL y RIMMER [8]. Esta configuración se alcanza para un tiempo, en unidades de  $t_g$ , igual a 1.79789, lo cual nos indica que la cavidad tiende a elongarse en la dirección de la frontera de grano, adquiriendo la apariencia de la punta de grieta que se presentó en la figura 2 del capítulo I. La gráfica se obtuvo de los valores calculados por CAVIDADES y que

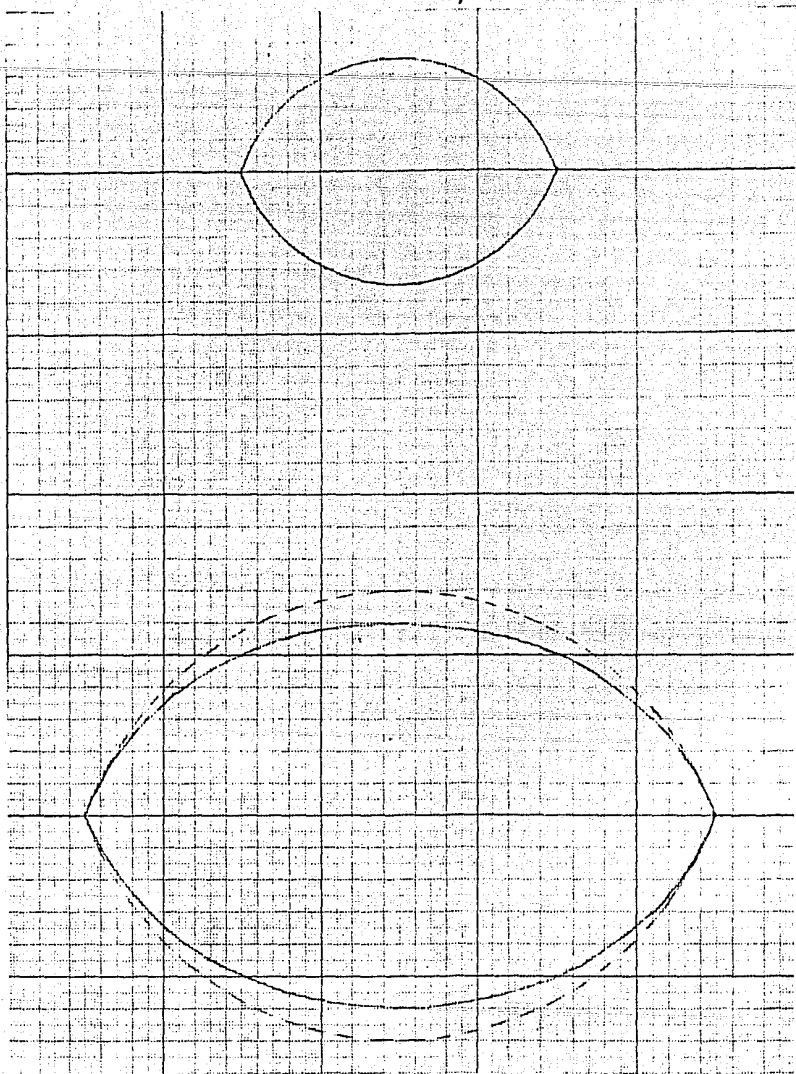


Figura 12

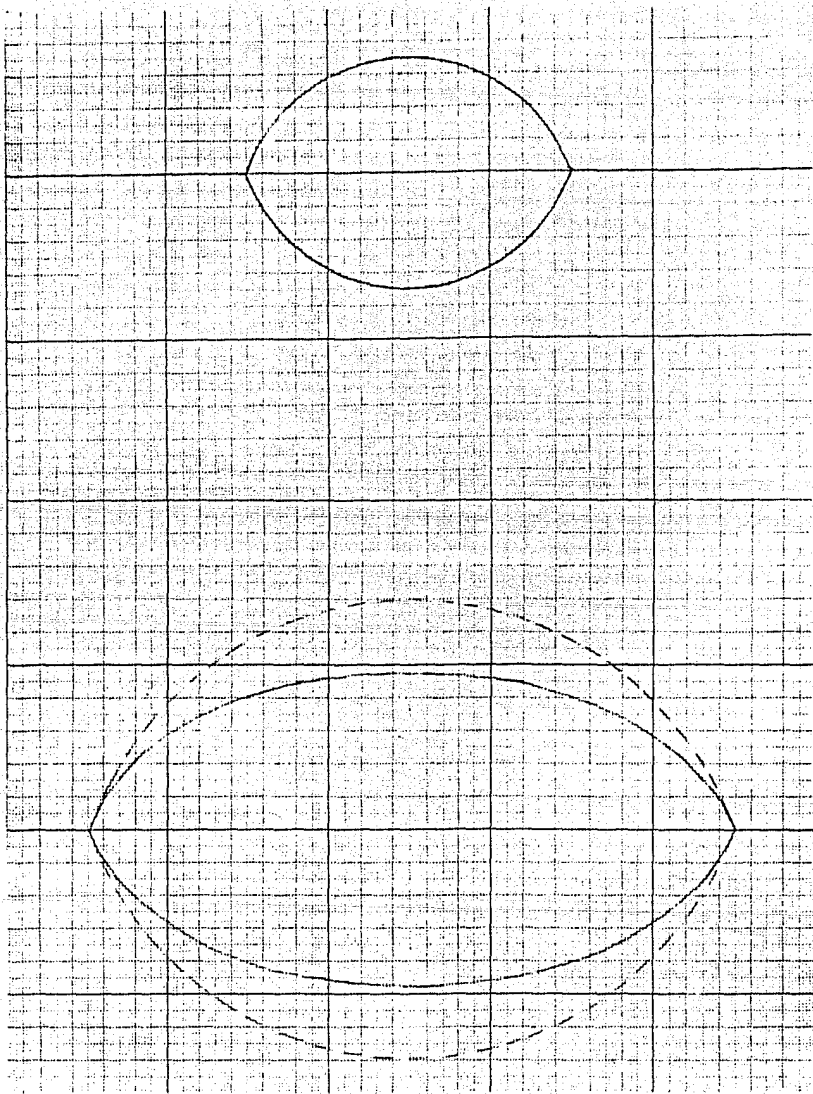


Figura 13.





t = 0		t = 1.7989	
x	y	x	y
.0000	.7000	.0000	.3450
.0500	.6999	.0005	.3447
.1000	.6998	.0010	.3443
.1500	.6997	.0015	.3439
.2000	.6996	.0020	.3435
.2500	.6995	.0025	.3431
.3000	.6994	.0030	.3427
.3500	.6993	.0035	.3423
.4000	.6992	.0040	.3419
.4500	.6991	.0045	.3415
.5000	.6990	.0050	.3411
.5500	.6989	.0055	.3407
.6000	.6988	.0060	.3403
.6500	.6987	.0065	.3399
.7000	.6986	.0070	.3395
.7500	.6985	.0075	.3391
.8000	.6984	.0080	.3387
.8500	.6983	.0085	.3383
.9000	.6982	.0090	.3379
.9500	.6981	.0095	.3375
1.0000	.6980	.0100	.3371

Tabla 2.

presenta una gran inestabilidad, lo que ocasiona que los métodos numéricos implementados requieran un estudio preliminar para determinar las condiciones apropiadas de trabajo, ya que de lo contrario, los resultados que se encuentran no tienen sentido. En particular, se encuentra que los intervalos de tiempo en que avanza la cavidad tiene que ser muy pequeño, de alrededor de la centésima parte del tamaño inicial de la cavidad.

La revisión de la Teoría de Splines condujo al estudio de la conexión íntima que esta tiene con la Teoría de Vigas, que a su vez dio lugar a la idea de aplicarlos a los procesos difusivos. Para esto fue necesario revisar la bibliografía correspondiente,

entre los aspectos que se revelaron, es la aplicación a los problemas con frontera móvil, los que son muy frecuentes en problemas de difusión, en especial en el Problema de Stefan [ ].

Para la aplicación de los splines al problema, se ensayaron diferente número de puntos de la cavidad inicial con el fin de obtener buenos resultados en la curvatura. La conclusión fue que con alrededor de seis puntos los resultados eran aceptables. Posteriormente, conforme la cavidad crecía, se encontró necesario incluir puntos adicionales en el extremo móvil, dependiendo de la distancia de separación entre el punto móvil y el anterior. Se probaron diferentes intervalos de tiempo en que avanza la punta de la cavidad, encontrándose que conforme la razón de la difusividad aumenta, el intervalo de tiempo en que avanza la cavidad puede ser mayor sin conducir a problemas de inestabilidad.

Todo lo anterior demuestra que el uso de splines de tercer grado representa una buena alternativa para el estudio posterior de los problemas de difusión, sobre todo porque la resolución de los sistemas de ecuaciones es sencilla y porque la aplicación de las condiciones de frontera resulta directa.

## APENDICE

```
C
C PROGRAMA PARA CALCULAR LA EVOLUCION DE CAVIDADES EN LA FRONTERA
C DE GRANO DE MATERIALES CON SGM = 4.5
```

```
DOUBLE PRECISION X(50),F(50),A(50),B(50),C(50),D(50),K(50)
DOUBLE PRECISION FP1,FPN,DK1,DKN,DS,DDS,FI,TETIP,T,S,VELMAX
DOUBLE PRECISION DF(50),DDF(50),V(50),DIF,SGM,TIME,DT
DOUBLE PRECISION RA,RS,RX,RY,RT,W
INTEGER N,CONTIT,NPTS,INTRV1,INTRV2
```

```
C ASIGNA VALORES DE TETIP, DIF, SGM Y N
```

```
FI=0.141592653
DIF=100.00
SGM=4.500
RA=1.00
TIME=0.00
```

```
OPEN(100,FILE='A:RESULTS.DAT',STATUS='NEW')
WRITE(*,*)'CUAL ES EL ANGULO DE CAPILARIDAD?'
READ(*,*) TETIP
TETIP=70.00
TETIP=TETIP*PI/180.00
WRITE(*,*)'CUANTOS PUNTOS INICIALES?'
READ(*,*) N
```

```
C CALCULO DE LA FORMA INICIAL DE LA CAVIDAD
```

```
CALL PTOSIN(N,X,F,TETIP,CONTIT,RX)
```

```
C CONDICIONES DE FRONTERA EN LA PRIMERA DERIVADA.
```

```
10 FP1=0.00
FPN=-DTAN(TETIP)
```

```
C DETERMINACION DE LAS ECUACIONES
```

```
CALL ECUACIONES(N,X,F,A,B,C,D,FP1,FPN)
```

```
C SOLUCION DEL SISTEMA TRIDIAGONAL
```

```
CALL TRI(N,A,B,C,D)
```

```
C DESPUES DE QUE LA PUNTA DE LA CAVIDAD HA AVANZADO UN ACIERTA
C DISTANCIA, LOS DATOS SE SALVAN EN UN ARCHIVO (RESULTS.DAT)
```

```
20 I=(RA-X(N))/0.20/45
RA=RA+0.100
WRITE(100,24) N,TIME
WRITE(*,*) N,TIME
25 FORMAT(A,'R=',I2,2X,'TIEMPO=',F10.4)
NPTS=NPTS+(X(N)-1
```

```
DO 30 I=1,NPTS
Y=X(N)*DBLE(I-1)/DBLE(NPTS-1)
CALL SPLL(N,X,F,B,T,S,DS,DDS)
WRITE(100,30) T,S,DS,DDS
WRITE(*,*) T,S,DS,DDS
30 FORMAT(A,'T=',F10.4,2X,'S=',F10.4,2X,'DS=',F10.4,
```

```
8 2X,'DDS=',F10.4)
30
```

```
C DESPUES DE QUE LA PUNTA DE LA CAVIDAD HA AVANZADO UN ACIERTA
```



A, M, P  
PR: PR

VARIABLE

R0, R1: VARIABLES PARA DIMENSIONAR LAS DIMENSIONES.  
SET: DIVISIONES DEL TABLERO DE TILES.

100 10  
DO WHILE (R0 <= 100) AND (R1 <= 100)  
R0 = R0 + 1  
R1 = R1 + 1  
END

10

DO WHILE (R0 <= 100) AND (R1 <= 100)  
R0 = R0 + 1  
R1 = R1 + 1  
DO WHILE (R2 <= 100) AND (R3 <= 100) AND (R4 <= 100) AND (R5 <= 100)  
R2 = R2 + 1  
R3 = R3 + 1  
R4 = R4 + 1  
R5 = R5 + 1  
END

VARIABLE

R0, R1, R2, R3, R4, R5: VARIABLES PARA DIMENSIONAR LAS DIMENSIONES.  
SET: DIVISIONES DEL TABLERO DE TILES.

VARIABLE

A, B, C, D: ELEMENTOS DE LA DIAGONAL INFERIOR,  
O LOS DE LA DIAGONAL PRINCIPAL, O LOS DE LA DIAGONAL SUPERIOR  
Y B LOS DE LAS ECUACIONES.

100 10  
DO WHILE (R0 <= 100) AND (R1 <= 100)  
R0 = R0 + 1  
R1 = R1 + 1  
DO WHILE (R2 <= 100) AND (R3 <= 100) AND (R4 <= 100) AND (R5 <= 100)  
R2 = R2 + 1  
R3 = R3 + 1  
R4 = R4 + 1  
R5 = R5 + 1  
END

10

DO WHILE (R0 <= 100) AND (R1 <= 100)  
R0 = R0 + 1  
R1 = R1 + 1  
DO WHILE (R2 <= 100) AND (R3 <= 100) AND (R4 <= 100) AND (R5 <= 100)  
R2 = R2 + 1  
R3 = R3 + 1  
R4 = R4 + 1  
R5 = R5 + 1  
END

VARIABLE

R0, R1, R2, R3, R4, R5: VARIABLES PARA DIMENSIONAR LAS DIMENSIONES.  
SET: DIVISIONES DEL TABLERO DE TILES.

VARIABLE

R0, R1: VARIABLES PARA DIMENSIONAR LAS DIMENSIONES.  
SET: DIVISIONES DEL TABLERO DE TILES.

VARIABLE

R0, R1: VARIABLES PARA DIMENSIONAR LAS DIMENSIONES.  
SET: DIVISIONES DEL TABLERO DE TILES.

01

1000

... DE PRIMERA Y

VARIABLE

... DE PRIMERA Y

VARIABLE

... DE SEGUNDA

VARIABLE

... DE TERCERA EL

... DE

... DE  
... DE  
... DE  
... DE  
... DE

... DE  
... DE

... DE  
... DE

... DE



11

$$X(1) = 1 - X(1) * 0.05$$

$$X(1) = 1 - 0.05 + 0.05 * X(1)$$

$$X(1) = 0.95 + 0.05 * X(1)$$

VARIABLE

NAME VALUE

1 0.95

VARIABLE

NAME VALUE

1 0.95

12  
13

NAME VALUE

1 0.95

2 0.9025

3 0.8574

4 0.8137

5 0.7713

6 0.7301

7 0.6900

8 0.6510

9 0.6131

10 0.5762

11 0.5403

12 0.5053

13 0.4712

14 0.4379

15 0.4054

16 0.3737

17 0.3427

18 0.3124

19 0.2827

20 0.2536

21 0.2251

22 0.1972

23 0.1700

24 0.1434

25 0.1174

26 0.0920

27 0.0672

28 0.0430

29 0.0194

30 0.0064

0.63.90

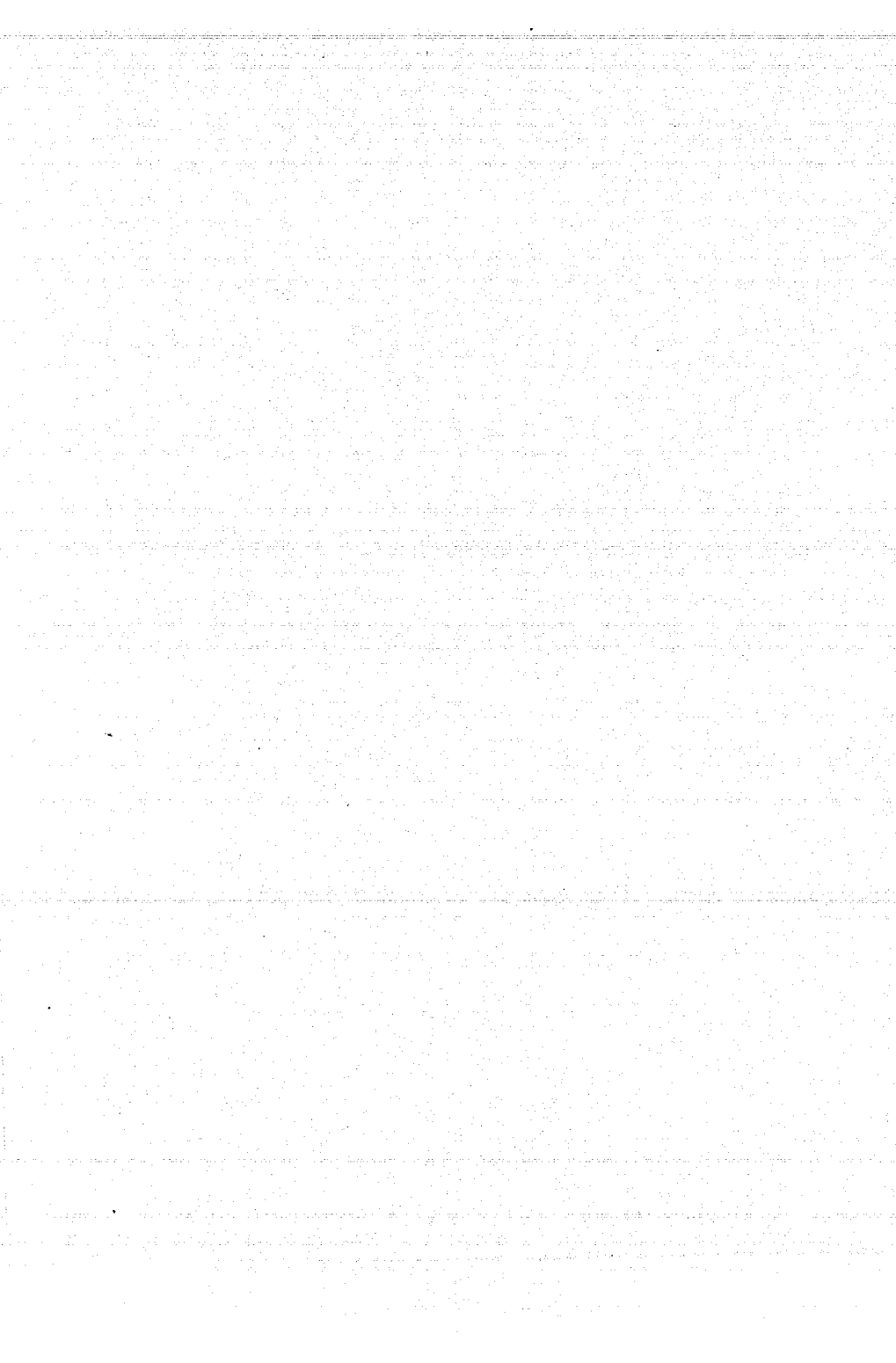
W. 11.11.11

1.1.11

1.1.11 (1) (2) (3) (4) (5) (6) (7) (8) (9) (10)

1.1.11 (1) (2) (3) (4) (5) (6) (7) (8) (9) (10)

1.1.11



## REFERENCIAS.

- 1.-L. MARTINEZ G. , TESIS DOCTORAL, UNAM, 1980.
- 2.-S. H. GOODS Y W. D. NIX, ACTA METALL., 1978, VOL. 26, P. 739.
- 3.-T. G. NIEH Y W. D. NIX, APARECERA EN ACTA METALL.
- 4.-T. G. NIEH, TESIS DOCTORAL, UNIVERSIDAD DE STANFORD, 1980.
- 5.-R. W. BALLUFFI Y L. L. SEIGLE, ACTA METALL., VOL. 5, P. 449, 1957.
- 6.-P. W. DAVIS Y R. DUTTON, ACTA METALL., 1966, VOL. 14, P. 1138.
- 7.-T. G. NIEH Y W. D. NIX, APARECERA EN ACTA METALL.
- 8.-S. H. GOODS Y W. D. NIX, ACTA METALL., 1978, VOL. 26, P. 753.
- 9.-M. V. SPEIGHT Y J. E. HARRIS, METAL SCI., 1967, VOL. 1, P. 83.
- 10.-R. RAJ Y M. F. ASHBY, ACTA METALL., 1975, VOL. 23, P. 653.
- 11.-J. WEERTMAN, SCRIPTA MMET., 1973, VOL. 7, P. 1129.
- 12.-R. W. BALLUFFI Y L. L. SEIGLE, ACTA METALL., 1957, VOL. 5, P. 449.
- 13.-C. HERRING, J. APPL. PHYS., 1950, VOL. 21, P. 437.
- 14.-M. YAMASAKI, J. JAP. INST. MET., 1968, VOL. 32, P. 403.
- 15.-F. DOBES, SCRIPTA MET., 1973, VOL. 7, P. 1231.
- 16.-T. J. CHUANG Y J. R. RICE, ACTA METALL., 1973, VOL. 21, P. 1625.
- 17.-C. HERRING, THE PHYSICS OF POWDER METALLURGY, CH. 8, W. D. KINGSTON, ED., MCGRAW HILL, NEW YORK NY, 1951.
- 18.-G. M. PHARR Y W. D. NIX, ACTA METALL., 1979, VOL. 27, P. 1615.

- 19.-T. J. CHUANG, K. T. KAGAWA, J. R. RICE Y L. B. SILLS, ACTA METALL., 1979, VOL. 27, P. 265.
- 20.-L. MARTINEZ Y W. D. NIX, METALL. TRANS. A, 1981, VOL. 13, P. 427.
- 21.-S. D. CONTE Y C. DE BOOR, ELEMENTARY NUMERICAL ANALYSIS, CH. 6, INTERNATIONAL STUDENT EDITION, MCGRAW HILL KOGAKUSHA, LTD., TOKYO, 1980.
- 22.-J. H. AHLBERG, E.N. NILSON Y J. L. WALSH, THE THEORY OF SPLINES AND THEIR APPLICATIONS, MATHEMATICS IN SCIENCE AND ENGINEERING, VOL. 38, RICHARD BELLMAN, UNIVERSITY OF SOUTHERN CALIFORNIA.
- 23.-G. E. FORSYTHE, A. MALCOLM Y C. B. MOLER, COMPUTED METHODS FOR MATHEMATICAL COMPUTATIONS, PRENTICE HALL INC., ENGLEWOOD CLIFFS, N. J., 1977.
- 24.-R. ALLEN, S. PRUESS Y L. SHAMPINE, FUNDAMENTALS OF NUMERICAL COMPUTING, UNIVERSIDAD DE NUEVO MEXICO, 1986.
- 25.-P. BARRERA Y E. CAMPUZANO, ALGEBRA LINEAL, UNIVERSIDAD DE MEXICO-FACULTAD DE CIENCIAS, 1981.
- 26.-B. S. BOKSHEIN, DIFUSION EN METALES, MIR-MOSCU, 1978.
- 27.-J. D. JACKSON, CLASSICAL ELECTRODYNAMICS, J. WILLEY, NEW YORK, 1975.
- 28.-J. E. MARSDEN Y A. J. TROMBA, CALCULO VECTORIAL, FONDO EDUCATIVO INTERAMERICANO, 1981.
- 29.-P. R. GARABEDIAN, PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS, J. WILLEY,

NEW YORK, 19864.

- 30.-E. A. CODDINGTON, INTRODUCCION A LAS ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS, CECSA, 1973.
- 31.-D. G. WILSON, A. D. SOLOMON Y P. T. BOGGS, MOVING BOUNDARY PROBLEMS, ACADEMIC PRESS, 1978.
- 32.-E. KREYZIG, INTRODUCTION TO DIFFERENTIAL GEOMETRY AND RIEMANNIAN GEOMETRY, TORONTO UNIVERSITY, 1968.