

Difusión de partículas - Actividad

Santiago Ruiz Piedrahita¹

¹Instituto de Física, U de A, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia.

Octubre 2023

Resumen

En el presente documento se encuentra las instrucciones de uso de la simulación de difusión de gases y además se muestra una actividad planteada que ayuda a explorar todas las funciones de la simulación y comprender mejor el fenómeno de la difusión de gases.

1. Introducción

1.1. Instrucciones de uso

A continuación se describen los elementos que componen la pantalla que se muestra en la interfaz de usuario para la simulación sobre difusión de gases, observando y entendiendo el papel de cada sección vista en la imagen completa dada en la figura (1).

La interfaz de usuario mostrada en la figura (1) consta principalmente de 4 secciones diferentes: a) Entorno de simulación donde se encuentran las partículas; b) Control donde se pueden variar todos los parámetros de la simulación; c) Visualización de datos y d) visualización de gráficas con el resto de datos. Veamos a detalle cada una de estas secciones:

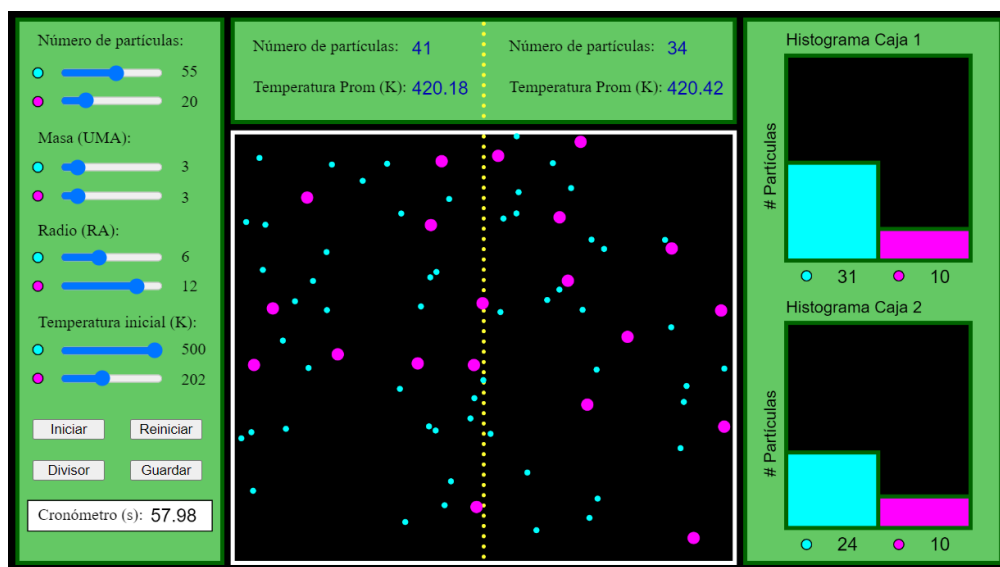


Figura 1: Pantalla principal de la simulación de difusión de gases

1.2. Entorno de simulación

En la figura (2) se puede observar un recuadro en el cual inicialmente se encuentran las partículas, esta se denomina como caja la cual esta delimitada por una línea blanca y las partículas vivirán ahí, rebotando entre ellas y contra las paredes de esta caja; al lado izquierdo estarán las partículas llamadas *azules* por su color y similarmente al lado derecho están las *magentas*. Además, se presenta una línea en la mitad de color amarillo, esta se llama divisor y podrá ser removida o puesta a voluntad por el usuario, lo cual será visto como línea continua si esta bloquea las partículas o línea a trazos si es una pared permeable dejando pasar las partículas.

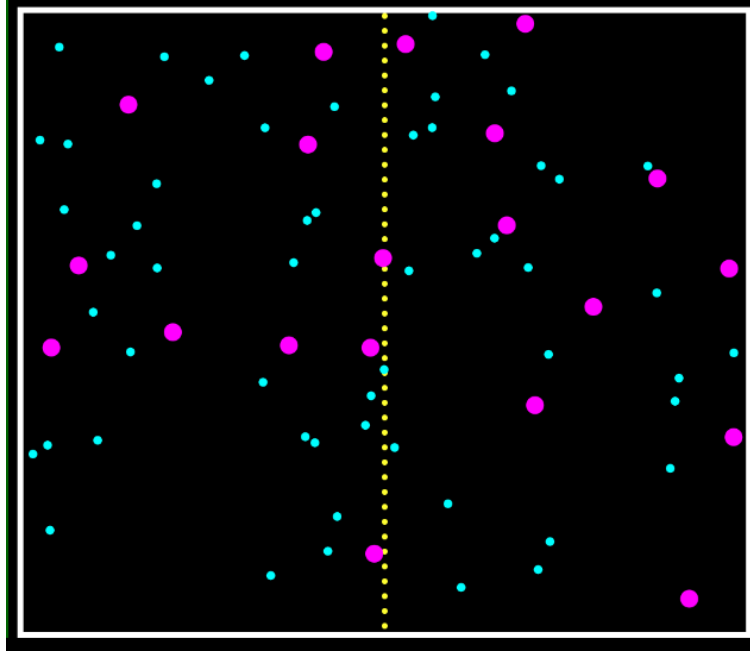


Figura 2: Pantalla del entorno de simulación de las partículas.

1.3. Control

En la figura (3.a) se puede observar un recuadro en el cual el usuario puede cambiar los diferentes parámetros iniciales de la simulación. Los 4 primeros parámetros serán modificados por medio de un *slider* o deslizador tanto para las partículas azules como las magentas, en orden tenemos: número de partículas (0 a 100 partículas), masa en unidades de masa atómica (1 a 20 U.M.A), radio en unidades de radio atómico (1 a 15 R.A.), y la temperatura inicial en Kelvin (10 a 500 K). Se cuentan además con 4 botones diferentes, los cuales constan de: *Iniciar* el cual permite iniciar y pausar la simulación, *Reiniciar* el cual permite reiniciar la simulación con las parámetros que se hayan configurado, *Divisor* el cual permite retirar y colocar la línea divisoria y *Guardar* el que permite guardar los datos de tiempo (Tiempo (s)), número de partículas en la parte izquierda (N1), número de partículas en la parte izquierda (N2), temperatura promedio en la parte izquierda (T1 (K)), temperatura promedio en la parte derecha (T2 (K)), número de partículas azules y magentas en el lado izquierdo respectivamente (N1Blue, N1Magenta), número de partículas azules y magentas en el lado derecho respectivamente (N2Blue, N2Magenta); cada una de estas columnas son guardadas en un archivo *.csv* de manera que el usuario pueda graficarlos, tales datos se pueden ver en la figura (5). Por último en la parte inferior de esta sección de control se tiene un cronometro en tiempo real que muestra el tiempo en segundos.

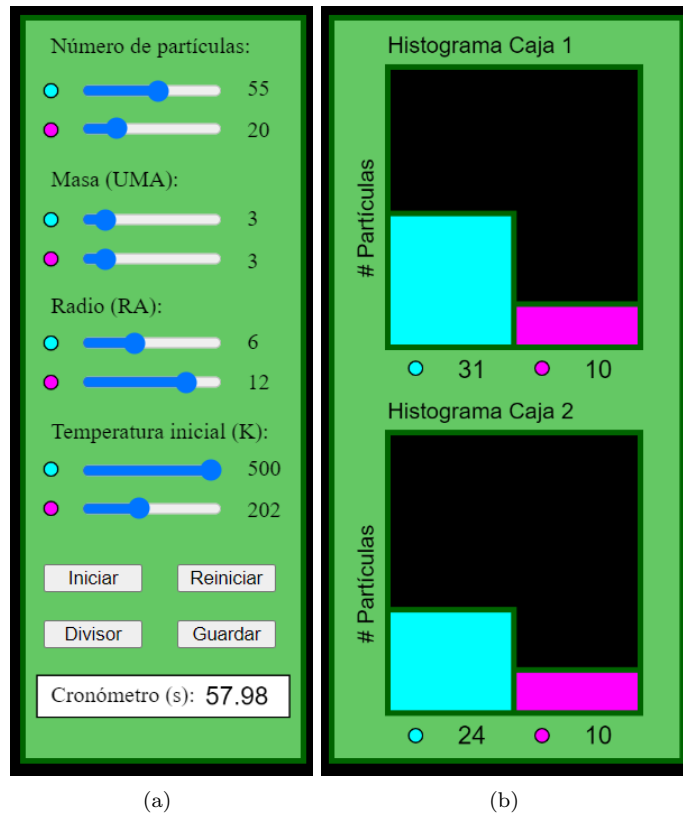


Figura 3: a) Pantalla del entorno de control de los parámetros, b) Pantalla del entorno de gráficas en tiempo real

1.4. Datos

En la figura (4) se puede observar principalmente dos valores diferentes a cada lado de la caja, en primer lugar el número total de partículas a lado y lado y en segundo lugar la temperatura promedio también a lado y lado.



Figura 4: Pantalla del entorno de datos en tiempo real.

1.5. Gráficas

En la figura (3.b) se puede observar las gráficas en tiempo real que se obtienen, donde la parte superior se muestra un histograma del número de partículas y a su vez los valores de las partículas azules y magentas en el lado izquierdo de la caja; y en la parte inferior de la figura se encuentra similarmente el histograma del número de partículas con sus respectivos valores, todo esto en tiempo real.

	Tiempo (s)	N1	N2	T1 (K)	T2 (K)	N1Blue	N1Magenta	N2Blue	N2Magenta
0	1	55	20	499.702566	202.868043	55	0	0	20
1	2	55	20	499.702566	202.868043	55	0	0	20
2	3	55	20	499.702566	202.868043	55	0	0	20
3	4	55	20	499.702566	202.868043	55	0	0	20
4	5	55	20	499.702566	202.868043	55	0	0	20
5	6	55	20	499.702566	202.868043	55	0	0	20
6	7	55	20	499.702566	202.868043	55	0	0	20
7	8	55	20	499.702566	202.868043	55	0	0	20
8	9	54	21	488.330996	246.244202	52	2	3	18
9	10	52	23	482.431261	280.633758	49	3	6	17

Figura 5: Ejemplo de una tabla con los datos extraídos.

2. Actividades propuestas

En esta sección se presentan actividades propuestas para explorar tanto la parte teórica como la parte de la simulación, se va a dividir en 3 diferentes subsecciones donde en la primera se pregunta por la parte conceptual, la segunda por la variación de los parámetros de la simulación y la última explora los datos arrojados.

2.1. Actividades conceptual

Para examinar los conceptos de manera efectiva, es esencial abordar algunas preguntas básicas que ayuden a distinguir claramente cada uno de los conceptos que estamos estudiando.

1. ¿Cuál es la definición de la difusión de gases?
2. ¿Qué factores influyen en la velocidad de difusión de los gases?
3. ¿Cuál es el propósito de la efusión en el contexto de la simulación?
4. ¿Cómo se relaciona la teoría cinética de los gases con el comportamiento de las partículas gaseosas?
5. ¿Qué características definen a un gas ideal en términos de sus partículas?
6. ¿Cómo se relaciona la temperatura con la energía cinética promedio de las partículas en un gas?
7. ¿Qué es la distribución de Maxwell-Boltzmann y cómo se relaciona con las velocidades moleculares en un gas?
8. ¿Cómo influye la diferencia de concentración en la velocidad de difusión de los gases?
9. ¿Por qué es importante comprender el movimiento aleatorio de las moléculas en un gas?
10. ¿Cuál es la relación entre el movimiento microscópico y el comportamiento macroscópico de los gases en la teoría cinética de los gases?

2.2. Actividades con la simulación

Para explorar la simulación y observar todos los diferentes parámetros que se pueden variar se plantea la siguiente actividad, en algunos puntos al final se menciona la palabra (*guardar*) esto se hace con el fin de guardar los datos y posteriormente con todos los archivos generados responder las preguntas de nuevo y hacer una comparación con las respuestas obtenidas inicialmente:

1. Primero es importante reconocer el entorno, así que primero corre la simulación pero sin variar los parámetros, menciona que observa. (guardar).
2. Con los parámetros que vienen por defecto, ¿es capaz de observar en que tiempo se logra obtener la misma cantidad de bolas azules a ambos lados de la caja?, ¿Es posible determinarlo para ambos tipos de partículas? (guardar).
3. Ahora cambiando los parámetros, duplica el número de partículas que quiera, ¿Qué cambios logra notar? (guardar).
4. Prueba a dejar una caja sin partículas, ¿Que nombre se le da a este fenómeno?, ¿Qué puede observar?, ¿Por qué la caja vacía le cambia la temperatura si no había partículas inicialmente en ella ?
5. Ahora pruebe a cambiar la diferencia entre el número de partículas aun más por ejemplo (10-80) ¿Qué nota? (guardar).
6. Ahora pruebe a cambiar las masas, (con un número de partículas igual a ambos lados), suba ambas masas a 10 U.A. ¿Nota alguna diferencia? (guardar).
7. con un número de partículas igual a ambos lados. Coloque las masas con diferencia de 1 U.A., luego de 2 U.A., y así sucesivamente ¿Sucede algo? (guardar).
8. con un número de partículas igual a ambos lados. Veamos como varían los radios. ¿Qué sucede si duplica el radio de una clase de partículas? (guardar).
9. ¿Qué sucederá si subimos el radio y el número de partículas por ejemplo 70 partículas con radio 10 R.A. y bajamos mucho el de las demás partículas, por ejemplo 20 partículas y radio de 2 R.A.? ¿Si habrá dispersión? (guardar).
10. Con los valores de serie, ¿Qué sucede si cambia las temperaturas? Pruebe a do mucho unas partículas y a calentar las demás, muestre lo observado. (guardar).
11. Ahora explore por su por su propia cuenta los parámetros. Describe que interesante configuración logra obtener.
12. Pasemos ahora a simular gases en la vida en la vida real, primero para simular el gas de Hidrógeno. ¿Qué parámetros usaría para simular este gas?
13. Ahora simula el Helio, ¿Qué parámetros usaría para este gas?
14. Tome los parámetros del H y del He y haga la difusión entre estos gases y discuta que puede observar. (guardar).
15. Usando el H y el He ¿Qué sucede si prueba a cambiar la temperatura?
16. ¿Qué otro fenómeno creo que puede demostrar? ¿Por qué? Por ejemplo, la oxidación de un bloque de carbono ¿Qué parámetros hay que cambiar?

2.3. Actividades con los datos

Como se menciona en la sección 1.3, el programa guarda un archivo *.csv* para que el usuario pueda graficar sus datos y poder sacar conclusiones extra, si se guardaron los datos en la actividad mostrada en 2.2 entonces se recomienda responder a las preguntas de la sección menciona, pero en este caso basándose en los datos (se recomienda graficarlo en un entorno de python, o en excel dependiendo de los conocimientos).

En caso de no poder graficar los datos, en las figuras (6)(7)(8) se muestra un ejemplo de las gráficas que se pueden obtener. Ya sea con las gráficas dadas o con las tuyas, se pueden responder de forma extra la siguientes preguntas:

1. De la figura (6) ¿Puede deducir el número de partícula inicial en caja caja?
2. De la figura (6) ¿Qué observa a medida que el tiempo avanza?
3. De la figura (7) ¿Qué puede notar en los tiempos bajos para la caja izquierda?
4. De la figura (7) ¿Qué puede notar en los tiempos altos para la caja izquierda?
5. De la figura (8) ¿Qué conclusión general puede sacar de la temperatura?, ¿Por qué la temperatura de ambas cajas es igual cuando el tiempo aumenta?

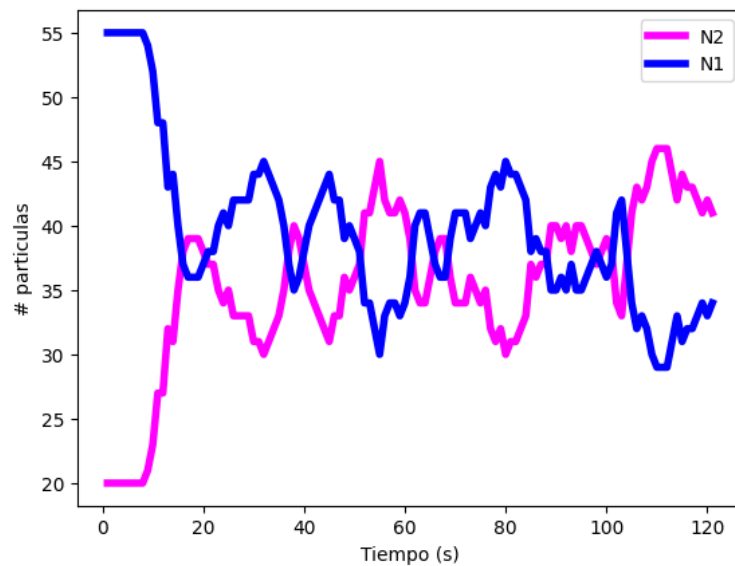


Figura 6: Gráfica del número de partículas total en las cajas (N1, N2) en función del tiempo.

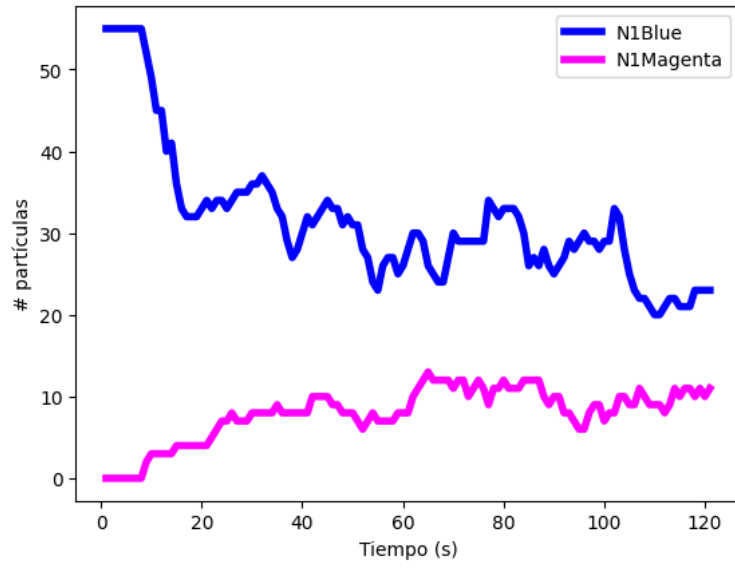


Figura 7: Gráfica del número de partículas en la caja izquierda para los 2 diferentes tipos de partículas.

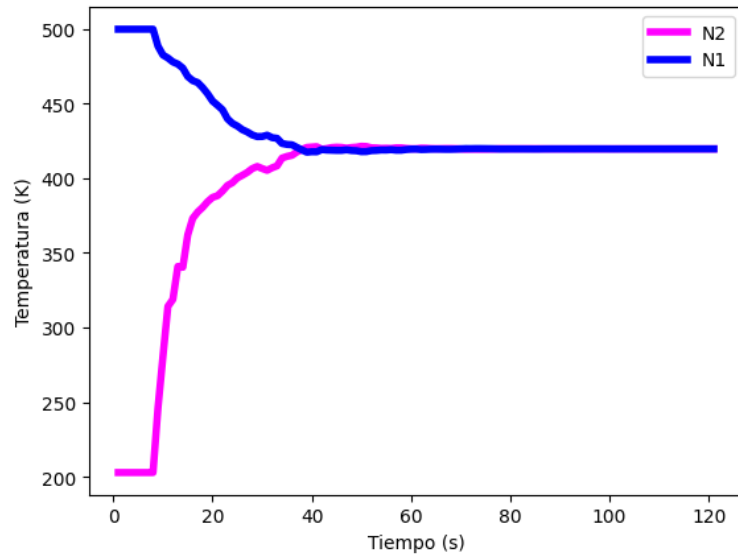


Figura 8: Gráfica de la temperatura en ambas cajas en función del tiempo.