



Solución de la Ecuación de Difusión de Gases en 2D Usando Técnicas de Aproximación

M.González, H.Luque, J.C.Araújo, A.Hurtado^a

^aGrupo "Física e Informática", Proyecto Curricular Licenciatura en Física, Universidad Distrital Francisco José de Caldas.

Recibido 22 de Oct. 2007; Aceptado 15 de Oct. 2008; Publicado en línea 5 de Ene. 2009

Resumen

Explicar el comportamiento de sistemas físicos compuestos por colecciones de muchas partículas, que interactúan entre sí y a su vez describir su comportamiento teniendo en cuenta las variables físicas que intervienen, resulta en la mayoría de casos un poco complejo. En el caso de los gases existen procesos muy interesantes de analizar y entre ellos está el de difusión. Por eso, en el presente artículo se muestra como se puede simular un proceso de difusión en 2D de un gas en el vacío y con otro gas usando dinámica molecular. Se mide virtualmente la constante de difusión de cada sistema y se compara con el método analítico, después de lo cual se muestra como podría determinarse la ley de Fick. Finalmente se aplica el método de elementos finitos para dar solución a la ecuación diferencial que rige este fenómeno de transporte para diferentes condiciones iniciales y de frontera.

Palabras Clave: Difusión, ley de Fick, simulación, dinámica molecular.

Abstract

The behavior of physical systems composed of many collections of particles, which interact with one another and describe this behavior taking the physical variables involved, it is in most cases a little complex to explain. In the case of the gases exist very interesting processes to analyze, namely, diffusion. Therefore, in this article shows how you can simulate a process of diffusion gas-vacuum and gas-gas in 2D using molecular dynamics. Virtually, We measured the Diffusion constant of each system and compared with the analytical method, after which displays as could be determined Fick's law. Finally apply the finite element method to solve the differential equation that governs this transport phenomena for different boundary and initial conditions.

Keywords: Diffusion, Fick's law, simulation, molecular dynamics.

©2009. Revista Colombiana de Física. Todos los derechos reservados.

1. Introducción

La difusión de los gases consiste en el transporte de masa desde el lugar de mayor concentración al de menor concentración con el objetivo de conseguir un estado de equilibrio. Para el caso de un gas, esto consiste en un movimiento de las partículas que conlleva a que, por medio de colisiones sucesivas, se termine por ocupar el espacio donde hay menor concentración.

Como este fenómeno de transporte se asocia con el movimiento de las partículas, es posible usar métodos de simulación como los de Dinámica Molecular (MD) para encontrar resultados respecto a este proceso. Por otra parte, cuando se tiene una ecuación diferencial parcial, como la Ecuación de difusión, se usan métodos de solución como el de diferencias finitas (DF)[1] o el de elementos finitos (FEM)[2] que permiten colocar cualquier condición inicial o de frontera.

A continuación se muestra la primera ley de Fick partiendo de una colección de partículas que se simulan por medio de MD. Adicionalmente se realizó una animación de dicha colección que muestra como al transcurrir el tiempo, el sistema intenta ocupar todo el recipiente. Se explica como se amplía el algoritmo para un sistema conformado por dos gases distintos. Finalmente, se muestra el formalismo empleado para la simulación de la Ecuación de Difusión por FEM y se soluciona el sistema para algunos casos particulares.

2. Primera ley de Fick por MD

La primera ley de Fick muestra que la corriente de partículas es directamente proporcional a la derivada de la concentración respecto a la posición, donde la constante de proporcionalidad es la constante de Difusión. El algoritmo usado para el movimiento de las partículas es del tipo 1E y hace parte de la familia de integradores symplecticos[3]:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^{n+1} &= \mathbf{X}^n + \Delta t \mathbf{V}^n + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{F}^n \\ \mathbf{F}^{n+1} &= \mathbf{F}(\mathbf{X}^{n+1} + \alpha \Delta t \mathbf{M}^{-1} \mathbf{F}^n) \\ \mathbf{V}^{n+1} &= \mathbf{V}^n + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{F}^{n+1} + \mathbf{F}^n) \end{aligned} \quad (1)$$

Donde \mathbf{X} , \mathbf{V} , \mathbf{F} representa los vectores de posición, velocidad y fuerza de todas las partículas respectivamente y \mathbf{M} es la matriz de masa de las partículas que para este caso se escoge como una matriz diagonal de las masas de cada cuerpo. Con base en este algoritmo y colocando una interacción entre las partículas (Como la interacción de Vander Waals) se obtiene el movimiento de las partículas para un Δt dado. Se escoge $\alpha = 1$ para que el valor del argumento dentro de la fuerza este relacionado con el valor medio de la posición \mathbf{X} . Al realizar este proceso para un sistema de partículas a una interacción de Van der Waals se obtienen los resultados mostrados en la **Fig. 1**.

Para generar las condiciones iniciales se usaron números aleatorios en la posición de las partículas de tal forma que si la partícula se encuentra fuera de cierto límite (en este caso fuera de la mitad del recipiente) no se coloca y se evita la superposición de partículas. Para la velocidad de partículas se usó un generador aleatorio que obedece a la distribución de Maxwell-Boltzmann, donde la media de la gaussiana se escoge como la velocidad más probable.

Después de comprobar la difusión visualmente (**Fig. 1**) se procede a medir la corriente y la derivada de la concentración respecto a la posición. Para medir la corriente se toma una pequeña tira de ancho dx y se suman

las velocidades de las partículas que se encuentran dentro de dicha tira (esto se puede hacer para partículas de la misma especie) y se multiplica por la concentración de partículas en este punto. La derivada de la concentración respecto a la posición se toma usando la derivada central:

$$\frac{dn}{dx} = \frac{n(x + \Delta t) - n(x - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (2)$$

Para calcular la concentración se toma el número de partículas que están en la pequeña tira y se divide por el área de este elemento.

Para mostrar los efectos de la Difusión se han colocado 100 partículas de radio 3 (en unidades arbitrarias) en un recipiente de área 300 por 300. Aunque en realidad la concentración es muy baja, lo que genera que no se cumpla por completo la primera ley de Fick, si se promedian los datos obtenidos para un mismo valor de dn/dx se obtiene una aproximación lineal (**Fig. 2**). Con estos datos y la regresión lineal se mide la constante de Difusión, mostrando que por medio de la Dinámica molecular se presenta naturalmente el proceso de Difusión. El único inconveniente que tiene el uso de MD para simular este fenómeno es que requiere mucho tiempo de cálculo, lo que hace que para un sistema de muchas partículas el proceso sea muy demorado.

Para colocar un sistema gas-gas basta con colocar otro sistema de partículas y definir dentro de las interacciones, la interacción gas-gas, con cualquier clase de interacción, por ejemplo la interacción de Vander Waals entre dos partículas distintas. Cabe resaltar que para realizar este proceso con una fuerza a distancia como la de Van der Waals, es necesario definir un radio de acción para que se calcule la fuerza sólo cuando las partículas están muy cerca.

3. Solución de la Ecuación de difusión por FEM

La ecuación general de Difusión tiene la forma:

$$k \nabla^2 u = \frac{\partial u}{\partial t} \quad (3)$$

para solucionar por medio del método de elementos finitos se usa el problema variacional[4] que aplicado a la Ecuación de difusión conduce a:

$$\int_a^b \left[\frac{\partial u}{\partial t} \psi_i(x) + k \frac{\partial u}{\partial x} \frac{d\psi_i(x)}{dx} \right] dx = k \left[\psi_i(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right]_a^b \quad (4)$$

Donde las funciones $\psi_i(x)$ son las funciones base. Para solucionar este problema dependiente del tiempo aplicamos el método de Galerkin usando la función $u(x, t)$ como:

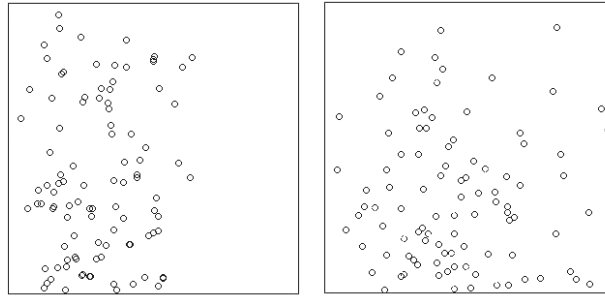


Figura 1. Difusión de partículas hacia un espacio vacío

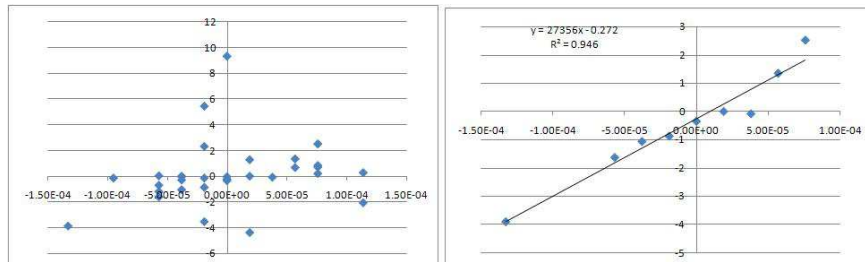


Figura 2. Cálculo de la Constante de Difusión y primera ley de Fick

$$u(x, t) = \sum_{j=1}^n a_j(t) \psi_j(x) \quad (5)$$

que al realizar las correspondientes derivadas y reemplazar en (4) se tiene

$$\sum_{j=1}^n \dot{a}_j(t) \int_a^b \psi_i \psi_j dx + k \sum_{j=1}^n a_j(t) \int_a^b \frac{d\psi_i}{dx} \frac{d\psi_j}{dx} dx = \quad (6)$$

$$k \left[\psi_i(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right]_a^b$$

que se puede expresar en forma matricial como:

$$\mathbb{A} \dot{\mathbf{a}} + k \mathbb{B} \mathbf{a} = \mathbf{F} \quad (7)$$

que es un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden para las funciones $a_j(t)$. Al colocar (7) en forma homogénea se puede resolver este sistema por medio de algún método numérico como el de Euler.

En la Fig. 3 se muestra las soluciones encontrada para una concentración inicial en forma triangular y para una concentración inicial en una región dada, como ocurre para el caso mostrado en la sección anterior.

4. Conclusión

Para realizar el proceso de difusión por MD no es necesario tener nada acerca de la ecuación diferencial que rige dicho fenómeno, sólo basta con tener una interacción entre las partículas que se encuentran en los límites que se desean. Este método permite el uso de

partículas para las cuales la ecuación (4) no es válida. En contraste, FEM parte de la Ecuación diferencial para obtener resultados pero su tiempo de cálculo es relativamente pequeño con el que necesitaría un problema realizado por MD, ya que tendrían que agregarse gran cantidad de partículas. El valor de la Constante de difusión se puede determinar de la primera ley de Fick que se encuentra por MD mientras que FEM requiere de esta constante para determinar la solución a cualquier sistema con condiciones iniciales y de frontera, por extrañas que se quieran. Con base en esto se puede decir que estos métodos de simulación se usan para condiciones distintas y podrían ser complementarios, si por ejemplo se usara MD para determinar la constante de difusión se un sistema y FEM para solucionarlo en condiciones iniciales y de frontera más complejas.

Referencias

- [1] D.Parra, Solución numérica de la ecuación- advección- reacción con un esquema de separación de operadores, Memorias XIV Semana Regional de Investigación y Docencia en Matemáticas, págs. 101-114, 2004.
- [2] Q. Su, V. L. Syrmos, D. Y. Y. Yun, A numerical algorithm for the diffusion equation using 3D FEM and the Arnoldi method, Circuits, Systems, and Signal Processing, págs 291-314, 2005.
- [3] D. Szeely, G. Zhangz, T. Schlickx, A Family of Symplectic integrators: stability, accuracy, and molecular dynamics applications, SIAM J. SCI. COMPUT, pp. 203-222, 1997.
- [4] Kaplan, W. Matemáticas Avanzadas para estudiantes de Ingeniería, pp. 761-789, 1985.

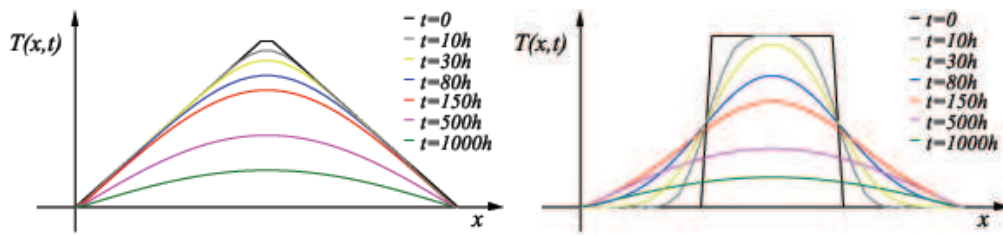


Figura 3. Solución de la Ecuación de difusión por FEM. Concentración Inicial triangular(Izquierda) y cuadrada(Derecha)