



Informe difusión

Macarena Henríquez Soto; Mahina Montoya Zavala; Rafael Riveros Ávila

Profesora: Claudia Trejo

FIS1421 - Técnicas Experimentales

Instituto de Física, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile

5 de septiembre de 2021

Resumen:

A través de la plataforma de simulaciones interactiva Phet, en HTML5, de la universidad de Colorado Boulder, hemos podido extraer datos de forma gratuita para el estudio del fenómeno de difusión de gases. Sus implicancias en los campos de la mecánica de fluidos, física estadística y termodinámica, lo configuran como un sistema ideal para entender y aprender más acerca de técnicas experimentales que dan origen a su régimen físico. Como pudimos ver existe una relación entre la posición del centro de masa a través del tiempo y la densidad de partículas en el espacio en el tiempo que parece ser proporcional, lo que parece seguir las expectativas teóricas del experimento, pero cobra una real relevancia el análisis de las variables medidas, ya que sólo el considerar su rango de validez nos proporcionará la información correcta para encontrar estas relaciones mencionadas, este se vuelve el principal objetivo de la experiencia, alcanzar un nivel de fiabilidad tanto de los datos como del análisis, para así ir mejorando estos y afinando las medidas para obtener valores que se ajusten no solo al modelo sino a la realidad.

Palabras clave: Técnicas experimentales, Difusión, Termodinámica, Estadística, Mecánica de fluidos, Simulación.

1. Introducción

La ecuación de difusión de gases es bien conocida, teóricamente describe fielmente los sucesos ocurridos en un experimento de difusión. En nuestro caso el experimento es configurado mediante una simulación computacional en la cual cierto número de partículas en una caja, $2 - D$, con radio igual a 125 pm y una masa de 28 Amu , se transmiten de una mitad, a la otra, luego de quitar la barrera que las confinaba a la mitad izquierda de la caja, llegar desde esta situación a la ecuación de difusión requiere tomar decisiones que pueden determinar los resultados, nuestra misión será limitar al máximo la manipulación innecesaria de ellas, para así obtener el modelo buscado, en el mejor de los casos, u otro que describa con certeza lo que está ocurriendo. Para esto, necesitamos obtener datos que representativos, es decir, no solo tomar una medida sino que muchas, de forma que también haremos uso de las variables estadísticas para acercarnos a los valores reales.

Lo que sabemos, de la teoría, es que la descrip-

ción matemática de lo ocurrido es una ecuación diferencial de segundo orden que depende de la posición y concentración del material, partículas de un gas en nuestro caso, así como también depende del tiempo (t) y de un coeficiente de difusión colectivo D . La forma de esta ecuación es la siguiente:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \nabla^2 \phi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

tal como vimos en las instrucciones de la actividad 1 del curso.

Establecido esto, analizamos desde el área de las técnicas experimentales en la física que elementos nos permitirán obtener las variables de medición útiles y como debemos abordarlas para así obtener una descripción de lo que sucede en nuestro experimento. Lo primero que esbozará las relaciones buscadas es el tiempo en que ocurren los eventos, estos, son el número de partículas que se transfieren desde el lado derecho al lado izquierdo de la caja en cierto intervalo y como va evolucionando el centro de masa al transcurrir este.

De igual forma, no menos importante, podemos identificar que la recolección de datos estuvo sujeta a errores, como sucede siempre en un experimento. Por lo mismo debimos determinar que tan fiables serían estos antes de realizar el experimento, imponiendo ciertos criterios en la consideraron tanto en los errores registrados por los instrumentos de medición dentro de la plataforma de simulación como en la metodología usada para medir. En lo que respecta a instrumentos hicimos la separación entre instrumentos de tipo digital y analógico pudiendo así conocer cuál es el error asociado a estas medidas, lo que se detallará en la siguiente sección. También hubo que convenir como registrar estas medidas de forma que todos los miembros del equipo obtuviera información verificable y reproducibles desde sus experimentos en igualdad de condiciones y para ciertos sets de condiciones iniciales, para finalmente analizarlos estadísticamente y obtener así resultados más ajustados a los valores reales.

2. Metodología

2.1. Toma de datos

El experimento se realizó mediante un simulador interactivo de difusión en la plataforma web Phet¹. Este simulador nos presenta una caja con un divisor en medio en donde podemos agregar partículas, elegir su tamaño y masa, establecer temperaturas de manera personalizada, para que luego al comenzar a correr el tiempo, el divisor desaparezca y observemos la difusión de estas partículas en todo el espacio.

Podemos observar una captura del funcionamiento de la simulación en la figura 1.

2.2. Procedimiento experimental

En el caso de nuestra toma de datos, nos enfocamos en la variación del número de partículas para cuatro conjuntos: $n = 50, 100, 150, 200$. Las cuales comenzarían estacionarias en el lado izquierdo de la caja.

El resto de las variables quedaron fijas en todo momento para la masa (AMU) en 28, el radio (pm) en 125 y la temperatura inicial en 400 K, esto para ambos lados de la caja.

Durante de la difusión de las partículas, se registró el número de partículas que se encontraban

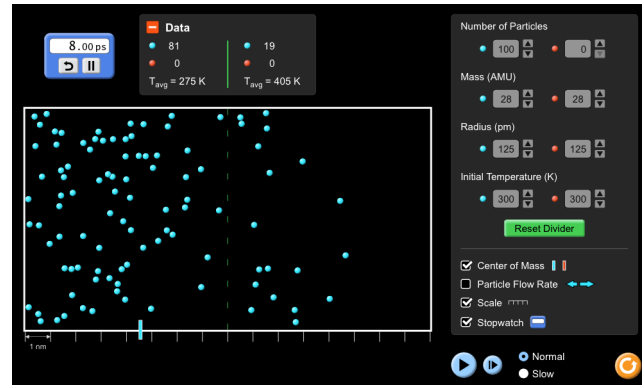


Figura 1: Captura del experimento con $n = 100$ partículas

en el lado derecho de la caja y la posición del centro de masa, ambos en función de tiempos $t = 5, 10, 20, 30, 50, 80, 100$ (ps). Para los cuales se realizaron 10 repeticiones para cada tiempo, teniendo un total de 280 registros.

Los registros se hicieron en tablas en excel, y en este mismo programa trabajamos los datos para el análisis estadístico, esto es la obtención de promedios, varianza y desviaciones estándar.

Por último, el tratamiento de datos para los gráficos se realizó programando un código con el lenguaje de Python. Se trataron los datos con la librería pandas, numpy y matplotlib.

2.3. Errores

Generalmente las medidas experimentales vienen acompañadas de un error inherente en el momento del registro de datos.

Para el caso de nuestro experimento, dado que el experimento se realizó por completo de manera digital, los errores están asociados en primera instancia, a la toma del dato del tiempo y luego a errores de tipeo.

Estos errores aleatorios deberán ser reducidos por la repetición del experimento. Por otro lado los errores sistemáticos que se puedan presentar se deben a como establecimos ciertas convenciones en el proceso experimental.

En este sentido hay un error que surge de la medida de la posición del centro de masa, ya que la escala de referencia presentada no permite ser demasiado exacto a la hora de medir. Esto significa decidir redondear hacia la derecha o la izquierda, tomando uno u otro de manera intercalada, esperando que se compensara el error provocado.

¹<https://phet.colorado.edu>

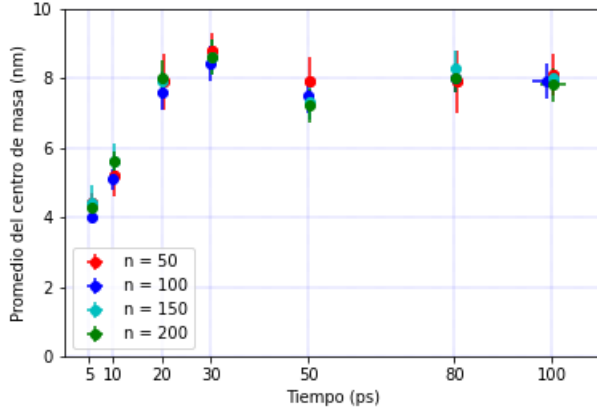


Figura 2: Promedio posición centros de masa en el tiempo.

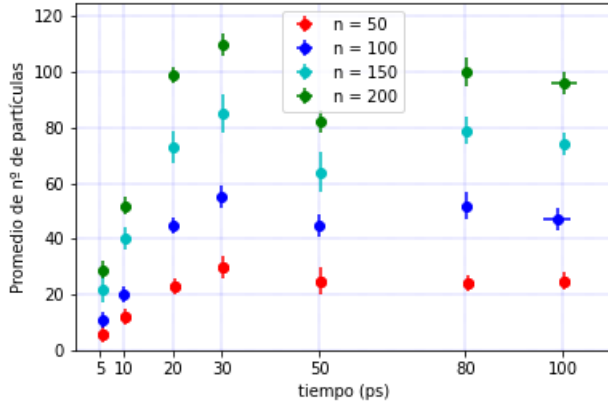


Figura 3: Promedio del número de partículas en el tiempo.

3. Resultados

Luego de repetir cada medida 10 veces, para así obtener medidas estadísticas más confiables, obtuvimos tanto el promedio del número de partículas como el del centro de masa para distintos tiempos, estas relaciones las presentamos en forma de los gráficos de la figura 2 y la figura 3.

Podemos observar que para cada número inicial de partículas, n , existe una curva donde su promedio en el tiempo, t , es proporcional a la de un n distinto, también, pareciese existir una relación entre las curvas asignadas a cada n en ambos gráficos. En vista de lo anterior, probamos cuál es la relación entre n y el promedio de

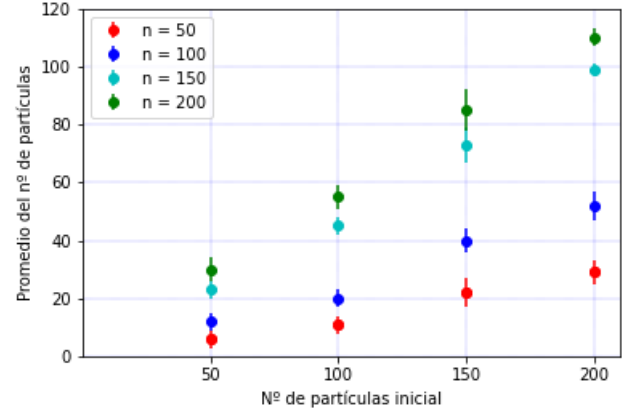


Figura 4: Numero de partículas iniciales vs número de partículas promedio

partículas alcanzados en cada tiempo medido, así buscamos confirmar lo observado y evidenciar el efecto del número de partículas inicial sobre no solo su promedio sino que su concentración y que esto determina, también, el movimiento de difusión en la figura 4.

4. Discusión de resultados

Antes de comenzar con el análisis de los resultados obtenidos, haremos un pequeño sumario de como fueron obtenidos. En el cuadro 1 observamos las medidas directas tomadas desde la plataforma, para el caso en el que el número inicial de partículas es 100 y cuyas medidas fueron tomadas alrededor de $t = 50$ segundos. En la primera fila se identifican las variables medidas y se señala el correspondiente error asociado a los instrumentos, el cual correspondería al error de cada medida individual.

Como vemos en la tabla 1 el número de medidas o las repeticiones del experimento, es de 10. Por lo mismo, reproducimos el proceso para cada n^o inicial de partículas y cada tiempo estipulado, la misma cantidad de veces, tal que nuestros datos representaran una medida estadística de la situación. Para esto, promediamos tanto el número de partículas, N , como el centro de masa, XCM , para cada uno de los tiempos representativamente elegidos, los cuales a su vez los representamos como el promedio del mismo. A cada una de estas nuevas variables, como vemos en el cuadro 2, que nos muestra como se comportan cuando el número inicial de partículas es inicial es 100, le aso-

Cuadro 1: Toma de datos para 100 partículas iniciales a tiempo 50 (s).

$t = 50 \pm 0,2$ (ps)	$N \pm 1$ (part.)	$X_{CM} \pm 0,5$ (nm)
49.88	46	8
50.14	41	7
50.76	43	8
49.34	39	7
49.93	50	8
50.25	51	8
49.49	50	8
50.18	39	7
49.64	44	7
49.68	43	7

Cuadro 2: Datos promedios para toma de datos total de 100 partículas iniciales.

Tiempo (ps)	N (part)	X_{CM} (nm)
$5,53 \pm 0,25$	11 ± 3	$4,0 \pm 0,0$
$9,94 \pm 0,23$	20 ± 3	$5,1 \pm 0,3$
$19,99 \pm 0,23$	45 ± 3	$7,6 \pm 0,5$
$29,78 \pm 0,36$	55 ± 4	$8,4 \pm 0,5$
$49,93 \pm 0,40$	45 ± 4	$7,5 \pm 0,5$
$80,29 \pm 0,14$	52 ± 5	$8,0 \pm 0,4$
$98,74 \pm 2,73$	47 ± 4	$7,9 \pm 0,5$

ciamos un error dado por la desviación estándar de las medidas.

Presentamos en la tabla 2 como el número de partículas inicial determina los resultados en las tres variables, pero aún así, estas son representativas del experimento, ya que las demás curvas son proporcionales a ella. También podría dar la impresión de que hemos aumentado el error al tomar un mayor número de medidas, lo que de alguna forma es correcto, ya que operamos datos con errores pre establecidos por la naturaleza de los instrumentos de medición, pero aún así la única forma de obtener un resultado fidedigno es tomar infinitas medidas de un evento reproducible bajo las mismas condiciones, tal como lo supone la simulación, y aunque es imposible hacer infinitas repeticiones, y 10 es un número muy distinto de infinito, mientras más medidas tomemos, más nos acercamos a la realidad del problema.

5. Conclusiones

Como vimos en los resultados, en el gráfico de la figura 4, existe una relación innegable entre el número de partículas inicial y el promedio que alcanza en cada tiempo, la cuál es de tipo exponencial. Y si bien aun no hemos ajustado una linea de tendencia que aporte un caracter fiabilidad matemática, geoméricamente, podemos apreciar que esta relación, que va diferenciandose más al aumentar el número de partículas, puede ser utilizada para construir como un operador sobre el promedio centro de masa que diferencie aún más las curvas. De cumplirse esto, podriamos obtener la relación encontrada teóricamente por la ecuación de difusión, vista en la ecuación 1. Además podemos observar que la relación entre promedio de partículas en el tiempo para cada tiempo podria determinar el coeficiente de difusión D . Pero esto es un trabajo que debemos verificar en próximas entregas.

De la misma forma, debemos mencionar que que fueron varios los parámetros que mantuvimos fijos en el experimento y que no exploramos, tal como lo son la temperatura, el tamaño de las partículas y su masa, lo que se presenta como una oportunidad para un trabajo posterior. Así como también, queda como desafío mejorar las medidas, tomando más, mejorando los metodología para obtenerlas y así reducir los errores asociados a ello, en esta misma línea, el programar las medidas estadísticas, en un lenguaje de uso científico, como python, a partir de las medidas directas puede resultar en un mejor acercamiento a los valores reales que como se calcularon con excel. Aún así, los resultados nos presentan evidencia de que la ecuación de difusión es apropiada como modelo en este experimento y que si bien nuestras medidas no son las más confiables, lo son lo suficiente para configurar un esquema que lo confirme.