

姓名	学号	班级	选题	论述	总结	总分
李思哲	2015301510086	天眷班				

标题：咖啡，方糖与熵

摘要：

在此篇报告中，我应用随机行走的原理，探究了方糖块在咖啡中扩散的机制。我首先使用了计算机模拟了该扩散的过程；其次我还采用了一些近似的方法，对这个过程中熵的变化情况做了定量计算；最后，报告中比较了有边界和无边界两种情况下熵值变化的区别，并对两种情况下熵值变化发生的原因做了分析。

目录

- I 摘要**
- II 正文**
- III 结论**
- IV 引用**

正文

一 方糖块在咖啡中的扩散

1 随机行走简介

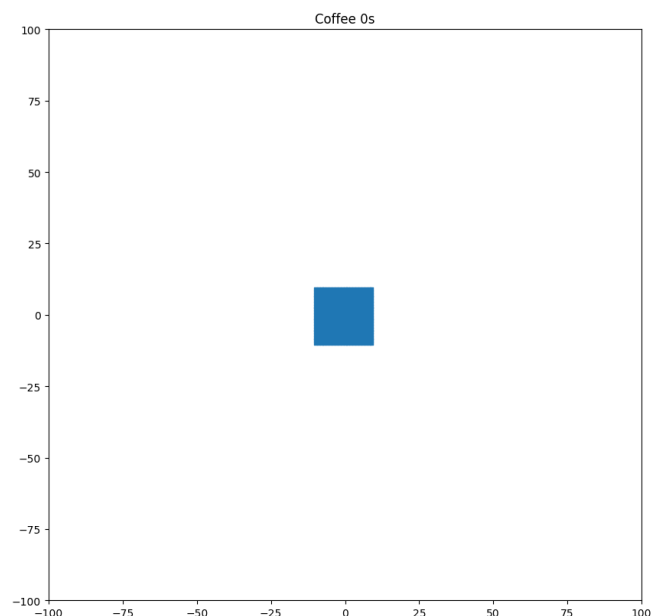
本文的模拟基于随机行走。随机行走（Random Walk）是计算机和物理等领域经常使用的一类算法，被广泛用于模拟统计系统，研究材料生长过程，以及股票市场预测。

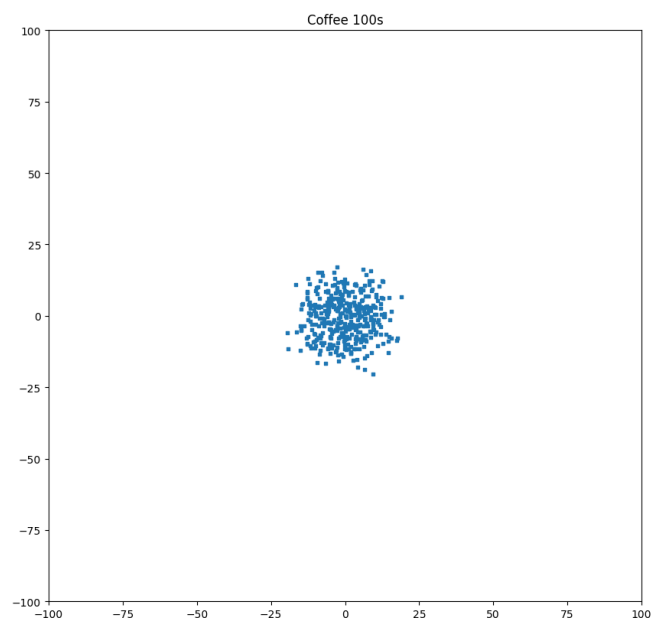
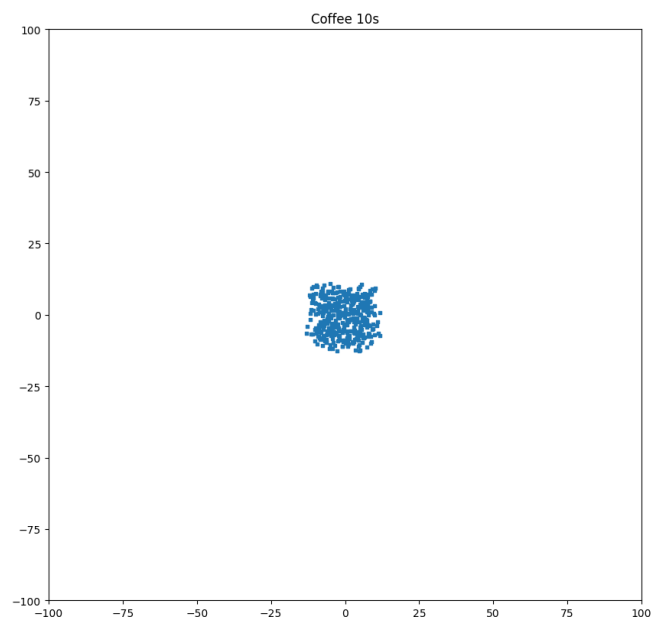
随机行走的基本原则是“随机且均等”。设定某个点的位置在坐标轴/平面/空间的原点处，然后以同等概率向所有可能的方向移动一段距离，不断重复上述过程——这就是随机行走的算法。虽然简单，但可以有效模拟研究的对象，即方糖块在咖啡中的扩散过程。虽然每个方糖微粒都遵循物理规则运动，但大量微粒呈现的统计行为，使得“绕过”使用物理规律对单个方糖微粒的模拟，直接从整体研究这个问题成为了可能。

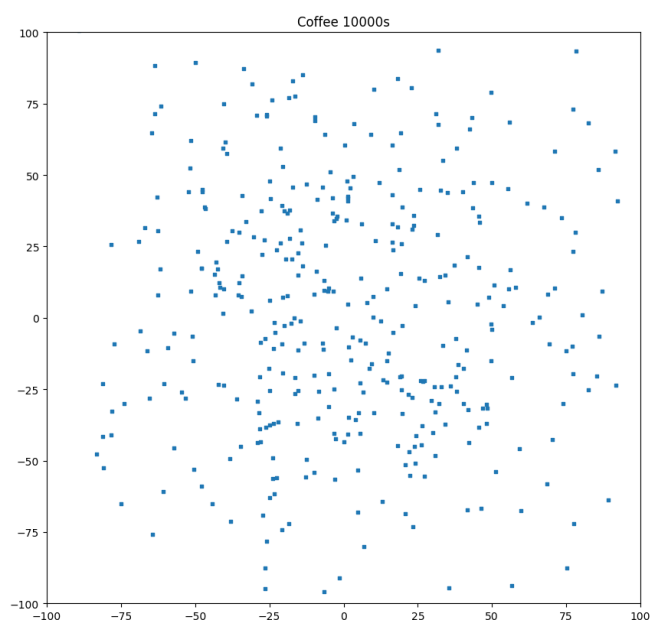
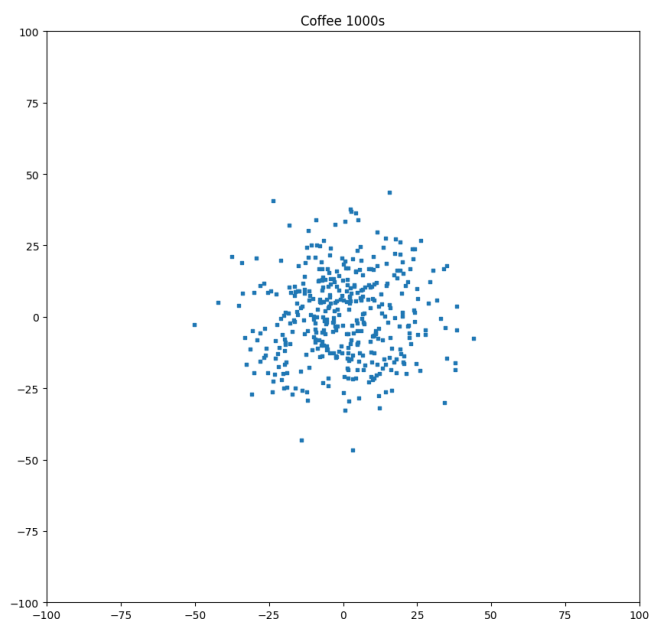
2 二维咖啡的扩散模拟

本着循序渐进的原则，先模拟二维情形下方糖块的扩散过程。在二维咖啡中，咖啡杯是一个 200×200 大小的方框，方糖块是一个 20×20 大小的方片。共有 400 个方糖颗粒参与模拟。

下面分别是方糖块在起始时刻、10 步、100 步、1000 步和 10000 步后的扩散情况。





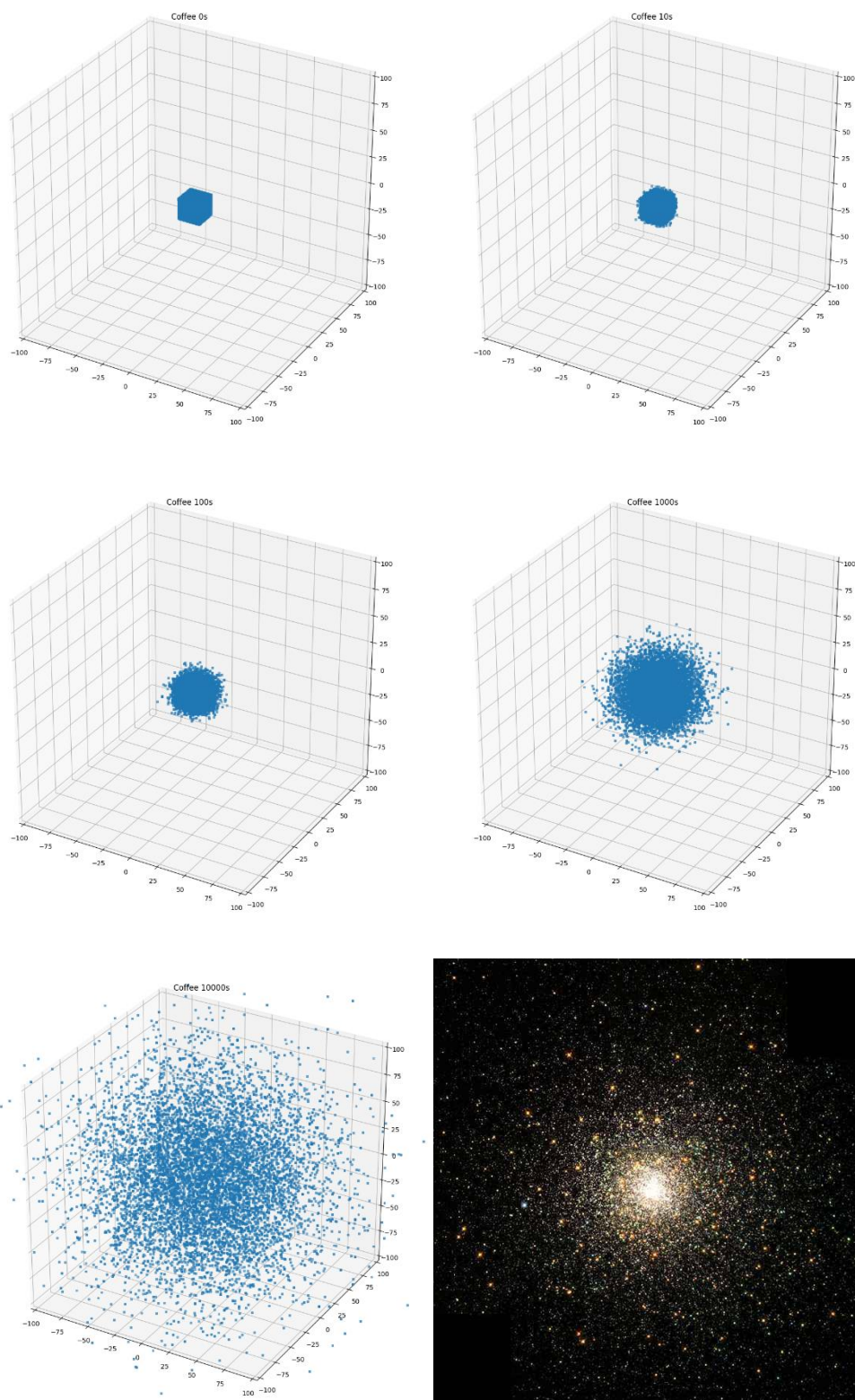


模拟的结果和常识符合的很好。在模拟中，每次方糖微粒移动的步长是介于 $(0, 1)$ 间的一个随机值。值得庆幸的是，在真实情况中，微粒的扩散速度要快很多倍。因此泡好一杯咖啡需要的时间比模拟中短得多。

3 三维牌咖啡的扩散模拟

接下来模拟三维牌咖啡中方糖块的扩散。这次咖啡杯是一个 $200 \times 200 \times 200$ 的方盒，方糖块是一个 $20 \times 20 \times 20$ 的真正的“方块”。共有 8000 个方块参与模拟。选取的时间节点和

二维牌咖啡一致。



较之二维情形，三维牌咖啡的视觉冲击力更强。为了突出这一点，我在最后附了一张球状星团的照片。两者形成的机理可能不尽相同，但如此悬殊的尺度与如此相似的结构，有一种别样的美感。

二 扩散过程中的熵

1 熵的简要回顾

熵指的是体系的混乱的程度，它在控制论、概率论、数论、天体物理、生命科学等领域都有重要应用，在不同的学科中也有引申出的更为具体的定义，是各领域十分重要的参量。熵的概念由鲁道夫·克劳修斯于 1850 年提出，并应用在热力学中。1948 年，克劳德·艾尔伍德·香农（Claude Elwood Shannon）第一次将熵的概念引入信息论中。熵是体系的状态函数，其值与达到状态的过程无关；它的定义式是： $dS = \frac{dQ}{dT}$ ，因此计算某一过程的熵变时，必须用与这个过程的状态和终态相同的过程的热效应 dQ 来计算。 TdS 的量纲是能量， T 是强度性质，因此 S 是广度性质。计算时，必须考虑体系的质量；同状态函数 U 和 H 一样，一般只计算熵的变化。从微观上说，熵是组成系统的大量微观粒子无序度的量度，系统越无序、越混乱，熵就越大。热力学过程不可逆性的微观本质和统计意义就是系统从有序趋于无序，从概率较小的状态趋于概率较大的状态。

2 扩散过程中熵的计算

热力学与统计物理中，关于熵的计算公式是这样的

$$S = - \sum_i P_i \ln P_i$$

但是在本文所研究的问题中，如此多的方糖微粒，不可能精准地找出每一个可能的状态以及其对应的概率 P_i 。所以需要寻找一种近似的方法。首先考虑只有一个微粒的情形，将这个微粒所在区块的可能性记为 1。那么对于 N 个微粒，只需要将每个区块的可能性改写为

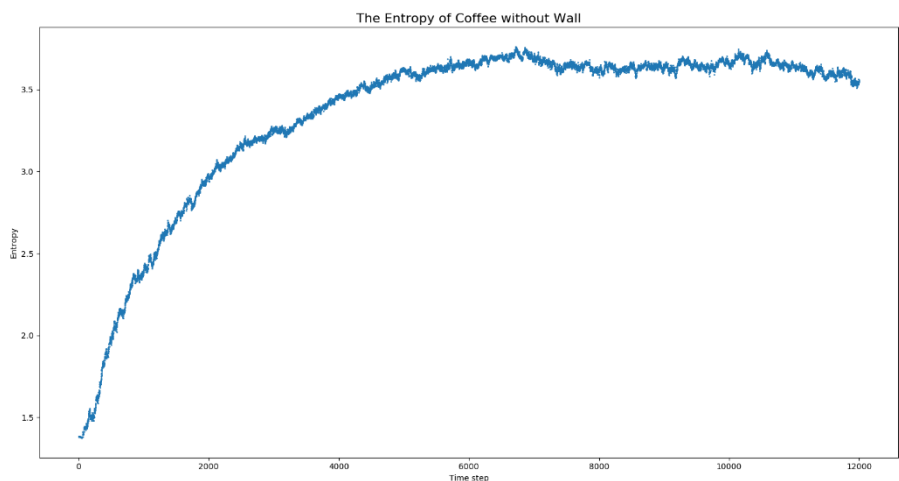
$$P_i = \frac{\text{在这个区块中的微粒数}n}{\text{微粒总数}N}$$

将咖啡杯划分为 8×8 的区块（因为三维牌的计算量太大，只考虑二维牌），记录每一步中每个区块的 P_i ，代入上式即可算出熵值。具体的计算结果留待下一节讨论。

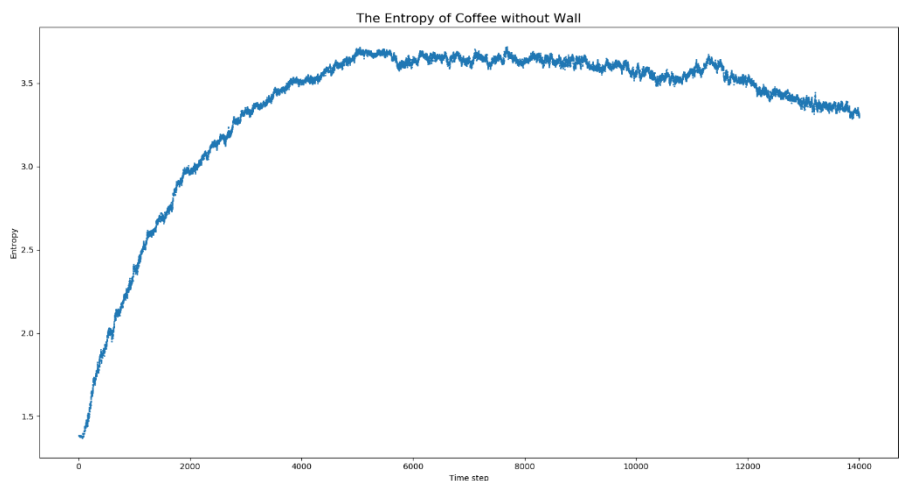
三 为什么需要咖啡杯

1 没有咖啡杯的情形

首先给出按照上一节的算法得到的结果。



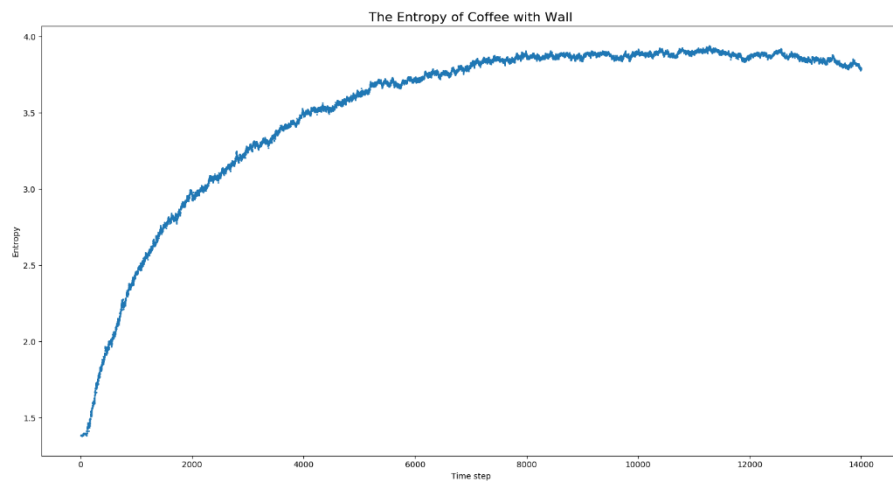
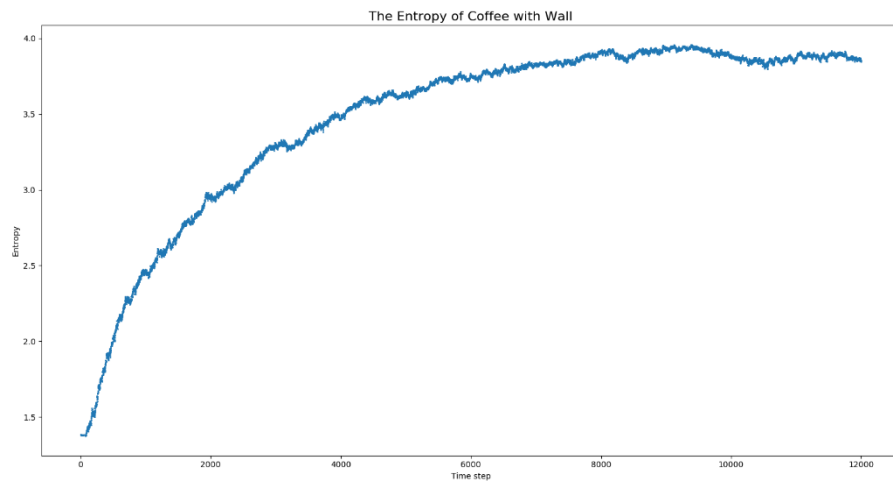
看起来似乎还不错……但是如果把时间稍微加长一点：



在 12000 步之后，熵值出现了下降。这并不意味着糖块分子自发地变得有序了（我觉得有生之年不太可能看到这一幕），而是扩散的糖块微粒离开了统计格子的范围。随着微粒的减少熵也减少了（囧）

2 有咖啡杯的情形

上一小节的模拟不太成功，在这一小节对其进行这样的改良：当检测到微粒超出划定的范围时，令微粒后退 1 个单位，来模拟微粒撞到咖啡杯壁反弹的情景。



可以看到，即使是较长的时间后，这个程序依然工作的很好。

结论

本篇报告模拟了方糖块在咖啡中的扩散过程，并计算了这一过程的熵值，比较直观地体现了随机行走在具体问题中的应用，得到的结果也符合日常生活中的直观印象。在处理熵的问题时，起初没有考虑到范围问题，后来通过改进，得到了较好的结果。

引用

【1】 N. J 《计算物理》