مبانی برنامه‌سازی پایتون

نیم‌سال دوم ۹۲-۹۳

دانشکده‌ی مهندسی کامپیوتر | مدرس: بی‌نظیر بیگلری

پروژه | فاز اول | مهلت ارسال: ۱۸ فروردین ماه

به موارد زیر توجه کنید:

- به عنوان فایل نهایی یک فایل پایتون به صورت py. ارسال کنید.
- فایل ها در سامانه جاج بارگذاری خواهند شد اما تصحیح خودکار نخواهد داشت. آدرس و نحوه ی کارکرد با آن در $piazza$ اعلام شده است.
- با هرگونه تقلب برخورد جدی خواهد شد. فرد خاطی ۱۰۰− نمره به ازای همان تمرین دریافت خواهد کرد و در صورت تکرار برخوردهای شدیدتری را در پی خواهد داشت.
- هرگونه سوال مربوط به تمرین ها را با موضوع مناسب در صفحه درس در سایت $piazza$ مطرح کنید.
- با هرگونه تلاش در جهت دسترسی غیرقانونی به سرور جاج برخورد جدی خواهد شد.
- کامنت گذاری و نام‌گذاری مناسب متغیرها الزامی‌ست و بخشی زیادی از نمره‌ی شما را مشخص می‌کند.

پیمان فخاریان، مهران محمودی
گروه پروژه

۱ چکیده

پروژه‌ی این ترم شما، طراحی یک شبیه‌ساز ساده برای مشاهده و آزمایش بر روی گازهاست. در فاز اول شما تنها یک دیدِ کلی نسبت به پروژه پیدا می‌کنید، در فاز دوم توابع مورد نیاز را پیاده‌سازی و در فاز سوم آن‌ها را بر انواع مختلفی از مولکول‌ها آزمایش می‌کنید و نتایج به دست آمده را تحلیل می‌کنید.
به هیچ وجه از پروژه نترسید! پروژه کاملا براساس مفاهیم شیمی و فیزیکی است که در دبیرستان داشته‌اید و اگر گاهی مطلبی فراتر از سطح دبیرستان گفته شده، توضیحات و فرمول‌های آن نیز آورده شده است. همچنین پروژه، شاید که در ظاهر سخت به نظر برسد اما وقتی به سراغ بخش کدزنی آن بروید، متوجه خواهید شد که بسیار از آن‌چه فکر می‌کرده‌اید، آسان‌تر است. کافی است که وقت مناسبی را صرف آن کنید.
همچنین پروژه‌ی شما، توانایی ارائه‌شدن در صنعت را دارد. کافی است که کمی علاقه داشته باشید و روی آن بیش‌تر کار کنید تا بتوانید آن را بعدها گسترش دهید و حتی به بازار ارائه دهید!

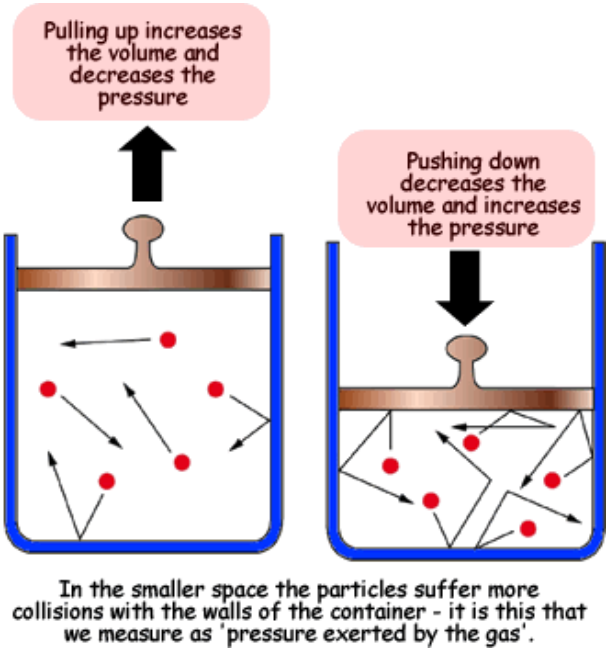
۲ قوانین گازها

همان‌طور که می‌دانید، بررسی گازها در سطح مولکولی به دو صورت ایده‌آل و غیر ایده‌آل انجام می‌شود. عوامل زیادی بر مولکول‌ها تاثیرگذارند. از جمله‌ی این عوامل می‌توان به کنش‌های بین مولکولی اشاره کرد. در حالت کلی، این مقادیر درون سیستمی، هرچند که بر عوامل بیرونی و خروجی‌های مورد نیاز در علم شیمی (مانند فشار گاز در محفظه) تاثیرگذارند ولی معمولا از بررسی آن‌ها صرف نظر می‌شود. در این صورت بررسی گازها را در حالت ایده‌آل گویند و کنش‌های درون مولکولی، بین مولکولی و قطبیت نادیده گرفته می‌شود عوامل موثر بر حجم مشخصی از مولکول‌ها، به چهار عامل فشار، دما، حجم و تعداد مولکول‌ها بستگی دارد.

۱.۲ قانون بویل

قانون بویل نشان می‌دهد که در دمای ثابت، حاصل ضرب فشار و حجم یک گاز آرمانی همواره ثابت است. این قانون در سال ۱۶۶۲ منتشر شد. درستی این قانون را می‌توان با کمک یک ظرف با حجم متغیر و یک فشارسنج مورد آزمایش قرار داد. همچنین به کمک منطق نیز می‌توان دریافت که ظرفی که تعداد ثابتی مولکول گاز در آن قرار دارد، در اثر کاهش حجم ظرف، مولکول‌های گازی درون آن تعداد دفعات بیشتری در یکای زمان با دیواره‌های ظرف برخورد می‌کنند و باعث بالا رفتن فشار می‌شوند. رابطه‌ی ریاضی قانون بویل به صورت زیر است، که در آن P فشار و V حجم گاز است.

$$P_1V_1 = P_2V_2 \tag{1}$$



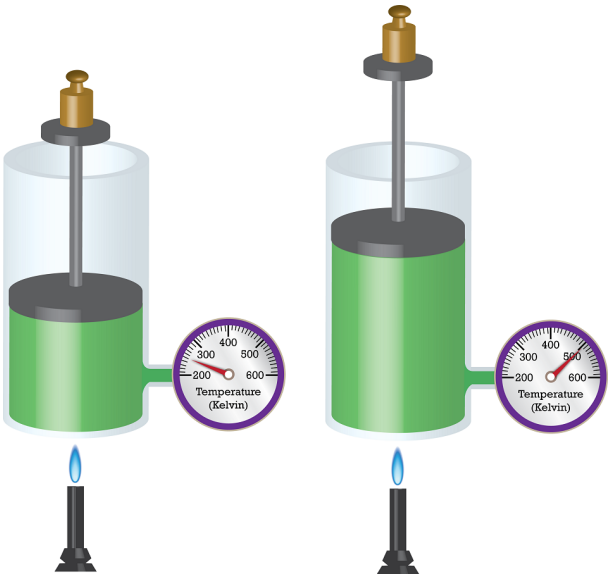
شکل ۱: قانون بویل

۲.۲ قانون شارل

قانون شارل یا قانون حجم‌ها، نخستین بار در سال ۱۶۷۸ بدست آمد. این قانون می‌گوید که برای یک گاز کامل یا آرمانی در فشار ثابت، حجم با دمای مطلق گاز (در کلوین) نسبت مستقیم دارد.

$$\frac{V_۱}{T_۱} = \frac{V_۲}{T_۲} \tag{۲}$$

که در آن V حجم و T دما است.
با کمک نظریه‌ی جنبشی می‌توان درستی این مطلب را ثابت کرد. همچنین با گرم و سرد کردن یک ظرف با حجم متغیر نیز می‌توان این قانون را مورد آزمایش قرار داد.



شکل ۲: قانون شارل

از رابطه‌های ۱ و ۲، رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\frac{P_۱}{T_۱} = \frac{P_۲}{T_۲} \tag{۳}$$

که در آن V حجم و T دما است.

۳.۲ قانون ترکیب گازها

در حالت ایده‌آل، معادله‌ی عمومی گازها به صورت زیر است:

$$PV = nRT \tag{۴}$$

که در این معادله P فشار، V حجم، n تعداد مول گاز موجود در فضای مورد نظر، T دما و R ثابت عمومی گازهاست. با استفاده از این فرمول می‌توان گازها را در حالت ایده‌آل بررسی کرد.

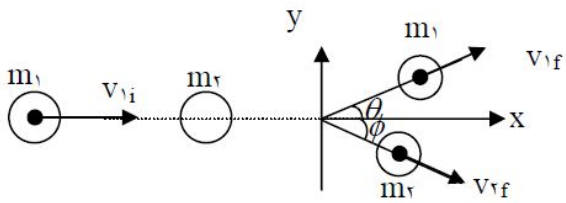
۴.۲ کنش‌های بین مولکولی

هر مولکول در جای خود نمی‌ایستد! با توجه به نیروی دافعه بین مولکول‌ها، نیروی جاذبه‌ی بین مولکول‌های قطبی، انرژی جنبشی موجود در هر ذره و ... مولکول‌ها دائم در حال حرکت هستند. برای تحلیل وقایع در سطح مولکولی، باید ازین کنش‌ها باخبر بود. برای ساده‌سازیِ پروژه‌ی شما، این کنش‌ها و واکنش‌ها در نظر گرفته نشده و تنها بخش مربوط به واکنش کلی مولکول‌ها نسبت به دما و تاثیر آن بر انرژی جنبشی و سرعت مولکول‌ها مطرح شده است.
بنابراین شما باید در هر لحظه، برخورد مولکول‌ها را نیز پیش‌بینی کنید و سرعت حرکت هر مولکول را بر حسب دمای آن پیدا کنید. برای این کار باید از فرمول زیر استفاده کنید:

$$\frac{۱}{۲}mv^۲ = \frac{۳}{۲}kT \tag{۵}$$

که در آن T دما بر حسب کلوین، m جرم مولکول، v سرعت و k ثابت بولتزمن است.
ولی کار شما تنها به تغییرات سرعت بر اثر تغییر دما محدود نمی‌شود. هرچند که سرعت مولکول در حرکتش ثابت است ولی در اثر برخورد با مولکول‌های دیگر دچار تغییر سرعت می‌شود. هر مولکول جرم و سرعت مشخص دارد و در برخورد با دیگر مولکول‌ها، سرعت و جهت حرکت آن تغییر می‌کند. برای به دست آوردن سرعت مولکول‌ها پس از برخورد، از قانون پایستگی تکانه در برخورد کشسان استفاده می‌شود.

$$\begin{matrix} p_i = p_f \\ k_i = k_f \end{matrix} \Rightarrow \begin{cases} p_{1i} + p_{2i} = p_{1f} + p_{2f} \\ k_{1i} + k_{2i} = k_{1d} + k_{2f} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} m_1 v_{1i} = m_1 v_{1f} \cos\theta + m_2 v_{2f} \cos\phi \\ 0 = m_1 v_{1f} \sin\theta - m_2 v_{2f} \sin\phi \\ \frac{1}{2} m_1 v_{1i}^2 = \frac{1}{2} m_1 v_{1f}^2 + \frac{1}{2} m_2 v_{2f}^2 \end{cases}$$



شکل ۳: قانون پایستگی تکانه در برخورد کشسان

۳ صورت پروژه

پروژه‌ی شما، طراحی یک شبیه‌ساز مولکولی در حالت ایده‌آل است، به طوری که بتوان در هر لحظه، با تغییرات دما، فشار و سایر مواردی که گفته شد، رفتار مولکول را پیش‌بینی کرد. همچنین پروژه‌ی شما باید ریزرفتار مولکول‌ها را در حالتی دیگر نشان دهد. در این ریزرفتار، مکان هر مولکول در فضای دوبعدی و سرعت آن باید مشخص باشد و در صورت برخورد مولکول‌ها، سرعت آن‌ها و مکانشان آپدیت شود.
احتمالا الآن خیلی از پروژه ترسیده‌اید!
اصلا نترسید! پروژه‌ی شما خیلی راحت‌تر از آن چیزی است که فکرش را می‌کنید.
در این مرحله از پروژه، نیازی به کدزدن‌های بزرگ نیست. نیازی به نوشتن بدنه‌ی توابع نیست. نیاز به طراحی ماژول‌های خاصی نیست. نیازی به هیچ واحد گرافیکی نیست! کار شما در این مرحله فکر کردن روی پروژه است و این‌که در فازهای بعدی چگونه آن را پیاده‌سازی کنید. اطلاعات پروژه به طور کلی در زیر آمده است.

۱.۳ اطلاعات

۱. پروژه‌ی شما دو حالت دارد. یکی حالت گاز ایده‌آل است که با حجم زیادی از گازها (چندین مول) سروکار دارید. دیگری حالت مولکولی است. در این حالت، تنها با چند مولکول کار می‌کنید.

۲. در حالت گاز ایده‌آل، یک حجم معین با مقدار مشخصی از گاز مورد نظر در دمای مشخص به شما داده می‌شود. ممکن است که برای شبیه‌سازی، نیاز شود که بعضی ازین مقادیر به صورت رندوم از سوی خود شما در برنامه داده شود و یا کاربر خود بخواهد که به شما مقدار دهد.

۳. کاربر می‌تواند به برنامه‌ی شما برای تغییر در دما، حجم، فشار و یا مول‌های گازی شما عددی وارد کند. در این صورت عدد داده شده، جایگزین مقدار قبلی می‌شود. ممکن است که کاربر به جای واردکردن یک عدد، یک فرمول مانند $۱/۰۱x + ۲$ وارد کند. در این صورت باید متغیر مورد نظر به شکل گفته شده تغییر کند.

۴. کاربر در هر مرحله می‌تواند چندین تغییر را (مثلا هم در دما و هم در حجم) اعمال کند و سپس نتیجه را مشاهده کند.

۵. کاربر می‌تواند تغییرات را در طول زمان اعمال کند؛ در این صورت ورودی کاربر برای یک متغیر فرمولی بر حسب زمان (مثلا $۱/۰۰۱t$) است و پس از آن زمان مشخصی (مثلا ۲۰) را وارد می‌کند. در این صورت، متغیر مورد نظر در هر ثانیه بر حسب فرمول گفته شده، آپدیت می‌شود.

۶. تمامی عملیات‌های آپدیت پارامترها (مثل فشار و ...) بر حسب فرمول‌های گفته شده در ابتدای این پروژه انجام می‌شود.

۷. در حالت مولکولی پروژه، تنها با تعدادی فرمول مربوط به تکانه و یک فرمول مربوط به رابطه‌ی دما و سرعت که در بالا گفته شد، سروکار داریم.

۸. ورودی‌های این حالت، تعدادی مولکول با جرم، سرعت ثابت و مکان مشخص است. بدیهی است که با توجه به این‌که فضا دوبعدی است، مکان و سرعت با دو پارامتر به صورت x و y بیان می‌شود.

۹. شما تنها باید در زمان‌های مشخص با استفاده از سرعت و مکان فعلی، مکان آینده را مشخص کنید و در صورتی که برخورد بین مولکول‌ها روی دهد، با استفاده از قانون پایستگی تکانه (که در ابتدای این پروژه آمده بود) سرعت جدید را به دست آورید.

۱۰. علاوه بر مورد قبلی، تنها عاملی که می‌تواند سرعت را تغییر دهد، تغییرات دماست. دما تنها به صورت یک عدد داده می‌شود و در این حالت، ورودی، تابع نخواهد بود.

۱۱. دو حالت پروژه کاملا مستقل از همدیگرند. در حقیقت وقتی که در حالت گاز ایده‌آل هستیم، پروژه به حالتِ مولکولی نمی‌رود و برعکس.

۱۲. برنامه‌ی شما تا زمانی که کاربر دستور پایان بدهد ادامه پیدا می‌کند ولی در لحظاتی که برنامه مشغول اجرای یک پردازش است (مثلا برای ۲۰ ثانیه، تغییرات را بر حسب زمان اعمال می‌کند) از کاربر دستوری نمی‌گیرد.

۲.۳ خروجی

در این فاز پروژه، شما نه قرار است که کدزنی خاصی کنید، نه قرار است که الگوریتم تعریف کنید و نه بدنه‌ی هیچ تابعی را بنویسید. تنها مواردی که از شما می‌خواهیم، این است که بر روی روند کلی پروژه فکر کنید. وقتی به نتیجه رسیدید که می‌خواهید چه کنید، ماژول‌های مورد نظر خود را مشخص کنید و در چند فایل پایتون، اسکلت توابع مربوط به آن ماژول‌ها را مشخص کنید. اسکلت شامل اسم تابع همراه با ورودی‌ها و خروجی‌ها، کامنت‌گذاری مربوط به هر تابع، داک‌استرینگ و ترجیحا توضیح درباره‌ی الگوریتمی باشد که در آن قسمت قصد استفاده از آن را دارید. معرفی متغیرهای ورودی و خروجی نیز در کامنتهای شما باید ذکر شود. توجه کنید که نمره‌ی این فاز از پروژه‌ی شما بر اساسِ مدل کلی طرح ماژول‌ها و توابعتان است؛ بنابراین سعی کنید که توابع متعددی برای وظیفه‌های متعدد تعیین کنید. همچنین بخش زیادی از نمره‌ی این فاز به کامنت‌گذاریِ شما و توضیحاتتان مربوط می‌شود؛ بنابراین در دادن توضیح و کامنت‌گذاری، صرفه‌جویی نکنید، بلکه حتی اسراف نیز جایز است!
برای مثال به نمونه‌ی زیر دقت کنید. کامنت‌های شما به هر شکلی که می‌خواهید می‌توانند باشند؛ فقط باید کامل باشند.

```python
def x_intercept(m, b):
    """
    Return the x intercept of the line y=m*x+b.  The x intercept of a
    line is the point at which it crosses the x axis (y=0).

    Parametes:
        m --  slope or gradient of the line
        b -- y-intercept of the line
    """
    return -b / m #m cannot be zero
```

نمونه‌هایی از توابعی که می‌توانید بنویسید، در زیر آمده است:

- تابعی که مسئول تولید اعداد تصادفی برای حجم و دما است. این تابع، یک ورودی دریافت می‌کند و اگر ورودی صفر باشد، به صورت تصادفی، عددی بین ۱۰۰۰–۲۵۰ تولید می‌کند و به عنوان دما آن را برمی‌گرداند. چنانچه ورودی برابر با یک باشد، به صورت تصادفی عددی بین ۱۰–۱ تولید و آن را به عنوان حجم برمی‌گرداند.
- تابعی که یک رشته (فرمول، مثلا $۱/۰۱x + ۲$) و یک عدد به عنوان ورودی (مثلا ۵) دریافت می‌کند و مقدار جدید را مطابق فرمول داده شده محاسبه می‌کند (در این مثال، عددِ ۷/۰۵ را برمی‌گرداند)
- تابعی که طبق فرمول بویل، سه عدد به عنوان فشار اولیه و حجم اولیه و ثانویه دریافت و با محاسبه مطابق قانون بویل، فشار ثانویه را برمی‌گرداند.
- تابعی که به عنوان ورودی دو عدد برای جرم و دما دریافت می‌کند و با استفاده از آن‌ها و قوانینِ کنش بین‌مولکولیِ گفته شده در پروژه، سرعت مولکول را برمی‌گرداند.

باز هم توجه شود که در این فاز پروژه، نیازی به پیاده‌سازیِ هیچ تابعی نیست. تنها مطابق نمونه‌ی مشخص شده در مستطیلِ بالا، تابع را تعریف، نام آن را معین، ورودی‌ها و خروجی‌های آن را مشخص کنید و برای آن داک‌استرینگ بنویسید.