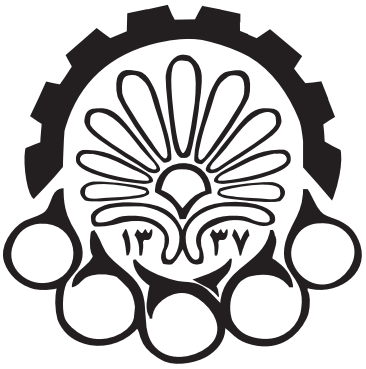


دانشگاه صنعتی امیرکبیر

(پلی‌تکنیک تهران)

دانشکده فیزیک و مهندسی انرژی

گزارشکار

گرایش محاسبات فیزیکی

عنوان

پروژه پایانترم

نگارش

مبین اسعدی

استاد راهنما

دکتر حسین عباسی

مرداد ۱۴۰۳

فهرست مطالب

۱ چکیده **۲**

۲ مقدمه **۳**

۳ مسئله **۴**

۱.۳ کد ۴

۱.۱.۳ Initial coordinate ۴

۲.۱.۳ Random walk update 1 . . . . . ۴

۳.۱.۳ Random walk update 2 . . . . . ۵

۴.۱.۳ Entropy ۵

۵.۱.۳ main ۵

۲.۳ آنتروپی ۵

۴ نتایج **۶**

۱.۴ موقعیت و آنتروپی ۶

۱.۱.۴ حالت اول ۶

۲.۱.۴ حالت دوم ۷

۲.۴ بررسی درستی مدل ۸

۱.۲.۴ پاسخ به سوال ۸

۲.۲.۴ شباهت به انبساط ژول ۸

۵ بهبود شبیه‌سازی **۱۰**

۱.۵ برهم‌کنش‌های مولکولی ۱۰

۱.۱.۵ اندازه قدم‌های متغیر ۱۰

۲.۱.۵ اندازه و شکل مولکول ۱۰

فهرست تصاویر

۱.۴ الف-ج) موقعیت مولکول‌ها در حالت اول، به ترتیب در مرحله ۰ام، ۲۵۰ام، ۵۰۰ام و ۷۵۰ ام ۶
۲.۴ نمودار آنتروپی گاز ۱ بر حسب زمان ۷
۳.۴ الف-ج) موقعیت مولکول‌ها در حالت دوم، به ترتیب در مرحله ۰ام، ۲۵۰ام، ۵۰۰ام و ۷۵۰ ام ۷
۴.۴ نمودار آنتروپی گاز ۱ بر حسب زمان ۸
۵.۴ نمودار آنتروپی شبیه‌سازی انبساط ژول ۹

فصل ۱

چکیده

در این گزارش به مطالعه معادله دیفیوژن[1] می‌پردازیم. برای این منظور، دو مربع هم‌مرکز با اضلاع a و b (که $b > a$ است) را در نظر می‌گیریم. مولکول‌های گاز نوع اول که در ابتدا داخل مربع a قرار دارند را با رنگ آبی و مولکول‌های گاز نوع دوم که در ابتدا در ناحیه بین این دو مربع جای گرفته‌اند را با رنگ قرمز مشخص می‌کنیم. با گذشت زمان، مولکول‌های هر دو نوع گاز به صورت تصادفی یک قدم به سمت راست، چپ، بالا یا پایین حرکت می‌کنند.

موقعیت مولکول‌ها با گذر زمان را رسم می‌کنیم و نهایتاً با استفاده از رابطه گیبس برای آنتروپی، آنتروپی گاز نوع اول را محاسبه می‌کنیم. انتظار داشتیم که آنتروپی با گذشت زمان افزایش یابد و پس از مدتی به یک مقدار ثابت برسد. نتایج ما نشان داد که مدل محاسباتی این انتظار را برآورده می‌کند. همچنین تشابه این مسئله با انبساط ژول نیز مورد بررسی قرار گرفت.

کلیدواژه‌ها: ولگشت تصادفی، آنتروپی، معادله دیفیوژن

[1] Diffusion equation

فصل ۲

مقدمه

فرآیند انتشار مولکول‌های گاز در سیستم‌های بسته و نیمه‌بسته یکی از موضوعات مهم و جالب در فیزیک آماری و دینامیک سیالات است. انتشار مولکول‌های گاز از یک ناحیه با غلظت بالا به نواحی با غلظت پایین، که به عنوان فرآیند دیفیوژن شناخته می‌شود، نقش بسزایی در بسیاری از پدیده‌های طبیعی و صنعتی دارد. این فرآیند می‌تواند درک بهتری از رفتار گازها در محیط‌های مختلف، از جمله جو زمین، محفظه‌های شیمیایی و حتی داخل سلول‌های زیستی فراهم کند.

در این گزارش، به مطالعه انتشار دو نوع گاز در یک سیستم مربعی می‌پردازیم. گاز نوع اول ابتدا در یک ناحیه مربعی کوچکتر در مرکز سیستم قرار دارد، در حالی که گاز نوع دوم در ناحیه بین این مربع و مرزهای سیستم پخش شده است. با گذشت زمان، مولکول‌های هر دو نوع گاز به صورت تصادفی و در جهات مختلف حرکت می‌کنند، که این حرکت به وسیله ولگشت دو بعدی مدل‌سازی می‌شود.

هدف اصلی این مطالعه، تحلیل تغییرات آنتروپی گاز نوع اول در طول زمان و بررسی نتایج دراز مدت این فرآیند انتشار است. آنتروپی، به عنوان یک کمیت ترمودینامیکی، نشان‌دهنده درجه بی‌نظمی و پراکندگی سیستم است. انتظار می‌رود که با گذشت زمان و افزایش اختلاط گازها، آنتروپی سیستم افزایش یابد و به یک مقدار تعادلی برسد.

در این مطالعه، از روش‌های شبیه‌سازی کامپیوتری برای مدل‌سازی حرکت مولکول‌های گاز و محاسبه آنتروپی استفاده شده است. این روش‌ها به ما امکان می‌دهند تا رفتار سیستم را در مقیاس زمانی طولانی‌مدت بررسی کرده و تأثیر عوامل مختلف را بر فرآیند انتشار ارزیابی کنیم.

فصل ۳

روش تحقیق

۱.۳ کد

در این بخش به بررسی مرحله‌به‌مرحله کد مدل می‌پردازیم. برای دیدن بخش‌های کد به فایل کد پیوست شده به این گزارش مراجعه نمایید.

۱.۱.۳ Initial coordinate

این تابع تعداد مولکول‌ها N و ابعاد محفظه‌ای که تمام مولکول‌ها در لحظه اول در آن قرار دارند را به عنوان ورودی دریافت می‌کند و یک دیکشنری حاوی اطلاعات مربوط به موقعیت تصادفی ابتدایی مولکول‌ها را باز می‌گرداند. کلیدهای[1] دیکشنری شماره مولکول و ارزش‌های[2] دیکشنری حاوی موقعیت مولکول در لحظه اول می‌باشند.

تمهیدات برای اینکه فقط یک مولکول می‌تواند در هر خانه قرار بگیرد خانه‌هایی که اشغال می‌شدند را از الگوریتم انتخاب خانه برای مولکول‌های بعدی حذف کردیم. ورودی‌های $width$ و $height$ دو لیست هستند که عدد اول آن‌ها شروع بازه مطلوب و عدد دومشان انتهای بازه را مشخص می‌کند. برای مثال مساحت مجاز برای مولکول نوع دوم به صورت $height = width = [a, b]$ باید بیان شود.

۲.۱.۳ Random walk update 1

این تابع موقعیت مربوط به تمام مولکول‌ها در مرحله قبل را دریافت می‌کنند و با در نظر گرفتن محیط مربع b به عنوان مرز برای گاز نوع اول، به صورت تصادفی مولکول‌های این گاز را یک خانه جابه‌جا می‌کند. در نهایت داده‌های مربوط به موقعیت جدید گاز نوع اول را به روزرسانی می‌کند.

تمهیدات در این تابع بخش «No more than one» بررسی می‌کند که در هر خانه فقط یک مولکول قرار داشته باشد و بخش «boundary check» مربع b را به عنوان مرز برای مولکول‌های گاز ۱ در نظر می‌گیرد.

[1] keys
[2] values

Random walk update 2 ۳.۱.۳

این قسمت همانند ۲.۱.۳ عمل می‌کند با این تفاوت که اطلاعات گاز ۲ را به روزرسانی می‌کند.

تمهیدات تمهیدات در نظر گرفته شده مشابه گاز ۱ است با این تفاوت که در بخش «boundary check» مساحت مجاز برای گاز دوم بین دو مربع در نظر گرفته شده‌است.

Entropy ۴.۱.۳

در این بخش با استفاده از موقعیت مولکول‌های گاز ۱، انتروپی را محاسبه می‌شود. بدین منظور ابتدا تعدادی خانه بر روی مربع b تعریف شده و تعداد مولکول‌های موجود در آن را شمرده می‌شود و احتمال حضور در آن خانه را بدست می‌آید. سپس با استفاده از معادله ۲.۳ انتروپی گاز ۱ محاسبه می‌شود. برای توضیحات بیشتر مربوط به فیزیک انتروپی به بخش ۲.۳ مراجعه نمایید.

main ۵.۱.۳

تابع اصلی برنامه وظیفه دارد با دریافت تعداد مراحل، تعداد مولکول گاز ۱ و مولکول گاز ۲ نمودار موقعیت مولکول‌ها و انتروپی-زمان را رسم کند.

۲.۳ آنتروپی

برای محاسبه آنتروپی کل، مساحت مورد نظرـمساحت مربع به ضلع bـ را به تعدادی خانه تقسیم می‌کنیم. با شمارش تعداد مولکول‌های داخل هر خانه و تقسیم آن به تعداد کل مولکول‌ها احتمال p_i را بدست می‌آوریم.

$$p_i = \frac{N_i}{N} \tag{۱.۳}$$

که در آن p_i احتمال حضور یک مولکول در خانه iام می‌باشد. بر این اساس آنتروپی گاز ۱ با استفاده از رابطه گیبس برای آنتروپی محاسبه می‌شود.

$$\Delta S = -k_B \sum_i p_i ln(p_i) \tag{۲.۳}$$

فصل ۴

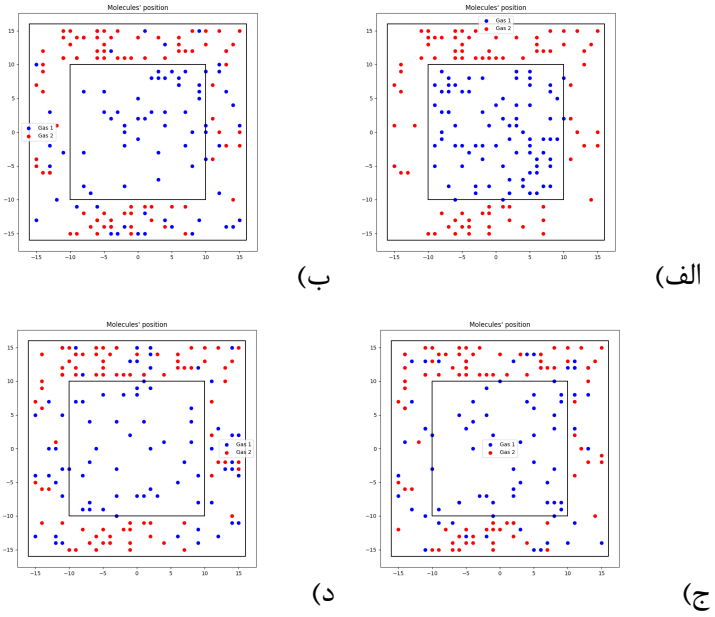
نتایج

در این بخش طول ضلع دو مربع را $b = 31$ و $a = 21$ در نظر می‌گیریم. همچنین در این بخش منظورمان از یک ثانیه مدت زمانی است که طول می‌کشد تا تمامی مولکول‌ها یک قدم حرکت کنند.

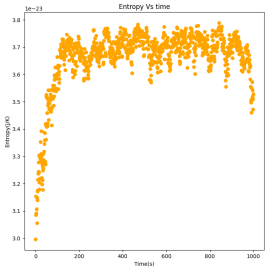
۱.۴ موقعیت و آنتروپی

۱.۱.۴ حالت اول

با فرض اینکه تعداد مولکول‌های گاز نوع ۱ و ۲ برابر ۸۰ باشد، نمودار موقعیت این حالت در فواصل ۲۵۰ قدمی به صورت زیر است. نمودار آنتروپی گاز ۱ در این حالت در شکل ۱.۱.۴ آمده‌است.



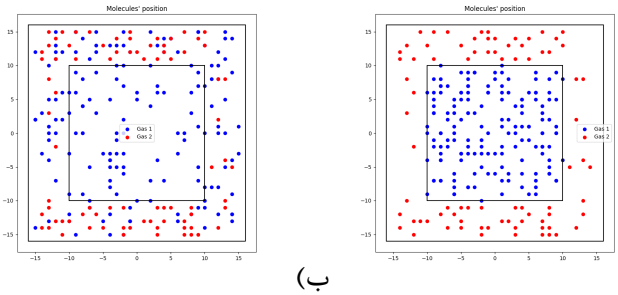
شکل ۱.۴: الف-ج) موقعیت مولکول‌ها در حالت اول، به ترتیب در مرحله ۰ام، ۲۵۰ام، ۵۰۰ام و ۷۵۰ ام



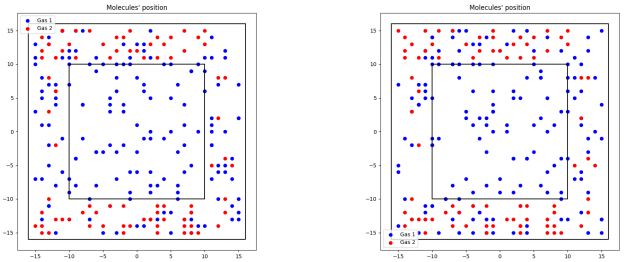
شکل ۲.۴: نمودار آنتروپی گاز ۱ بر حسب زمان

۲.۱.۴ حالت دوم

با فرض اینکه تعداد مولکول‌های گاز نوع ۱ برابر ۱۸۰ و گاز ۲ برابر ۸۰ باشد، نمودار موقعیت این حالت در فواصل ۲۵۰ قدمی به صورت زیر است.



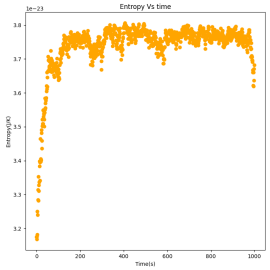
الف) ب)



ج) د)

شکل ۳.۴: الف-ج) موقعیت مولکول‌ها در حالت دوم، به ترتیب در مرحله ۰ام، ۲۵۰ام، ۵۰۰ام و ۷۵۰ ام

نمودار آنتروپی گاز ۱ در این حالت در شکل ۲.۱.۴ آمده‌است.



شکل ۴.۴: نمودار آنتروپی گاز ۱ بر حسب زمان

۲.۴ بررسی درستی مدل

۱.۲.۴ پاسخ به سوال

در زمان‌های طولانی آنتروپی چگونه رفتار می‌کند؟ از شهود فیزیکی مسئله انتظار داریم که در ابتدا آنتروپی افزایش پیدا کند. این رفتار با گذشت زمان تغییر می‌کند چونکه پس از مدتی گاز ۱ در تمام محفظه پخش می‌شود و کل سیستم به حالت تعادل می‌رسد. در نتیجه انتظار می‌رود با گذشت زمان آنتروپی به یک مقدار تقریباً ثابت میل کند و ثابت شود.
همانطور که از نمودارهای حالت اول و دوم (شکل‌های ۱.۱.۴ و ۲.۱.۴) مشخص است، رفتار مدل مشابه توصیف فیزیکی‌ما از مسئله است. این رفتار سازگاری مدل با واقعیت را تأیید می‌کند.

۲.۲.۴ شباهت به انبساط ژول

مسئله‌ی ما شباهت بسیاری به انبساط ژول[1] دارد. در این انبساط دو محفظه هم حجم منزوی که با استفاده از یک لوله به یکدیگر متصل شده‌اند، در نظر گرفته می‌شوند. در ابتدا یک مول گاز در محفظه شماره ۱ قرار دارد و در محفظه شماره ۲ خلاء است. ناگهان شیر لوله متصل کننده این دو محفظه را باز می‌کنیم تا گاز از محفظه ۱ به ۲ منتقل شود.

محاسبه آنتروپی انبساط ژول

برای محاسبه آنتروپی این فرآیند از دیدگاه آماری استفاده می‌کنیم. هر یک از مولکول‌های گاز در محفظه ۱ یا در محفظه ۲ قرار دارد. از این رو برای هر کدام از مولکول‌ها دو انتخاب داریم. به عبارتی دیگر:

$$\Omega = 2^{N_A} \tag{۱.۴}$$

که در N_A همان عدد آووگادرو است. پس برای آنتروپی داریم:

$$\Delta S = k_B ln(\Omega) = k_B N_A ln(2) = R ln(2) \tag{۲.۴}$$

[1] Joule expansion

آنتروپی گاز شماره ۱

برای اینکه آنتروپی گاز شماره ۱ را محاسبه کنیم، از همان ایده استفاده شده در انبساط ژول بهره می‌بریم. در مسئله ما در لحظه اول تمام گاز ۱ در محفظه a قرار دارد اما با گذر زمان آزاد است در تمام فضای b حرکت کند. این موضوع شباهت مسئله ما با انبساط ژول را آشکار می‌سازد. در این مسئله نیز باید دو حالت زیر را در نظر بگیریم.

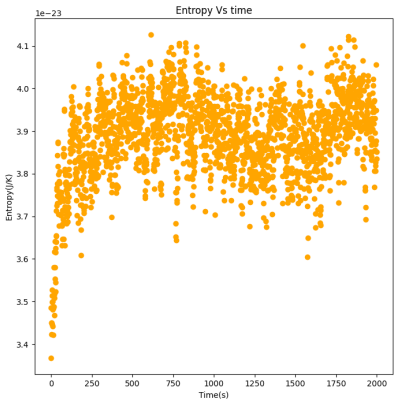
۱. گاز داخل فضای محفظه a قرار دارد.

۲. گاز بین محفظه a و b قرار دارد

پس تعداد کل ماکرواستیت‌ها مشابه عبارت ۱.۴ قابل محاسبه است. با جایگذاری اعداد در معادله آنتروپی داریم و در نظر گرفتن $N = 80$ مولکول داریم:

$$\Delta S = k_B ln(\Omega) = k_B N_A \frac{N}{N_A} ln(2) \approx 76.6 * 10^{-23} J/K \tag{۳.۴}$$

با در نظر گرفتن این مفروضات نتیجه بدست آمده برای آنتروپی مطابق شکل زیر می‌باشد.



شکل ۵.۴: نمودار آنتروپی شبیه‌سازی انبساط ژول

عدد بدست آمده از طریق مدل حدودا $3.9 * 10^{-23} J/K$ است که با تئوری سازگار می‌باشد. این تشابه محاسباتی نیز می‌تواند تأییدی بر سازگاری مدل با واقعیت فیزیکی تلقی شود.

فصل ۵

بهبود شبیه‌سازی

برای واقعی‌تر کردن شبیه‌سازی، می‌توان چندین بهبود و عوامل اضافی را که شرایط فیزیکی را بهتر نشان می‌دهند، اعمال کرد. در زیر به چند مورد از این بهبودها اشاره می‌شود:

۱.۵ برهم‌کنش‌های مولکولی

اثر برخورد: طبیعتاً مولکول‌های گاز هنگامی که به یکدیگر نزدیک می‌شودن به خاطر نیروی الکترومغناطیسی بینشان از یکدیگر تأثیر می‌پذیرند. در این مدل ارائه شده این اثر در نظر گرفته نشده‌است و هنگامی که ولگشت تصادفی در جهتی حرکت کند که یک مولکول دیگر در مجاورت آن قرار داشته باشد، ولگشت مجدداً انجام می‌شود و این جهت از انتخاب‌ها حذف می‌شود.

راه حل: می‌توان این برخورد را به این شکل در نظر گرفت که اگر مولکولی به سمت یک مولکول دیگر حرکت کند، آن مولکول را در آن راستا به یک خانه دورتر پرت کند.

۱.۱.۵ اندازه قدم‌های متغیر

اثر دما: با افزایش دمای گاز سرعت حرکت مولکول‌های آن افزایش می‌یابد. با استفاده از این موضوع می‌توان در مدل دمای دو گاز را متفاوت در نظر گرفت. برای این منظور می‌توان اینگونه فرض کرد که مولکول‌های یکی از گازها در یک ثانیه فقط یک قدم جابه‌جا می‌شوند در صورتی که مولکول‌های گاز دیگر بیش از یک قدم جابه‌جا می‌شوند.

۲.۱.۵ اندازه و شکل مولکول

اثر اندازه: این تصحیح مشابه ۱.۵ است. اگر یکی از گازها سنگین تر از دیگری باشد، تعداد اتم‌های سازنده آن بیشتر است و احتمالاً نیروی کولونی قوی‌تری هم دارد. در نتیجه این اثر را می‌توان بزرگتر در نظر گرفتن اندازه مولکول در نظر گرفت. بدین معنی که یک مولکول بر خلاف این مدل، بیشتر از یک خانه را اشغال کند.