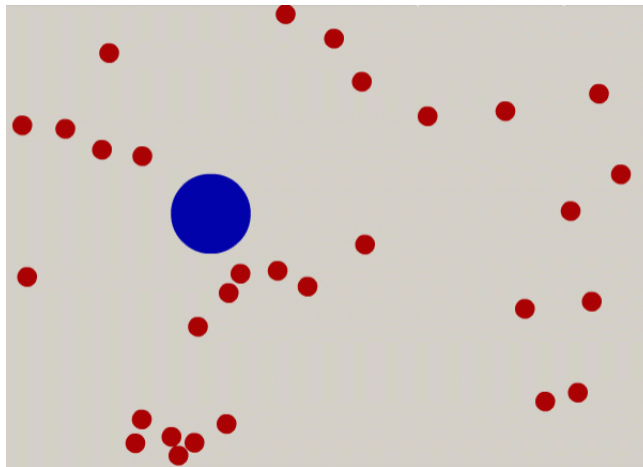


ماهیت اتمی ماده

پروژه درس برنامه‌سازی پیشرفته با پایتون

تأکید دوباره بر ماهیت اتمی مواد با ردیابی حرکات ذرات تحت حرکت براونی، مطابقت دادن داده‌ها با مدل انیشتین و تخمین عدد آووگادرو.

دیدگاه تاریخی. اتم نقش مهمی در فیزیک و شیمی قرن بیستم داشته است، اما وجود اتم‌ها و مولکول‌ها تا سال ۱۹۰۸ به طور عمومی پذیرفته نشده بود. در سال ۱۸۲۷ گیاه‌شناسی به نام رابرت براون از طریق مشاهده حرکت گرده‌های بید شناور در آب، به حرکت نامنظم تصادفی ذرات میکروسکوپی پی برد. این حرکت بعدها به عنوان حرکت براونی شناخته شد. اینشتین فرض کرد که این حرکت نتیجه برخورد میلیون‌ها ذره کوچک‌تر (اتم و مولکول) با ذرات بزرگ‌تر است.



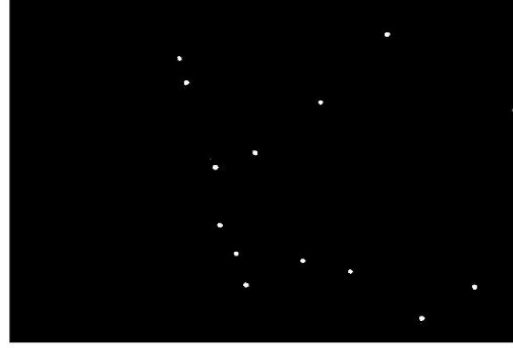
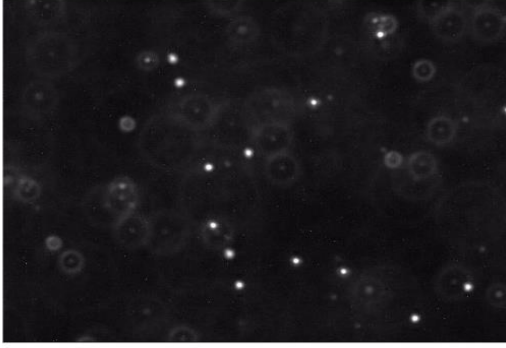
انیشتین در یکی از مقالات «سال معجزه‌آسا»یش (۱۹۰۵) یک نظریه کمی از حرکت براونی را در تلاش برای توجیه «وجود اتم‌ها با اندازه محدود مشخص» تدوین کرد. نظریه او امکان ایجاد آزمایش‌هایی را با روشی برای شمارش مولکول‌ها توسط یک میکروسکوپ معمولی و به وسیله مشاهده اثر جمعی آن بر یک ذره غوطه‌ور بزرگ‌تر،

فراهم کرد. در ۱۹۰۸ ژان باپتیست پرن، از اولترا میکروسکوپ که به تازگی اختراع شده بود، استفاده کرد تا به صورت تجربی نظریه جنبشی حرکت براونی انیشتین را تایید کند. در نتیجه، وی اولین مدرک رسمی را که از ماهیت اتمی ماده حمایت می‌کرد فراهم آورد. آزمایش او همچنین یکی از اولین تخمین‌های عدد آگوادرو را ارائه داد. پرن به خاطر انجام این کار، برنده جایزه نوبل سال ۱۹۲۶ در فیزیک شد.

مسئله. در این پروژه، شما یک نسخه از آزمایش پرن را تکرار خواهید کرد. کار شما در اینجا بسیار ساده شده است؛ زیرا با فناوری مدرن ویدیو و کامپیوتر (و در کنار آن، مهارت‌های برنامه‌نویسی شما)، امکان اندازه‌گیری دقیق و ردیابی حرکت یک ذره غوطه‌ور در حرکت براونی وجود دارد. ما نمونه‌های میکروسکوپی تصویری را از کره‌های پلی‌استایرن «بید» که در آب و با حرکت براونی به حالت شناور درآمده است، در اختیارتان قرار می‌دهیم. وظیفه شما نوشتن یک برنامه برای تجزیه و تحلیل این داده‌ها، تعیین میزان حرکت بیدها در بین مشاهدات، مطابقت این نمونه‌ها با مدل انیشتین و تخمین عدد آووگادرو است.

نمونه‌ها. ما ۱۰ مجموعه داده داریم که توسط ویلیام ریو با استفاده از تصویربرداری فلورسنت جمع‌آوری شده است. هر مجموعه داده در یک پوشه (به نام run-1 تا run-10) ذخیره شده و شامل یک دنباله از دویست تصویر رنگی ۶۴۰×۴۸۰ (با نام frame00000.jpg تا frame00199.jpg) است.

در داده‌هایی که در اختیار شما قرار داده شده است، یک فیلم از چند بید که در حال حرکت براونی هستند، آورده شده است. در زیر، یک تصویر خام معمولی (چپ) و یک نسخه تمیز شده (راست) با استفاده از حد آستانه که در زیر توضیح داده شده، دیده می‌شود.



هر تصویر یک مقطع دو بعدی از یک اسلاید میکروسکوپ را نشان می‌دهد. بیدها به سمت داخل و خارج از میدان دید (جهت X و Y) حرکت می‌کنند. همچنین بیدها در جهت Z نیز حرکت می‌کنند، بنابراین می‌توانند در عمق کانون عدسی نیز قرار بگیرند و یا خارج شوند. این امر می‌تواند منجر به ایجاد هاله و حتی محو شدن کامل بیدها از تصویر شود.

I. شناسایی ذرات. اولین چالش، شناسایی بیدها در میان نمونه‌های نویزی است. هر تصویر ۶۴۰ در ۴۸۰ پیکسل است و هر پیکسل با یک شی `Color` نشان داده می‌شود که باید به مقدار درخشندگی بین صفر (سیاه) و ۲۵۵ (سفید) تبدیل شود. پیکسل‌های سفیدتر به بیدها (پیش‌زمینه) و پیکسل‌های سیاه‌تر به آب (پس‌زمینه) مربوط می‌شوند. ما مسئله را به سه بخش تقسیم می‌کنیم: (i) خواندن تصویر، (ii) دسته‌بندی پیکسل‌ها به عنوان پیش‌زمینه یا پس‌زمینه؛ (iii) یافتن دسته‌هایی از پیکسل‌ها به شکل دیسک که تشکیل دهنده بیدها هستند.

- **خواندن تصویر.** از نوع داده `Picture` مطرح شده در بخش ۱-۳ برای خواندن تصویر استفاده کنید.
- **دسته‌بندی پیکسل‌ها به عنوان پیش‌زمینه یا پس‌زمینه.** ما از یک روش ساده اما موثر استفاده می‌کنیم که به عنوان آستانه‌گذاری جدا کردن پیکسل‌ها در پیش‌زمینه و پس‌زمینه شناخته می‌شود:

تمام پیکسل‌هایی که دارای مقدار درخشندگی تک‌رنگ کوچک‌تر از مقدار آستانه تاو هستند، پس‌زمینه و بقیه به عنوان پیش‌زمینه در نظر گرفته می‌شوند. دو تصویر بالا نشانگر تصویر اصلی (بالا سمت چپ) و همان تصویر پس از آستانه‌گذاری (بالا سمت راست)، با استفاده از مقدار تاو برابر با ۱۸۰,۰ هستند.

- **پیدا کردن بلاب‌ها.** بید پلی استاین توسط یک شکل دیسک مانند که حداقل با کمترین میزان `min_pixels` (معمولاً ۲۵) پیکسل پیش‌زمینه متصل به هم است، نشان داده می‌شود. یک مولفه متصل یا بلاب، یک مجموعه بیشینه از پیکسل‌های متصل به هم در پیش‌زمینه بدون در نظر گرفتن شکل و اندازه آن است. ما هر بلابی که حداقل تعداد پیکسل را داشته باشد (مثلاً ۲۵ پیکسل)، به عنوان بید در نظر خواهیم گرفت. مرکز بلاب (یا بید) میانگین مختصات `x` و `y` پیکسل‌های تشکیل دهنده آن است.

یک نوع داده‌ای کمکی `Blob` ایجاد کنید که دارای `API` زیر است.

<i>operation</i>	<i>description</i>
<code>Blob()</code>	ایجاد یک بلاب خالی
<code>b.add(x, y)</code>	اضافه کردن پیکسل (x, y) به بلاب <code>b</code>
<code>b.mass()</code>	جرم بلاب (تعداد پیکسل‌های بلاب)
<code>b.distanceTo(c)</code>	فاصله اقلیدسی میان مرکز دو بلاب <code>b</code> و <code>c</code>
<code>str(b)</code>	ایجاد یک بازنمایی رشته‌ای از بلاب <code>b</code> (به توضیحات زیر مراجعه کنید)

همچنین یک تابع `main()` به منظور آزمایش تمامی متدهای تعریف شده در این `API` بنویسید.

tau

بازنمایی رشته‌ای. متد $\text{str}(b)$ یک رشته شامل جرم بلاب (یک عدد صحیح بیانگر تعداد پیکسل‌های بلاب)، سپس یک فاصله، سپس مختصات x و y مرکز بلاب (محصور در پرانتز و جدا شده با یک ویرگول و فاصله، با دقت چهار رقم اعشار) برمی‌گرداند. به مثال زیر که بیانگر یک بلاب شامل ۳۱ پیکسل و به مرکز $(370.9355, 365.4194)$ است توجه کنید:

31 (370.9355, 365.4194)

توجه. سازنده و متدها باید پیچیدگی زمانی ثابتی داشته باشند.

سپس، یک نوع داده‌ای با نام `BeadFinder` بنویسید که `API` زیر را دارد. از جستجوی بازگشتی اول عمق برای شناسایی بلاب‌ها و بیدها به شیوه موثر استفاده کنید (به پروژه تراوش مراجعه نمایید. در آن پروژه شبیه همین کار را برای یافتن یک مسیر باز از خانه‌های سطر اول گرید به خانه‌های سطر آخر آن انجام دادیم).

<i>operation</i>	<i>description</i>
<code>BeadFinder(picture, tau)</code>	یافتن تمامی بلاب‌ها در تصویر مشخص شده با استغاره از مقدار آستانه τ
<code>bf.getBeads(min_pixels)</code>	برگرداندن یک لیست شامل تمامی بیدها (بلاب‌هایی که تعداد پیکسل‌های آنها بزرگ‌تر یا مساوی min_pixels است)

همچنین یک تابع `main()` به منظور آزمایش این `API` بنویسید. تابع `main()` عدد صحیح `min_pixels`، عدد اعشاری `tau` و نام تصویر ورودی را به عنوان آرگومان‌های خط فرمان دریافت می‌کند و سپس یک شی `BeadFinder` را با مقدار آستانه `tau` ایجاد می‌کند؛ سپس تمام بیدها را (که شامل حداقل

beadfinder.py min_pixels (چاپ می‌کند. در ادامه، یک نمونه از اجرای ماجول

به منظور راهنمایی شما آمده است :

```
% python beadfinder.py 0 180.0 run_1/frame00001.jpg
```

```
29 (214.7241, 82.8276)
36 (223.6111, 116.6667)
1 (254.0000, 223.0000)
42 (260.2381, 234.8571)
35 (266.0286, 315.7143)
31 (286.5806, 355.4516)
37 (299.0541, 399.1351)
35 (310.5143, 214.6000)
31 (370.9355, 365.4194)
28 (393.5000, 144.2143)
27 (431.2593, 380.4074)
36 (477.8611, 49.3889)
38 (521.7105, 445.8421)
35 (588.5714, 402.1143)
13 (638.1538, 155.0000)
```

```
% python beadfinder.py 25 180.0 run_1/frame00001.jpg
```

```
29 (214.7241, 82.8276)
36 (223.6111, 116.6667)
42 (260.2381, 234.8571)
35 (266.0286, 315.7143)
31 (286.5806, 355.4516)
37 (299.0541, 399.1351)
35 (310.5143, 214.6000)
31 (370.9355, 365.4194)
28 (393.5000, 144.2143)
27 (431.2593, 380.4074)
36 (477.8611, 49.3889)
38 (521.7105, 445.8421)
35 (588.5714, 402.1143)
```

در تصویر نمونه run_1/frame00001.jpg، ۱۵ بلاک وجود دارد که ۱۳ تای آنها بید هستند (شامل

حداقل ۲۵ پیکسل هستند).

II. ردیابی ذرات. گام بعدی تعیین میزان حرکت بید در بازه زمانی t تا $t + \Delta t$ است. برای نمونه‌های ما

$\Delta t = 0.5$ ثانیه بین فریم‌ها وجود دارد. فرض کنید که نمونه‌ها به گونه‌ای هستند که هر بید به مقدار نسبتاً

کوچکی حرکت می‌کند و این بیدها هرگز با یکدیگر برخورد نمی‌کنند. (با این حال باید توجه داشته باشید که

احتمال می‌رود که بید از فریم یا با خروج میدان دید میکروسکوپ در جهت X یا Y یا حرکت در عمق کانون

عدسی میکروسکوپ در جهت Z خارج شود) بنابراین، برای هر بید در زمان $t + \Delta t$ ، نزدیک‌ترین بید را در زمان

t (با فاصله اقلیدسی) پیدا کنید و این دو را به عنوان یک بید مشخص کنید. با این حال، اگر فاصله خیلی بزرگتر از دلتا پیکسل باشد، فرض کنید که یکی از بیدها، سفر خود را آغاز کرده یا به پایان رسانیده است.

تابع `main()` را در `BeadTracker` به صورتی بنویسید که عدد صحیح `min_pixels`، عدد اعشاری `tau`، عدد اعشاری `delta` و دنباله‌ای از نام‌های تصاویر را به عنوان آرگومان‌های خط فرمان دریافت کند؛ بیدها را برای هر تصویر (توسط `BeadFinder`) شناسایی کند (با استفاده از مقادیر مشخص `min_pixels` و `tau`)؛ و فاصله‌ای را که هر بید از یک فریم به فریم بعدی طی می‌کند را (با فرض اینکه فاصله نمی‌تواند بیشتر از `delta` باشد) چاپ کند. شما این کار را برای بیدهای هر جفت فریم متوالی با چاپ هر فاصله‌ای که می‌یابید انجام خواهید داد. در ادامه یک نمونه از اجرای ماجول `beadtracker.py` به منظور راهنمایی شما آمده است :

```
% python beadtracker.py 25 180.0 25.0 run_1/*.jpg
7.1833
4.7932
2.1693
5.5287
5.4292
4.3962
...
```

توجه: با این روش، نیازی به ساختن یک ساختار داده‌ای نیست که یک بید مشخص را از طریق یک توالی از فریم‌ها دنبال کند.

III. تحلیل داده‌ها. نظریه حرکت براونی انیشتین خواص میکروسکوپی (به عنوان مثال، شعاع، نفوذ) بیدها را به خواص ماکروسکوپی (به عنوان مثال، دما، گران‌روی) مایعی که بیدها در آن غوطه‌ور هستند مرتبط می‌کند. این نظریه شگفت‌انگیز به ما این امکان را می‌دهد که عدد آووگادرو را با مشاهده اثر جمعی میلیون‌ها مولکول آب روی بیدها توسط یک میکروسکوپ معمولی تخمین بزنیم.

❖ تخمین ثابت خود انتشاری. ثابت خود انتشاری D ، حرکت تصادفی یک مولکول (بید) را از طریق یک سیال همگن (مولکول‌های آب) به عنوان نتیجه انرژی گرمایی تصادفی توصیف می‌کند. معادله اینشتین - اسمولاجوفسکی بیان می‌کند که جابه‌جایی تصادفی بید در یک بعد، یک توزیع گاوسی با میانگین صفر و واریانس $\sigma^2 = 2 D \Delta t$ دارد، که در آن Δt فاصله زمانی بین اندازه‌گیری موقعیت است. به این معنا که میانگین جابه‌جایی یک مولکول صفر است و میانگین مربع جابه‌جایی آن با زمانی که بین اندازه‌گیری‌ها است (با ضریب ثابت $2D$) متناسب است. ما σ^2 را با محاسبه واریانس تمامی جابه‌جایی بیدها در جهت‌های x و y تخمین می‌زنیم. اگر $(\Delta x_1, \Delta y_1), \dots, (\Delta x_n, \Delta y_n)$ بیانگر جابه‌جایی n بید و r_1, \dots, r_n بیانگر جابه‌جایی شعاعی باشد. آنگاه:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(\Delta x_1^2 + \dots + \Delta x_n^2) + (\Delta y_1^2 + \dots + \Delta y_n^2)}{2n} = \frac{r_1^2 + \dots + r_n^2}{2n}$$

برای داده‌های ما $\Delta t = 0.5$ است؛ بنابراین $\hat{\sigma}^2$ یک تخمین برای D است.

توجه داشته باشید که جابه‌جایی شعاعی در رابطه بالا برحسب متر اندازه‌گیری می‌شود. تغییرات شعاعی خروجی توسط برنامه `beadtracker.py` شما برحسب پیکسل است. برای تبدیل از پیکسل به متر، در 0.175×10^{-6} ضرب کنید (متر در هر پیکسل).

تخمین ثابت بولتزمن. رابطه استوکس - انیشتین ادعا می‌کند که ثابت خود انتشاری یک ذره کروی که در سیال غوطه‌ور شده است، توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta\rho}$$

که برای نمونه‌های ما:

$$D = T \circ = 297 \text{ کلوین (دمای اتاق)}$$

$$\eta = 9.135 \times 10^{-4} \text{ N.s.m}^{-2} \text{ اتاق در دمای آب در ویسکوزیته}$$

$$\rho = 0.5 \times 10^{-6} \text{ متر} = \text{شعاع بید}$$

و k ثابت بولتزمن است. تمامی پارامترها در واحدهای SI ارائه می‌شوند. ثابت بولتزمن یک ثابت فیزیکی بنیادی است که متوسط انرژی جنبشی یک مولکول را به دمای آن مرتبط می‌سازد. ما k را با محاسبه تمام پارامترها توسط معادله استوکس - انیشتین و حل آن برای k تخمین می‌زنیم.

❖ **تخمین عدد آووگادرو.** عدد آووگادرو N_A به عنوان تعداد ذرات در مول تعریف می‌شود. با تعریف $k =$

R / N_A که در آن ثابت جهانی گاز R برابر است با $8,31446$ ؛ از R / k به عنوان تخمینی از عدد آووگادرو

استفاده می‌کند.

به عنوان بخش آخر، تابع `main()` را در `avogadro.py` به شکلی بنویسید که جابه‌جایی شعاعی

(r_1, r_2, r_3, \dots) را از ورودی استاندارد خوانده و ثابت بولتزمن و عدد آووگادرو را با استفاده از روابطی که در بالا

شرح داده شد تخمین بزنند.

```
% more displacements-run_1.txt
7.1833
4.7932
2.1693
5.5287
5.4292
4.3962
...

% python Avogadro.py < displacements-run_1.txt
Boltzmann = 1.2535e-23
Avogadro = 6.6329e+23

% python beadtracker.py 25 180.0 25.0 run_1/*.jpg | python Avogadro.py
Boltzmann = 1.2535e-23
Avogadro = 6.6329e+23
```

قالب خروجی. همه جا از چهار رقم دقت بعد از اعشار استفاده کنید.

نمونه‌ها. شما می‌توانید مجموعه داده‌ها و فایل‌های کمکی دیگر را از `atomic.zip` دانلود کنید.

آنچه باید تحویل دهید. شما باید فایل‌های `blob.py`، `beadfinder.py`، `beadtracker.py` و `avogrado.py` را در یک پوشه با شماره دانشجویی خود ارسال کنید.