



ارائه شده توسط:

سایت ترجمه فا

مرجع جدیدترین مقالات ترجمه شده

از نشریات معتبر

عنوان: مطالعات شبیه سازی مجموعه گزند کانونیکال سیالات پلی دیسپرس

چکیده:

ما یک شکل مونته کارلو برای شبیه سازی سیالات پلی دیسپری در مجموعه گزند کانونیکال توصیف کردیم. با توجه به برخی ویژگی های σ پلی دیسپرس، حالت سیستم توسط یک توزیع $\rho(\sigma)$ توصیف شد که شکل توسط توزیع پتانسل شیمیایی تحمیلی کنترل شد. $\mu(\sigma)$ ما به تفصیل شرح دادیم که چگونه تکنیکهای برون یابی هیتسوگرام می توانند برای اهنگ $\mu(\sigma)$ مثل عبور از برخی مسیرهای مطلوب خاص در فضای $\rho(\sigma)$ روش در شبیه سازی کره های سخت توزیع اندازه با چگالی های توزیع شده بر طبق شکل های اسکولز و \log -normal بکار برده شد در هر دو معادله ی حالت در طول خط ترقیق بدست آمد یعنی مسیری که مقیاس $\rho(\sigma)$ تغییر میکند نه شکل آن. نتیج با بیان های منصوری و همکارانشو $salacus$ و $stwill$ مقایسه شدند. دریافت شد که برای درجات بالایی از پلی دیسپرسیتس دو عبارت برای ارائه یک توصیف دقیق کمی از معالده حالت با شکست مواجه می شوند. یعنی وقتی کسر حجمی کل بزرگ است.

مقدمه:

مکانیک آماری در ابتدا برای توصیف خواص سیستم های بازداري با ذرات یکسان همچون اتم ها یا مولکول های کوچک تعریف شد. اگر چه بسیاری از مواد مهم صنعتی و تجاری در این طبقه بندی ساده جای نمی گیرند. برای مثال ذرات در یک سوسپانسیون کلوئیدی هرگز دقیقا همانند دیگری نیستند اما یک محدوده ای از شعاع ها را شامل می شوند. این وابستگی خواص ذرات به یک تا تعدا بیشتری پارامتر پیوسته به عنوان دیسپرسیتی شناخته شده است.

برای پردازش یک ماده ی کلوئیدی نیاز است که از رفتار فازی آن آگاه باشیم این یعنی تحت شرایط دما و فشار که ساختار مذکور از لحاظ ترمودینامیکی پایدار است. مانع اصلی برای کسب این اطلاعات از تعداد نامحدود ذرات حاضر در یک سیستم بس پاشیده ناشی می شود. طبقه بندی این ها بوسیله علامت σ بس پاشیدگی پیوسته، حالت سیستم بوسیله یک توزیع متراکم $\rho(\sigma)$ بیشتر از یک تعداد محدود متغیرهای متراکم

باشد. بنابراین دیاگرام فازی دارای ابعاد نامتناهی است، یک ویژگی که مشکلات جدی را هم برای تجربی و هم برای تئوری ایجاد می‌کند. در راس مشکلات پیشرو در مطالعات تجربی سیستم‌های پلی دیسپرس، ابعاد بی‌نهایت دیاگرام فاز است که یک نقشه کامل از رفتار فازی می‌باشد. در عوض با تعدا کمتر ابعاد ویژه‌ی دیاگرام مواجه هستیم. معمولاً این مشکل خواص سیستم به همراه برخی مسیرهای مطلوب در طول فاصله $\rho(\sigma)$ را تعیین می‌کند.

یک چنین استراتژی اغلب در آزمایشات روی سوسپانسیون کلئیدی دنبال می‌شود. که طی آن رفتار فازی مطالعه می‌شود که به اصطلاح خط رقت نامیده می‌شود. روند تجربی برای ردیابی این خط شامل افزایش یک کمیت تعیین شده‌ی کلئیدی برخی درجه‌های شناخته شده‌ی پلی دیسپرس به یک ظرف با حجم ثابت V می‌باشد، حجم باقیمانده توسط یک حلال اشغال می‌شود. تعدا توزیع ذرات کلئیدی $N(\sigma)$ تراکم توزیع سوسپانسیون $\rho(\sigma) = N(\sigma)/V$ را مشخص می‌کند.

از آنجایی که در یک ماده داده شده با حجم نسبی تعدا ذرات هر σ ثابت است، تغییر مقدار کلئید اضافه شده به سادگی مقیاس $\rho(\sigma)$ را تغییر می‌دهد نه شکل آنرا. بنابراین با تغییر $N(\sigma)$ در حجم ثابت (یا برعکس) می‌توان مکان هندسی در دیاگرام فاز را برون‌یابی کرد که تنها مقیاس کلی $\rho(\sigma)$ تغییر می‌کند.

همزمان با در نظر گرفتن مطالعات محاسباتی رفتار فازی، این تلاش‌ها برای محاسبه انرژی آزاد سیستم به عنوان تابعی از یک سری متغیرهای متراکم انجام می‌شود. سختی دستیابی به این فرآیند برای یک سیستم پلی دیسپرس است که انرژی آزاد $f(\rho(\sigma))$ تابعی از $\rho(\sigma)$ می‌باشد، بنابراین حضور یک فضای نامحدود اشغال می‌کند. این امر ما را مجبور به شناختن مرزهای فازی، همچنین مجبور به متوسل شدن به شکل‌های تقریبی می‌کند. از بین این‌ها، شاید ساده‌ترین کار این است که تقریب واندروالس را به سیستم‌های پلی دیسپرس عمومیت دهیم. یک روش پیچیده‌تر شامل تقریب انرژی آزاد کل توسط انرژی آزاد لحظه‌ای است که شامل کل سهم گاز ایده‌آل به اضافه‌ی یک بخش مازاد است. که تنها به برخی لحظات مهم کل انرژی آزاد مازاد وابسته است. انجام اینکار مشکل متعدد متغیرها را با محدود کردن آنها کاهش می‌دهد و اجازه‌ی محاسبه

همزمان خواص فاز را با یک شکل تقریبی معین فراهم می‌کند. به علاوه محاسبات برای انرژی آزاد شده نتایج واقعی تری را برای موقعیت اسپینودال‌ها، نقاط بحرانی و منحنی‌های سایه و ابر ارائه می‌دهد. با استفاده از این خط مشی انتظار داریم که در کمان از رفتار خازنی سیستم‌های پلی دیسپرس به اندازه‌ی کافی بالا رود. با در نظر گرفتن تقریب ذاتی در رویکرد محاسباتی، در نظر گرفتن توسعه‌ی شبیه‌سازها برای مطالعه‌ی رفتار خازنی سیال‌های کلئیدی پلی دیسپرس طبیعی هست. هرچند شبیه‌سازها (مشابه تجربه) به مطالعه‌ی مناطق محدود دیاگرام خازنی همچون خط رقت محدود می‌شوند، آنها این مزیت را دارند که بتواند برای بررسی سیستم‌های با مدل‌ها مشابه همزمان با مطالعات محاسباتی استفاده شوند. به علاوه آنها نتایج واقعی ضروری (اثرات محدود - اندازه) را ارائه می‌کند. همچنین معیارهای پرهزینه برخلاف پیش‌بینی‌های محاسباتی فراهم می‌کنند. گاهی اوقات نیز، دیدگاه فیزیکی ناشی از شبیه‌سازی به عنوان نیروی جلو برنده برای پیشرفت‌های محاسباتی تازه به کار می‌رود.

یک روش شبیه‌سازی برای بدست آوردن خواص ترمودینامیکی یک سیستم پلی دیسپرس، تقطیر ساده از روند تجربی است که می‌توان توسط به‌کارگیری یک مجموعه‌ی کانونیکال فرمالیته (CE) به این منظور دست یافت. طوری که یک جعبه با جچم ثابت V که توسط سک تعدا از ذرات N پر شده، شبیه‌سازی می‌شود. بنابراین ذرات $N(\sigma)$ مطلوب توزیع شده‌اند. در عمل واضح است که مجموعه‌ی کانونیکال رفتاری از چارچوب مطلوب برای شبیه‌سازی سیال‌های دیسپرس نشان می‌دهد. مشکل اصلی اینجاست که محدوده‌ی تعدا ذرات محاسباتی در دستری که در هر شبیه‌سازی وجود دارد از نظر بزرگی، خیلی کوچکتر است از آنچه که در تجربه بدست آمده است. اثرات سایز محدود بدست آمده در یک شبیه‌سازی مجموعه کانونیکال به‌طور ویژه‌ای مشخص است. زیرا درک معین از اختلاف $N(\sigma)$ ثابت است. که نوسانات بزرگ را در $\rho(\sigma)$ سرکوب می‌کند و ذاتا منجر به کمبود نمونه می‌شود. به علاوه، مجموعه کانونیکال، دیگر موانع آشنا در مطالعات شبیه‌سازی سیالات مونودیسپرس را نیز تحمل می‌کند. به عنوان مثال، زمان‌های آسایش به خاطر نوسانات چگالی ناشی از نفوذ، طولانی شوند. هیچ دسترسی مستقیمی به اطلاعات پتانسیل‌های شیمیایی وجود ندارد. شبه پایداری و انحراف، مطالعه‌ی انتقال فاز را به تاخیر می‌اندازد. تجربه با شبیه‌سازی مایعات مونودیسپرس نشان داده است که استفاده

از مجموعه‌ی گرند کانونیکال (GCE) در گیرانداختن بسیاری از مسائل مطرح شده مرتبط با مجموعه‌ی کانونیکال بسیار موثر است. همانطور که باید نشان دهیم کاربرد آن در زمینه‌ی مایعات پلی دیسپیری، بسیاری از مزایای خورد مونودیسپرس را حفظ میکند. به علاوه آن گلیدی برای بهبود نمونه‌برداری از توزیع چگالی $\rho(\sigma)$ فراهم می‌کند. این بدین دلیل است که در داخل چارچوب GCE، $N(\sigma)$ به طور کلی نوسان می‌کند. در نتیجه نوسانات در $\rho(\sigma)$ روی تمام مقادیر شبیه‌سازی به دام می‌افتند. با وجود این مزایا اگر چه GCE مکمل است و در نگاه اول، برای پیمودن یک مسیر خاص از طریق فضای ترویج چگالی $\rho(\sigma)$ ناپایدار به نظر آید. این بدین دلیل است که تمام $\rho(\sigma)$ به ظاهر مستقیماً تحت کنترل شبیه‌ساز است. در عوض شکل آن توسط توزیع پتانسیل شیمیایی اعمالی $\mu(\sigma)$ تعیین می‌شود.

با این حال، به آهنگ $\mu(\sigma)$ با یک طرح برون یابی شده تبدیل می‌شود. همچنین ما باید نشان دهیم که در مورد مجموعه گرند کانونیکال GCE و روش برون یابی هستوگرام، اجازه‌ی انتخاب فضای باریک فازی برای پیگیری موثر را به ما می‌دهد. طرح مقاله ما هم همین قضیه را دنبال می‌کند. در بخش IIA ما مکانیک آماری را برای یک سیال پلی دیسپرس در یک مجموعه گرند کانونیکال به کار می‌بریم. سپس در بخش IIB مجموعه گرند نیکال ترکیبی به علاوه نمایش اصول برون یابی برای پیگیری یک مسیر از طریق فضای $\rho(\sigma)$ را توصیف می‌کنیم. در بخش III روشی برای مساله‌ی بدست آوردن ویژگی‌های خط ترقیق سه نوع مایع با اندازه و توزیع مختلف بکار می‌بریم. توزیع پتانسیل شیمیایی این مایعات به عنوان تابعی از کسر حجمی تعیین شدند و نتایج با پیش بینی‌های دو معادله حالت رایج مقایسه شدند.

نهایتاً در بخش IV ما یافته‌هایمان را و مفاهیم آنها را مورد بحث قرار می‌دهیم.

A- روش کار

مکانیک آماری

ما یک مایع کلاسیکی از ذرات محدود شده با حجم $V=L^d$ را در نظر می‌گیریم. فرض می‌شود که سیستم از نظر ترمودینامیکی باز است. در نتیجه تعداد ذرات $N(\sigma)$ یک کمیت آماریت است.

تابع تقسیم مجموعه‌ی گرند کانونیکال به شکل زیر خواهد بود:

$$Z_V = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \prod_{i=1}^N \left\{ \int_V d\mathbf{r}_i \int_0^{\infty} d\sigma_i \right\} \exp(-\beta \mathcal{H}_N(\{\mathbf{r}, \sigma\})) \quad (2.1)$$

with

$$\mathcal{H}_N(\{\mathbf{r}, \sigma\}) = \Phi(\{\mathbf{r}, \sigma\}) - \sum_{i=1}^N \mu(\sigma_i). \quad (2.2)$$

که در آن N تعداد کل ذرات است در حالیکه $\beta = (k_B T)^{-1}$ و $\mu(\sigma)$ به ترتیب عکس دمای تعیین شده و توزیع پتانسیل شیمیایی می‌باشند. R و σ مربوط به پیکربندی هستند. یعنی مجموعه‌ی کامل (r_1, σ_1) و (r_2, σ_2) و ... (r_n, σ_n) از موقعیت ذرات و خواص پلی دیسپرس.

فرض می‌شود که انرژی پیکربندی $\Phi(r, \sigma)$ متناظر در جمع برهمکنش دو به دو داشته باشد.

$$\Phi(\{\mathbf{r}, \sigma\}) = \sum_{i < j=1}^N \phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|, \sigma_i, \sigma_j), \quad (2.3)$$

که Φ جفت پتانسیل می‌باشد. توزیع ذرات توسط (2.4) تعریف می‌شود. که σ علامت پلی دیسپرس پیوسته است و $N = \int N(\sigma) d\sigma$. ما باید به فکر نوسانات در توزیع چگالی مجموعه باشیم. (2.5) و دانسته انرژی پیکربندی (معادله). رفتار اماری این‌ها به طور کامل توسط توزیع احتمال‌شان توصیف می‌شود (2.6) و یا بطور واضح‌تر (2.7). انتگرال برای نوسانات انرژی، تابع توزیه احتمال را می‌دهد. (2.8). نگرانی اصلی ما مربوط به میانگین $\rho(\sigma)$ می‌باشد. (2.9). توزیع پتانسیل شیمیایی داده شده دما β و $\rho(\sigma)$ می‌توانند با شبیه‌سازی تعیین شوند. هر چند به جز گاز ایده‌آل هیچ رابطه‌ای بین $\rho(\sigma)$ و $\mu(\sigma)$ وجود ندارد. بنابراین نمی‌توان به آسانی تعیین کرد که $\mu(\sigma)$ متناظر با یک توزیع چگالی خاص $\rho(\sigma)$ است.

برای کنترل این محدودیت می‌توان از نمایش برون یابی استفاده کرد. ایده‌ی کلیدی این نمایش این است که توزیع اندازه‌گیری شده‌ی متراکم چگالی $P_v[\rho(\sigma), u]$ در یک مجموعه از پارمترهای $\mu(\sigma)$ و β می‌تواند برای کسب تخمین‌هایی از توزیع متناسب با دیگر پارمترهای $\mu(\sigma)$ و β سنگینتر باشند. در ساده‌ترین شکل آن، سنگین‌تر کردن به صورت زیر است (2.10) فاکتور سنگین‌تر کردن به صورت زیر است (2.11)

با تنظیم شکل $\mu(\sigma)$ و β در سنگین‌ترسازی، فضای $\rho(\sigma)$ می‌تواند به طور مختصر بررسی شود. بدین منظور لازم است تعریف یک تابع هزینه برای اندازه‌گیری انحراف $P_v[\rho(\sigma), u]$ از شکل هدف (2.12).

اینجا برای ساده‌تر کردن اعداد ما یک تابع وزن قراردادی $\gamma(\sigma)$ داخل تعریف خود قرار دادیم که نقش آن این است که به ما اطمینان دهد سهم‌های قابل مقایسه‌ای از همه‌ی مناطق نمونه‌برداری σ به تابع هزینه تحمیل می‌شود. در این راستا مساله تعیین این مقادیر $(\mu(\sigma)$ و β) که از توزیع هدف $\rho(\sigma)$ بدست می‌آید مینیمم شدن تابع هزینه (Δ) را کاهش می‌دهد. همانطور که در دو بخش IIB توصیف کردیم با استفاده از الگوریتم‌های استاندارد قابل دستیابی است.

B- اجرا

ما از شبیه‌سازی مونته کارلو (MC) در مجموعه‌ی گرنده‌کانونیکال استفاده کردیم تا خواص خط ترقیق سیستم‌های شامل ذرات گژی با اندازه‌های پراکنده را مطالعه کنیم. این بخش ظاهر اصلی شبیه‌سازی‌ها را و روند آنالیز را با جزئیات بیان می‌کند.

1. برنامه، ساختار و کسب داده‌ها

سیستم شبیه‌سازی ما شامل یک تعداد متغیر از کره‌های سخت است که در یک جعبه با حجم $V=L^d$ محصور شده‌اند. متغییر پلی دیپرسی بدان بعد σ به عنوان قطر ذرات در واحد قطر متوسط بیان دشه است (بخش II) را ببینید.

یک مرز بالایی σ روی محدوده‌ی تعیین شده‌ی خطها قرار داده می‌شود و شبیه‌سازی حجم داخلی یک آرایشی از ظروف سه بعدی با ابعاد خطی σ تقسیم‌بندی شده است.

این روش کمک موثری به شناسایی برهمکنش ذرات می‌کند که طی آن مطمئن می‌شدیم که برهمکنش ذرات مهمان حجم را اشغال می‌کنند یا اثرات همسایه هم مهم است. مجموعه‌ی گرند کانونیکال که از الگوریتم مونت کارلو استفاده می‌کند یک شکل بزرگ دارد و چهار نوع عمل می‌طلبد.

جابه‌جایی ذرات، جفت شدن ذرات، حذف ذرات و تغییر سایز مجدد ذرات. هر کدام از این حالات با فراوانی برابر اتفاق می‌افتند.

به طور خاص مورد پلی دیسپرس محب تغییر سایز می‌باشد که شامل تلاش برای تغییر خط ذره مورد نظر باشد که تحت یک مقدار ممتد از یک انحراف تصادفی یکنواخت در یک محدوده‌ی از پیش تعیین شده قرار می‌گیرد. این محدوده انتخاب می‌شود تا تعادل مناسبی بین نمونه‌برداری موثر و یک سرعت پذیرش رضایت بخش در عدد چگالی ایجاد شود.

با توجه به انواع حرکات دیگر، این‌ها در یک روش مشابه با هر دو مونومر دیسپرس شده انجام می‌شوند به جز اینکه برای جفت دشن، قطر ذرات جدید با احتمال برابر از محدوده‌ی $\sigma \in [0, \sigma_c]$ امتداد می‌یابد. همزمان با ورودی‌های اولیه، برنامه توزیع پتانسیل شیمیایی $\mu(\sigma)$ را می‌گیرد که برای قرعه کشی قبول یا رد مونت کارسو ضروری است. این توزیع که به شکل یک هیستوگرام ذخیره می‌شود با تقسیم کردن σ بین 0 و σ_c داخل یک تعداد معین M طبقه‌بندی می‌شود. تمام ذرات با خطر افت کرده در داخل یک محفظه‌ای داده شده با پتانسیل مشابه جمع می‌شوند.

مشاهده‌ی اصلی جالب احتمال توزیع می‌باشد. $p_H[\rho(\sigma)]$ [cf. Eq. (2.8)].

ایجاد شکل کلی این توزیع در یک شبیه‌سازی شدنی نیست. زیرا انجام چنین کاری مستلزم تشکیل یک هیستوگرام روی هیستوگرام است که از لحاظ اقتصادی مقرون به صرفه نیست. روش انتخاب شده بنابراین

خیلی ساده بود که هیستوگرام چگالی لحظه‌ای $\rho(\sigma)$ و افزودن موفق این کمیت به یک فایل بود. مجموعه‌ی تمام چنین نمونه‌های یک لیستی تشکیل می‌دهند که نشان دهنده‌ی یک قدمت متوالی از اندازه‌گیری تک تک داده‌هاست.

این لیست داده‌ها بعداً بوسیله‌ی یک برنامه‌ی آنالیز که در هر لیست تکی وارد می‌شود دوباره پردازش می‌شوند و از تمام آنهایی که تقریباً هیستوگرام ایجاد کرده‌اند میانگین گرفته و توزیع چگالی متوسط را ایجاد کرده‌اند. $\rho(\sigma)$ اگر مطلوب بود، برنامه آنالیز به طور مازاد، سنگین‌تر کردن هیستوگرام داده‌ها را به منظور ایجاد امکان برون‌یابی مقادیر همسایه‌ی پارامترهای مدل را اجرا می‌کند. این برون‌یابی با اختصاص دادن یک به هر کدام از لیست ورودی از شکل داده شده بوسیله‌ی معادله 2.11 بدست می‌آید. مجموعه‌ی کاملی وزن‌ها اجازه ساخت هیستوگرام سنگین‌تری را می‌دهد.

2. ردیابی یک مسیر فضای فازی

استراتژی که ما اختیار کردیم این است که فضای فازی مورد نظر خود را در یک روش مرحله‌ای عبور کنیم. با استفاده از برون‌یابی هیستوگرام از یک مرحله به مرحله بعدی پیش می‌رویم. در حالت کلی از ذرات داشته یک پتانسیل معین مسیر فضای فازی می‌تواند شامل تغییراتی در دما باشد مثل تشکیل $\rho(\sigma)$.

با این حال برای ساده‌سازی مثال اجازه دهید فرض کنیم که مسیر ایزوترم است یعنی β ثابت است و اینکه تشکیل توزیع پتانسیل شیمیایی $\mu(\sigma)$ در برخی نقاط اختیاری $\rho(\sigma)$ در طول مسیر شناخته شده است.

سپس راندام می‌یابد. برای شبیه‌سازی حالت شناخته شده‌ی نقطه داده‌ها برای $p_V[\rho(\sigma), u]$ می‌تواند مستقیماً متراکم شود.

هیستوگرام سنگین‌تر سازی سپس برای این داده‌ها بکار می‌رود تا برخی فاصله‌ها را در طول مسیر به یک نقطه جدید $\rho(\sigma)$ و برای تامین یک حدس از شکل متناظر $\mu(\sigma)$ برون‌یابی کند. کمیت بعدی که در یک شبیه‌سازی بکار می‌رود نتایجی است که از برون‌یابی نقاط در طول مسیر بدست آمده است و ... با تکرار اولین

راند یعنی $\rightarrow \rho^{(i+1)}(\sigma), \mu^{(i)}(\sigma) \rightarrow \mu^{(i+1)}(\sigma),$ کل مسیر خطهای فازی طی می‌شود.

انجام مرحله‌ای برون یابی باعث ایجاد یک انتخاب قبلی برای مرحله سائز می‌شود که اختلاف بین $\rho(\sigma)$ اندازه‌گیری شده و هدف بعدی $\rho_T(\sigma)$ می‌باشد. بزرگی این اختلاف باید طوری انتخاب شود که تا حد امکان بزرگ باشد و با باقیمانده در محدوده‌ی معتبر برون یابی سازگار باشد. یک شاخص و معیار خوب این است که چگالی‌های تک تک توزیع هدف $\rho_T(\sigma)$ با محدوده‌ی نوسانات نمونه که در داده‌های شبیه‌سازی $\rho(\sigma)$ ظاهر می‌شوند هم پوشانی داشته باشد. وقتی یک مرحله سائز مناسب تعیین شده با فرآیند برون یابی با مینیمم کردن تابع هزینه Δ که در معادله 2.12 معرفی شد انجام می‌شود. برای همه حتی کم چگالی ترین هم این امر با حضور پیوند قوی بین متغیرهای μ پیچیده‌تر می‌شود که ناشی از این حقیقت است که عدد چگالی برای هر σ بستگی به توزیع پتانسیل شیمیایی کل دارد. خوشبختانه الگوریتم‌های موثری برای انجام مینیم سازی توابع چند بعدی بطور گسترده در دسترس هستند و حداقل برای مواردی که با آنها سروکار داریم به نظر می‌رسد که بطور موثر عمل کند. تنها مشکل پیش رو این بود که در حین کار مینیم کردن تمام مقادیر σ در دو سوی $\rho_T(\sigma)$ با شکست مواجه می‌شود. برای درمان چنین مشکلی یک تابع وزن $\gamma(\sigma)$ در تابع هزینه Δ وارد می‌شود که هدف از اینکار افزایش سهم Δ از مقادیر σ برای مواردی که $\rho_T(\sigma)$ کوچک است. با استفاده از

مجموعه $\gamma(\sigma) \propto [\rho_T(\sigma)]^{-1.16}$ نتایج خوبی بدست آمد. باید نگران این مساله بود که روش‌هایی

که در بالا مطرح شد فرض می‌کند که یک شکل از $\mu(\sigma)$ برای برخی نقاط شروع روی مسیر فضای فازی مورد علاقه در دسترس است. این می‌تواند به راحتی بدست آید اگر مسیر عبوری از یک منطقه چگالی پایین که تضمین‌های تجزیه‌ای معتبر برای (μ, σ) دارد بتواند بکار رود. در غیر اینصورت روش باید با وسایل دیگری راه اندازی شود. یک روش ساده اما موثر برای دستیابی به این مهم به صورت زیر است:

شروع با برخی از تضمین‌های ابتدایی از $\mu(\sigma)$ مطلوب یکسری شبیه‌سازی‌های کوتاه انجام می‌شود که در آن

$\mu(\sigma)$ به صورت زیر تکرار میشود معادله 2.13

که $0 < \delta < 1$ یک فاکتور تعدیل می باشد مقداری که می تواند با همگرایی بهینه میزان شده باشد. اگر چه شخص ممکن است با پیچیدگی های بیشتری و شکل های موثری مواجه شود ما باید این روش را برای عملکرد رضایت بخش تنظیم کنیم.

III معادلات خط ترقیق سیالات پلی دیسپرس با کره های سخت

A سیستم و جزئیات شبیه سازی

ما خواص خط ترقیق سیالات با کره های سخت با توزیع قطر $N(\sigma)$ را بدست آوردیم که به صورت یکی از این دو شکل B باشند.

i. توزیع اسکولز

ii توزیع log-normal

این توزیع ها به راحتی بیان می شوند در عبارت یک تابع سایز نرمال شده برای اسکولز به شکل زیر خواهد بود (3.1) که σ قطر متوسط ذرات و z پارامتر کنترل کننده پهنای توزیع است برای توزیع log-normal تابع سایز به صورت زیر است (3.2). که w انحراف استاندارد در واحد σ می باشد. باید توجه داشت که این توزیع ها نرمالیزه هستند که برابر است با $\int_0^{\infty} n(\sigma) d\sigma = 1$ و با گرایش σ به سمت صفر، صفر می شوند که همان حد پایین σ است. در عوض هیچ حد بالایی محدوددهی وجود ندارد و در نتیجه به منظور شبیه سازی اعمال یک حد بالایی σ ضروری است (بخش iib را ببینید). محاسبه تا توزیع سایز جداگانه را مطالعه کردیم که دو مورد از آنها شکل اسکولز و یک شکل log-normal می باشد. برای توزیع اسکولز، مقدا پارامترهای $z=15$ و $z=5$ در نظر گرفته شد. برای توزیع log-normal تنها مورد $w=2.5$ با $\sigma_c=12$ مورد مطالعه قرار گرفت. در هر نمونه ما $\sigma=1$ را تنظیم کردیم. آرایش ظرف با ابعاد خطی $l=3,4,5$ مورد استفاده قرار گرفت در واحدهای بدون بعد خالص ($l=l\sigma_c$) اینها متناظر با $l=9,12,15$ می باشند بدین ترتیب برای $z=15$ اسکولز به $l=12,16,20$ و برای $z=5$ اسکولز و برای $l=36,48$ برای توزیع log-normal

پارامتر هیستوگرام تقریبی به $m=75$ و $m=100$ برای $z=5$ و $z=15$ توزیع اسکولز و به $m=120$ برای توزیع log-normal تنظیم شد. توزیع چگالی متوسط می تواند در عبارات تابع سایر نرمالیزه تقسیم بر عدد دانسیته کل بیان شود. یعنی (3.3)

روند کار اینگونه است برای پیگردی خط ترفیق از دانسیته کل به عنوان یک اندازه ای از هر موقعیت خط استفاده می شود. روند پیگردی در یک مقدار کوچک از ρ توسط تقریب توزیع پتانسیل شیمیای بر طبق رابطه

ی گاز ایده آل $\mu(\sigma) = \ln \bar{\rho}(\sigma)$ آغاز می شود. هیستوگرام برون یابی برای کسب داده های شبیه سازی

به منظور تصحیح تخمین های ابتدایی از $\mu(\sigma)$ بکار می رود. پس از آن استراتژی شرح داده شده و در بخش

IIB2 اجرا شد تا خط ترفیق را در دانسیته های بالاتری دنبال کند. در هر مرحله تنظیم یک شکل هدف

برای $\rho(\sigma)$ متناظر با یک مقدار از ρ بزرگتر از آنچه در مرحله قبل استفاده شده است ضروری است. تابع

هزینه اختلاف بین $\rho(\sigma)$ و هدف را اندازه گیری می کند و سپس آنرا مینیمم می کند تا یک تخمین برای σ

$\mu(\sigma)$ مناسب بدست آید. این مینیمم کردن در دو مرحله انجام شد. یک تقریب به $\mu(\sigma)$

از یک مینیمم سازی یک بعدی بدست آمد که توزیع فعالیت $\exp(\mu(\sigma))$ تقسیم بر یک فاکتور کلی بود.

سپس مینیمم کردن کامل انجام شد تا یک شکل دقیق برای $\mu(\sigma)$ بدست آید.

اگر چه ρ یک اندازه گیری مناسبی از موقعیت خط ترفیق فراهم میکند ولی اطلاعات کمی با در نظر گرفتن

درچه ی تقسیم بندی در یک سیستم پلی دیسپرس ارائه می دهد ما باید راه درستی برای نقل نقادیر برای

توابع کلی سیستم داده شده بیابیم. (3.4). و آن یک کمیت است که بطور برجسته در نتایج ما نشان داده می

شود.

B.نتایج

با توجه به پیچیدگی های محاسبات شبیه سازی خط ترفیق کاملی برای هر مایع تنها برای $L=S$ بدست

آوردیم. برای سیستم های بزرگتر تنها اندازه گیری های موضعی کمی در طول خط ترفیق ساخته شد. که هر

یک از آنها با توسل به اندازه گیری $\mu(\sigma)$ بدست آمده از سیستم های با $L=3$ بدست آمده اند. خط ترفیق برای مایع با بالاترین کسر حجمی در دسترس محاسباتی دنبال شد. تنها مقیاس بدست آمده $\eta=0.445$ و $N=5$ برای توزیع چگالی اسکولز با $Z=15$ و $Z=5$ و $\eta=0.33$ برای توزیع LOG-normal بود.

تصویر لحظه ای پیکربندی برای هر 3 مایع در شکل 1 نشان داد شده اند که برای مقادیر η اندکی زیر مقدار ماکزیمیم در هر دو آورده شده اند. ما در بحث قبلی یادآور شدیم که حداقل برای موارد توزیع اسکولز کسر حجمی ماکزیمیم بدست آمده تا حدی بزرگتر است از آنچه که برای شبیه سازی های GCMC کره های سخت مونودیسپرس در دسترس است. سپس در η های بزرگتر این روند ناکارآمد می شود زیرا سرعت قابل قبول برای جفت شدن ذرات همزمان با افت هم آزاد به سرعت می یابد. ضمن اینکه در همان زمینه مفهوم پلی دیسپرس برای جفت شدن ذرات بزرگ مناسب است. ضمناً می تواند اغلب برای قرار دادن یک ذره کوچک مناسب باشد. این ساده می کند نوسانات را در تعداد کل ذرات N ، در حالیکه محل اندازه گیری مجدها را از نمونه گیری مناسب از توزیع چگالی پیوسته مطمئن می کند.

اشکال اندازه گیری شده برای $\mu(\sigma)$ به عنوان یک تابعی از η از لحاظ کیفی بین توزیع چگالی اسکولز و Long-normal اختلاف ایجاد می کند و بنابراین آن ها را بطور جداگانه بحث می کنیم. شروع با مورد اسکولز شکل 2 و 3 $\rho(\sigma)$ اندازه گیری شده 5 و $\mu(\sigma)$ متناظر برای دو سیال در یک کسر حجمی منتخب در طول خط ترفیق مربوط به آنها را نشان می دهد. محدوده ی مقادیر نشان داده شده است که شبیه سازی ها داده های معقول با کیفیت رضایت بخش را ارائه می دهد.

باید توجه کرد که برای دو مورد $z=5$ و $z=15$ دنباله ها اثرات σ بزرگ توزیع ها را که به طور قابل توجهی تا σ_c کاهش را نشان دار می کنند. به علاوه تحقیق و و بررسی کردیم در مسیر شبیه سازی ها، هیچ ذره ای از قطرها به قطر منقطع که در مقیاس زمانی شبیه سازی اتفاق می افتد نمی رسند که این دلالت به این هر موضوع دارد که داده های تحت تاثیر عوارض و اثرات آن قرار نمی گیرند. با توجه به اشکال توزیع های پتانسیل شیمیایی می توان دید که برای η های کوچک، یک ماکزیمیم نزدیک پیک در $\rho(\sigma)$ نشان می دهد رفتاری که البته در

η به قدر کافی پایین توسط خواص شناخته شده‌ی گازهای ایده‌آب ملاحظه می‌شود. در حالیکه برای η های بزرگتر پیک از بین نمی‌رود و $\mu(\sigma)$ بطور یکنواخت افزایش می‌یابد. افزایش $\mu(\sigma)$ در محدوده‌ی بزرگتر نشان می‌دهد که پتانسیل شیمیایی مازاد با σ سریعتر رشد می‌کند نسبت به کاهش ایده‌آ و افت $\rho(\sigma)$ حال به مورد long-normal می‌رسیم شکل 4a نشان می‌دهد که $\rho(\sigma)$ شدید به آرامی با افزایش σ افت می‌کند. بنابراین پیک توزیع در σ های خیلی کوچگتری از برای دوشکل اسکولز اتفاق می‌افتد. چند قطر متوسط σ در هر سه مورد یکسان است.

به عنوان یک نتیجه‌ی عملی از افت آهسته، محدوده‌ی قطرهای ذرات ادامه می‌یابد تا از منقطع در سیستم مشاهده شود. به علاوه در محدودیت‌های محاسباتی استفاده از یک راه میان بر عملی نیست و بنابراین اثرات ناقص‌سازی در این سیستم همیشه مهم است. شکل‌هایا اندازه‌گیری شده از $\mu(\sigma)$ برای سیال log-normal در شکل 4b نشان داده شده است. در مقابل در توزیع اسکولز، آنها یک ماکزیمم باریک نزدیک پیک در $\rho(\sigma)$ در ρ کوچک نشان می‌دهند. بنابراین با افزایش σ یک افت آهسته برای مینیمم پهن وجود دارد که پس از آن $\mu(\sigma)$ به شدت افزایش می‌یابد. داشتن طرح کلی از ویژگی‌های کیفی اصلی رابطه‌ی بین $\rho(\sigma)$ و $\mu(\sigma)$ برای انجام یک مقایسه جزئی بین اندازه‌گیری‌ها ما و پیش‌بینی‌های معادلات حالت حاضر در کتابها آموزنده خواهد بود. برای کره‌های سخت در معادله‌ی رایج استفاده شده که بخاطر Boblic منصوره و... براساس معادله cornhan-starling برای کره‌های سخت مونودیسپرس و بخاطر salacusel و stell براساس تئوری percuss است.

که هر دوی آنها در ضمیمه آورده شده اند و $\mu(\sigma)$ را در عبارات یک بسط چند درجه‌ای σ بیان می‌کنند به همراه ضرایبی که در عبارت سه لحظه‌ی اول $\rho(\sigma)$ داده شده است. پیش‌بینی‌های EOS را برای هر یک از سه مایع مورد مطالعه مقایسه کرده ایم با داده‌های با سایز محدود ناشی از شبیه‌سازی در سه مقدار از η که به ترتیب با نام‌های مقادیر کم، متوسط و زیاد عنوان می‌شوند. ما یافته‌هایمان را برای هر سیال به نوبه‌ی خود شرح داده ایم. نتایج برای توزیع اسکولز با $Z=15$ در کسر حجمی پایین $\eta=0.056$ در شکل 5A نشان داده شده است. در نگاه اول توافق و سازگاری خوبی بین داده‌های شبیه‌سازی $L=9$ و $l=12$ و دو معادله حالت

BMCSL و py در کل منطقه ی σ وجود دارد. در حالیکه بررسی دقیق تر، اختلافات محصوصی را بین محاسبات و شبیه سازی آشکار می کند که در مقیاس $\mu(\sigma)$ معلوم نیستند. این اختلافا وقتی آشکار می شوند که توزیع گاز ایده آل با حفظ پتانسیل شیمیایی مازد تحت فشار قرار دهیم (3.5). این کمیت در شکل 5a رسم شده است که از آن می توان دید که در مقایسه با نتایج شبیه سازی، EOS کلی $\mu(\sigma)$ را نادیده گرفته و ناچیز پنداشته است. شکل 5B نتایجی را برای توزیع اسکولز $Z=15$ در کسر حجمی متوسط $\eta=0.257$ نشان می دهد. دوباره اینجا نیز یک توافق خوبی بین داده های شبیه سازی $L=9$ و $l=12$ وجود دارد که نشان دهنده این است که اثرات سایز ناچیز هستند.

در حالیکه اینجا اختلافاتی بین معادلات BMCSL و PY از مقادیر η کمتر بزرگتر هستند که در مقیاس خالص پتانسیل شیمیایی آشکار است می توان دید که دو EOS به طور قابل توجهی $\mu(\sigma)$ را برای σ های بزرگ نادیده می گیرد در حالیکه آنها توافق نسبتا خوبی با هم دیگر دارند. یک شباهت بسیار زیاد از توافق بین داده های اندازه ی سیستم $L=9$ و $l=12$ در کسر مولی بالاتر $\eta=0.426$ آشکار می شود که در شکل 5c نشان داده شده است. اینجا ملاحظه شد که معادله ی حالت PY تا حدودی بهتر از معادله ی حالت BMCSL عمل می کنند هر چند اساسا هر دو $\mu(\sigma)$ را در محدوده ی حد بالایی σ نادیده می گیرند یک شک مشابه برای توزیع اسکولز با $Z=5$ پدیدار شد (شکل 6) بار دیگر هر دو معادله ی حالت $\mu(\sigma)$ را ناچیز پنداشتند، حتی در کمترین کسر حجمی هر چند سازگاری معادله PY با نتایج شبیه سازی در کسرهای حجمی بالا از معادله BMCSL بیشتر است. ما دوبار نتوانستیم هیچ مدرکی برای اثرات محدود محسوسی در نتایج شبیه سازی تشخیص دهیم. برای مقایسه ی بهتر نتایج هستیم log-normal با پیش بینی های EOS در نظر گرفتن اهمیت اثرات ناقص سازی ضروری است.

لحظات یک توزیع normal ناقص شده می تواند به طور مهبجی از توزیع های کامل متفاوت باشد حتی برای مقادیر σ های بزرگتر. بمنظور تسهیل یک مقایسه عادلانه با تئوری، شکل تجزیه ای $\mu(\sigma)$ باید با استفاده از لحظات توزیع ناقص شده مشابه همزمان با بکارگیری شبیه سازی ها محاسبه شود و نتایج انجام این مقایسه در شکل 7 ارائه شده است. در کسر حجمی پاییک توافق خوبی بین پیش بینی های EOS و نتایج شبیه سازی

هایی وجود دارد در حالیکه در کسر حجمی بالاتر EOS به طور قابل توجهی $\mu(\sigma)$ اندازه گیری شده را ناچیز میپندارد با درجه ای از افزایش اختلافات در برابر دنباله ی توزیع یکبار دیگر ما نتوانستیم مدرکی از اثرات سایز محدود در مجهولات آماری دادهیمان شخیص دهیم. نتایج ارائه شده در بالا نشان می دهند که معادلات BMCSL و PY دنبال می شوند تا یک توصیف دقیق کمی از توزیع پتانسیل شیمیایی مخصوصا ووقتی کسر حجمی بزرگی است ارائه دهند. امتحان مفاهیم این یافته ها برای محاسبه چگالی می تواند آموزنده باشد به این منظور ما باید شکل $\mu(\sigma)$ محاسبه شده را با معادله خط BMCSL از برخی $\rho(\sigma)$ تعیین شده مطالعه کنیم. این توزیع چگالی وقتی وارد یک سیستم شبیه سازی میشود عملا بدست می آید. نتایج این مقایسه در شکل های 8A تا 8C برای هر سه مایع در یک کسر حجمی بالا نشان داده شده است. در هر مورد خط جامد توزیع چگالی ورودی $\rho(\sigma)$ از $\mu(\sigma)$ را نشان می دهد که محاسبه شده است. نقاط داده نایچ شبیه سازی بدست آمده با استفاده از این شکل $\mu(\sigma)$ برای سه سیستم با اندازه گیری های مختلف را نشان می دهد. همانطور که شکل های 8A تا 8C به طور واضح نشان می دهد شکل اندازه گیری شده $\rho(\sigma)$ اساسا از پیش بینی ها انحراف نشان می دهد. سرانجام در این بخش ما ساختار لحظه ای پتانسیل شیمیایی مازاد $\mu(\sigma)$ داده شده با معادله 3.5 را امتحان می کنیم. هر دو معادله BMCSL و PY فرض میکنند که $\mu(\sigma)$ در عبارات مکعب چند جمله ای σ کامل بیان است. Bartler با استفاده از استدلالهای هندسی ناشی ز تئوری ذرات مورج به نتایج مشابهی رسید. ما باید این پیشنها را با فیت کردن دادهیمان به (3.6) مورد مطالعه قرار دهیم. که عبارت ثابت با نیاز به اینکه در حد $\sigma=0$ احتمال جفت شدن یک کره مناسب با $1-\eta$ است ثابت است. ما فهمیدیم که تمام داده ها با این عبارت به خوبی فیت می شوند شکل 9a یک نمونه فیت را برای مورد سیال اسکولز با $z=5$ در $\eta=0.377$ نشان می دهد. همچنین نشان داده شود ضرایب α . برای مقادیر مختلف η با پیش بینی های معادله حالت bmcsl فیت می شوند. میتوان دید که در کسر حجمی بالا BMCSL تمام ضرایب را ناچیز میپندارد اختلاف نسبی برای ضریب α بزرگتر از ضرایب دیگر است.

بحث و نتیجه گیری

بطور خلاصه ما یک روش شبیه سازی برای گزند کانیکال در مطالعه سیالات دیسپرسی ارائه کردیم. روش از تکنیک های برون یابی هیستوگرام استفاده می کند تا یک مسیر دلخواه از طریق فضای مورد علاقه توزیع چگالی $\rho(\sigma)$ دنبال شود. ما از آن استفاده کردیم تا مساله ای بدست آوردن خواص خط ترقیق کره های سخت توزیع - سایز حل شود. در مطالعه ی بیشتر گونه های سیالات دیسپرس و تبدیل فاز آنها هر دو در حجم و فضای محدود باید ثابت شوند. ما قصد داریم که این مسئله را در ارتباط آینده گزارش کنیم.

مطالعات شبیه سازی قبلی سیالات پلی دیسپرس عموماً در یک چهار چوب نیم گزند کانونیکال استفاده می شوند که در یک تعدا ثابتی ذرات در فشار ثابت یا در مجموعه میکرو کانونیکال مطالعه می شوند. در رابطه با کار حاضر، این مطالعات از توزیع سایز ذرات استفاده می کنند. بوسیله ی اندازه گیری مجدد MC حرکات کنترل می شوند با یک توزی پتانسیل شیمیایی. در مقایسه با رانش ما اگرچه خواص ترمودینامیکی به عنوان تابعی از شکل توزیع فعالیت $\exp(\mu(\sigma))$ مطالعه می شدند، هیچ محدودیتی روی توزیه چگالی قرار نگرفت که در نتیجه از پذیرفتن اشکال وابسته مینیم شده انرژی آزاد برای $\mu(\sigma)$ تحمیلی آزاد بودند. از این نظر ممکن است این سوال پیش آید که آیا نتایج شبیه سازی موفقیت واقعی در سیستم های واقعی را بازتاب می کند یا نه. یک موقعیت این است که نبود یک توزیع چگالی ممکن است مربوط به موضوع اثر پلی دیسپرسی روی انجماد کره های سخت باشد. که در رفرنس 25 مورد بررسی قرار گرفت که از شبیه گزند کانونیکال و انتگرال گیبس استفاده میکند. تحت کنترل در آوردن روند توصیف شده در کار حاضر برای بررسی اثرات رفتار انجمادی روی تغییر پهنای توزیع چگالی در عین تغییر شکل آن به برخی اشکال فیزیکی واقعی میتواند قابل توجه باشد. در تحقیق حاضر مرکز توجه روی سیالاتی است که درچه پلی دیسپرسی بالایی دارند و انگیزه انتخاب دو چیز بود: اول مدلهای یک توزیع چگالی گسترده یک چالش تست کردن مناسبی را در برابر آزمایش مفید بودن روش ها ارائه می دهند.

دوم: در مقاله یک تعدا از پیش بینی های جالب درباره ی نقش نیروهای ناقص کننده در سیستم های پلی دیسپرسی بالا وجود دارد. برای مثال چندین نویسنده پیشنهاد کرده اند که نیروهای جاذبه ناقص کننده می تواند تبدیل خازنی جدیدی در کره های سخت پلی دیسپرسی ایجاد کنند و مخصوصاً sear پیشنهاد کرد که

یک سیال با کره های سخت توزیع، اندازه log-normal دارند که با توجه به بلوررسانی ذرات بزرگ در تمام کسرهای محدود ناپایدار خواهند بود.

در مقابل cuesta پیش بینی کرد که توزیع log-normal به اندازه ی کافی وسیع جدایی فاز مایع - مایع در برخی دانسیته های محدود نشان خواهد داد. بطور مشابه بنظر می رسد برای یک توزیع سایز ناقص شده یک تبدیل فاز برای کسر حجمی کوچک اختیاری بخاطر نبود بزرگترین ذرات که قوی ترین نیروهای ناقص کننده را تعدیل می کنند، اتفاق نمی افتد. بنابراین نتایج شبیه سازی برای توزیع ناقص قادر به تایید قطعی این پیش بینی ها نخواهد بود. لازم به ذکر است که ما هیچ مدرکی از بلور سازی سیال log-normal خاص مطالعه شده تا یک کسر حجمی $\eta=0.33$ مشاهده نکردیم. بطور مشابه در محدوده ی کسرهای حجمی در دسترس هیچ مدرکی برای تبدیل فاز در دو سیال اسکولز مطالعه شده ملاحظه نشد. سرانجام با مقایسه بین نتایج شبیه سازی های ما و پیش بینی های مطالعات پلی دیسپرسیته فهمیدیم که نه معادله BMCSL و نه معادله PY توشف دقیق کمی از ترمودینامیک کره های سخت برای کسرهای حجمی بالا پیشنهاد نمی کنند.

هر دو معادله $\mu(\alpha)$ را در تمام چگالی های سیال روی کل محدوده ی α ناچیز پندارند که دلالت بر این دارد

که آنها چگالی انرژی آزاد هلمهولتز را ناچیزی می انگارند و بنابراین

$$\int_0^{P_0} \mu(\sigma | \rho'_0 n(\sigma)) d\sigma d\rho'_0$$

پایداری سیال بیشتر از حد برآورده می شود. بزرگی این اغراق وقتی بیشتر به چشم می آید که کسر حجمی بزرگتر باشد. به طور قابل توجهی ما دریافتیم که در این مسیر معادله PY به طور محسوسی بهتر از معادله BMCSL عمل میکنند. بر خلاف فرق این حقیقت که نتایج بعدی از یک معادله ی حالت مونودیسپرس به تقریب PY ارجح باشد. در هر مورد نتایج ما باید یک زمینه ای برای امتحان موثر برای ر پیشرفت بعدی فراهم کند تا البته تا جایی که معادلات حالت دیسپرس پاسخگو باشد.

ضمیمه: معادلات حالت کره های سخت پلی دیسپرس

معادلات حالتی که در اینجا عنوان کردیم بیان می کنند که پتانسیل شیمیایی به عنوان یک تابعی از قطر کره می باشد. عبارت مذکور بخاطر Salacous و stell عمومیت داده می شود به نتایج percuss-yevick برای کره های سخت مونودیسپرس (A1)

به عبارت دیگر معادله حالت BMCL به عبارت Carnaliso تعمیم داده می شود که برای کره های سخت مونودیسپرس دقیق تر است از نتایج percue (A2)

که n, m مین لحظه از $\rho(\alpha)$ هستند با توجه به اینکه $\eta =$ کسر حجمی کره های سخت می باشد. هر دو معادله حالت شامل توزیع ایده آل پتانسیل شیمیایی است ، برای دمای عمومی بیاد بیاورید که $\beta=1$ فرض می کردیم

برای سیستم با کره های سخت که این توزیع به صورت زیر تعریف می شود.

$$\beta \mu_{ideal}(\sigma) = \ln \bar{\rho}(\sigma)$$

چون بحث زیادی در مقاله راجع به چگونگی پتانسیل شیمیایی ایده آل برای سیستم های پلی دیسپرس وجود دارد باید فرض شود که توجه به این نکته می تواند کمک کننده باشد در چهارچوب گزند کانونیکال $\mu(\alpha)$ به طور واضح با تابع تقسیم گزند کانونیکال تعریف شد. به علاوه برای یک سیستم ایده آل می توان به اسانی از معادله 2.1 دریافت که $\rho(\alpha)$ برابر است با $\exp(\beta\mu\alpha)$

ممکن است دربارهی ابعاد در استدلال لگاریتم نگران باشیم اما تعریف در معادله 2.1 قبلا اشاره کرده واحدهای بدان بعد برای طول ها و برای σ استفاده شده است. انتگرال بر روی r و σ نیاز به نرمالیزه کردن دارد با یک واحد حجم v و یک مقدار واحد σ برای نشان پلی دیسپرس و پتانسیل شیمیایی ایده آل بصورت زیر خوانده می شود.

$$\beta \mu_{ideal}(\sigma) = \ln[v_0 \sigma_0 \bar{\rho}(\sigma)],$$

ثابت نرمالیزه کردن $v\sigma$ می تواند در حقیقت وابسته به σ باشد این تنها یک تغییر وابسته به σ در مقیاس پتانسیل شیمیایی صفر می دهد.



این مقاله، از سری مقالات ترجمه شده رایگان سایت ترجمه فا میباشد که با فرمت PDF در اختیار شما عزیزان قرار گرفته است. در صورت تمایل میتوانید با کلیک بر روی دکمه های زیر از سایر مقالات نیز استفاده نمایید:

لیست مقالات ترجمه شده ✓

لیست مقالات ترجمه شده رایگان ✓

لیست جدیدترین مقالات انگلیسی ISI ✓

سایت ترجمه فا ؛ مرجع جدیدترین مقالات ترجمه شده از نشریات معتبر خارجی