Calculation of electrical microfield distribution spatial derivative functions in plasma using the Monte Carlo simulation

Salima GUERRICHA* and Smail CHIHI
Laboratoire LRPPS, Faculté des Sciences et de la Technologie et Sciences de la Matière, Université Kasdi merbah Ouargla, Ouargla 30000, Algérie.
*Email : gusalima@yahoo.com

حساب دوال توزيع المشتقات الفضائية للحقول الكهربائية الموضعية في البلازما باستخدام المحاكاة العددية مونتي كارلو

قريشة سليمة و شيحي إسماعيل
مخبر فيزياء الإشعاع و البلازما و فيزياء السطوح (LRPPS)، قسم علوم المادة، جامعة ورقلة، ورقلة

مختصر: في هذا العمل استخدِمَت المحاكاة العددية بطريقة مونتي كارلو لحساب دوال توزيع المشتقات الفضائية للحقول الكهربائية الموضعية الأيونية في البلازما. قورنت هذه النتائج بنتائج حساب تحليلي أجريناه سابقا. تبيّن تقارب النتائج بشكل ملحوظ. أُستُنبِطت بعض خصائص هذه الدوال من خلال نتائج الحساب.

كلمات دليلية: دوال توزيع، المشتقات الفضائية، الحقل الكهربائي الموضعي، البلازما، محاكاة مونتي كارلو

ABSTRACT: In this work, the distribution functions of spatial derivatives of electrical microfield in plasma have been calculated, by using the Monte Carlo Simulation. These results have been compared with our previoused analytical calculations. The rapprochement between results is significant. Some of these functions properties have been deduced from our calculations.

Key words: distribution functions, spatial derivatives, electrical microfield, plasma, Monte Carlo simulation

1. مقدمة:

تؤثر الحقول الكهربائية الناشئة عن الجسيمات المشحونة في البلازما على خصائصها الضوئية و الترموديناميكية، فهي تتسبَّب في تعريض الخطوط الطيفية و انزياحها[1-4] بسبب فعل ستارك. إن المقارنةَ بين العُروض التجريبية و النظرية للخطوط الطيفية المتسعة بفعل ستارك شائعةُ الاستعمال لتشخيص البلازما[1-3]؛ فالخطوط الطيفية الصادرة عن البلازما تُشخِّصُ درجةَ حرارتها [5]، كما أن العرض عند منتصف خطوط الهيدروجين أداةٌ بسيطةٌ و جيِّدةٌ لتعيين الكثافة الإلكترونية[6].

لقد جَذَبتْ ظاهرةُ لاتناظر خطوط ستارك الطيفية للهيدروجين في البلازما الانتباهَ منذ الملاحظات الأولى لـ Filkenburg [7]. لقد أَظهَرَتِ الخطوطُ الطيفية للمشعات الشبيهة بالهيدروجين و المغمورة في البلازما لاتناظرًا ملحوظا و انزياحاتٍ قابلةً للقياس غالبا عند الكثافات العالية[8].

لقد أُجريت عدة دراسات تجريبيةٍ و نظريةٍ لمعرفةِ مصادر اللاّتناظر و شرح خصائصه، و مع ذلك فإنه لم تنجز أيَّةُ معالجةٍ مُرْضِيَةٍ و دقيقةٍ و موفَّقَةٍ للمعطيات التجريبية، لحد الآن [9].

إن المصْدَرَ الرئيسَ لِلاَتناظر الخطوط الطيفية في البلازما هو لاتجانس الحقل الموضعي الأيوني[10]، فــ Kudrin and Sholin [11، 12] أوَّلُ مَنْ أشار إلى ذلك، إذْ عالجا المسألةَ باستخدام تقريب الجوار الأقرب.

يؤدي تفاعل الإلكترون المقيد للمُشِعَّات الهيدروجينية في البلازما الكثيفة مع الحقل الموضعي لأيوناتها إلى اتساع الخطوط الطيفية بسبب انقسام المستويات الذرية بفعل ستارك الخطي، و يكون الطيف متناظرًا حول مركز الخط[8]، كما يؤدي إلى انزياحها و لاتناظرها، نتيجةً للتفاعل بين عزم رباعي القطب الذري و لاتجانس الحقل الموضعي، أو ما يُعْرف بفعل رباعي الأقطاب، و هو الذي يملك المساهمةَ المهيمنةَ على لاتناظر الخط[11]، و كذا التأثيرات من رتب أعلى، كفعل ستارك التربيعي[13]. في غياب أي اضطراب خارجي، يوجَد مصدرٌ داخليٌّ للالاتناظر، هو تأثيرات البنية الدقيقة، كما يُلاحظُ لاتناظرٌ آخرُ عندما تزداد كثافة البلازما[8].

لمعالجة مسألة لاتناظر الخط الطيفي غيرُ كافٍ معرفةُ توزيع الحقل الموضعي فقط، بل يتطلَّبُ ذلك أيضا معرفةَ دوال التوزيع الفضائي لمختلف هيئات الجسيمات المحدِثَة للاضطراب، و بالتالي ينبغي إدخال دوال التوزيع $P\left(\vec{E};(\partial E_i/\partial x_k)\right)$ لشعاع الحقل الموضعي $\vec{E}$ و كل مركباته المستقلة للمُوَتِّر المؤلَّف من مشتقاته الفضائية $\partial E_i/\partial x_k$ [14].

2. محاكاة مونتي كارلو:

تتأسس طريقة مونتي كارلو على حساب الأمل الرياضي لدوال المتغيرات العشوائية[15]، و هي طريقة شائعة الاستعمال في جميع مجالات العلوم، و تعتمد على استخدام الأعداد العشوائية و الاحتمالات الإحصائية في حل المسائل المختلفة [16].

إن استخدام طريقة مونتي كارلو لنمذجة المسائل الفيزيائية يسمح بدراسة الجمل المعقدة المولّدة عشوائياً من عدد لا متناهٍ من الهيئات التي يمكن أن تشغلَها الجملة [17]؛ ذلك أنها تتجنب الغَوْصَ في تعقيدات المعادلات التفاضلية.

عندما نكون بصدد تقدير المتوسطات، و التكاملات المعقدة لأعداد كبيرة جدا من الهيئات، تُدْمَج تقنية خاصة تُدْعى خوارزمية Metropolis[18] ، تستند إلى طريقة الإختيار الأفضل للعينات[17].

بتقنيات مونتي كارلو[17، 19، 20] يمكن حساب المجاميع على عدد كبير من درجات الحرية، و تقريبُ المتوسط الحراري الحقيقي لمقدار M بالصيغة التالية:

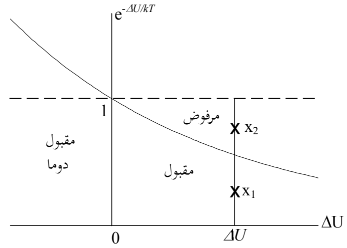
$$\overline{M}=\frac{\sum_{i=1}^{N} M\,(C_i)\,e^{-U\,(C_i)/kT}}{\sum_{i=1}^{N} e^{-U\,(C_i)/kT}}$$

حيث يُدعى المقدار $\sum_{i=1}^{N} e^{-U\,(C_i)/kT}$ دالة التقسيم.

حيث أن الدالة الأسية تتغير بسرعة في توزيع بولتزمان، فإن أغلب الهيئات المختارة عشوائيا، و ذات الطاقات الكبيرة نسبيا، ستكون لها مساهمات مهملة في المجموع.

للحصول على نتائج دقيقة و حساسة عند محاكاة الجمل الإحصائية ذات التوزيع البولتزماني المتغير بسرعة، من المهم استخدام فكرة الإختيار الأفضل للعينات في حساب المتوسطات بطريقة مونتي كارلو، فقبول الهيئات يكون باحتمال هو أصغر القيمتين 1 أو $e^{-\Delta U/kT}$، الشكل (1).

ينبغي مراعاةُ أن حسابَ المتوسط لا يُبدأُ به حتى تبلغَ الجملةُ التوازنَ، و عموماً ففي محاكاة مونتي كارلو توجد مرحلتان: الأولى، بناءً على هيئة ابتدائية يتم إحداث تحريك لها حتى تُسْتدْرَجَ الجملةُ إلى مقرُبةٍ من التوازن. أمَّا الثانية، فحيث تتطور الجملةُ قريباً من التوازن، تُحسب المتوسطات.

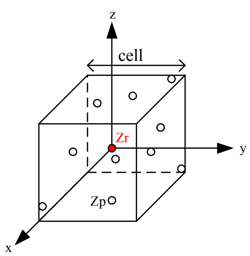


الشكل (1): معيار القبول في طريقة Metropolis

3. الحساب العددي لدوال توزيع المشتقات الفضائية للحقل الكهربائي الموضعي:

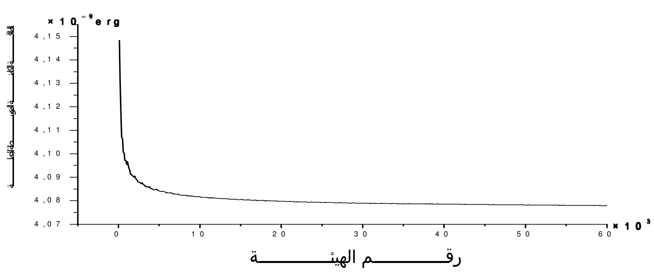
3. 1. وصف برنامج الحساب:

توزع الأيونات عشوائيا داخل خلية مكعبة كما بالشكل (2)؛ إذْ أن كل المواضع داخلها متساوية الإحتمال. يُحَدَّدُ ضلعُ الخلية بالمعطيات الفيزيائية، و هي: الشحنة الأيونية و الكثافة الإلكترونية و درجة الحرارة، و كذا بالمعطيات العددية التي يُزَوَّد بها البرنامج، أما مركز الخلية فبه أيون. يُختار عددُ الأيونات في الخلية بشكل مناسب، يجعل التفاعل لا يمتد إلى الخلايا المجاورة.



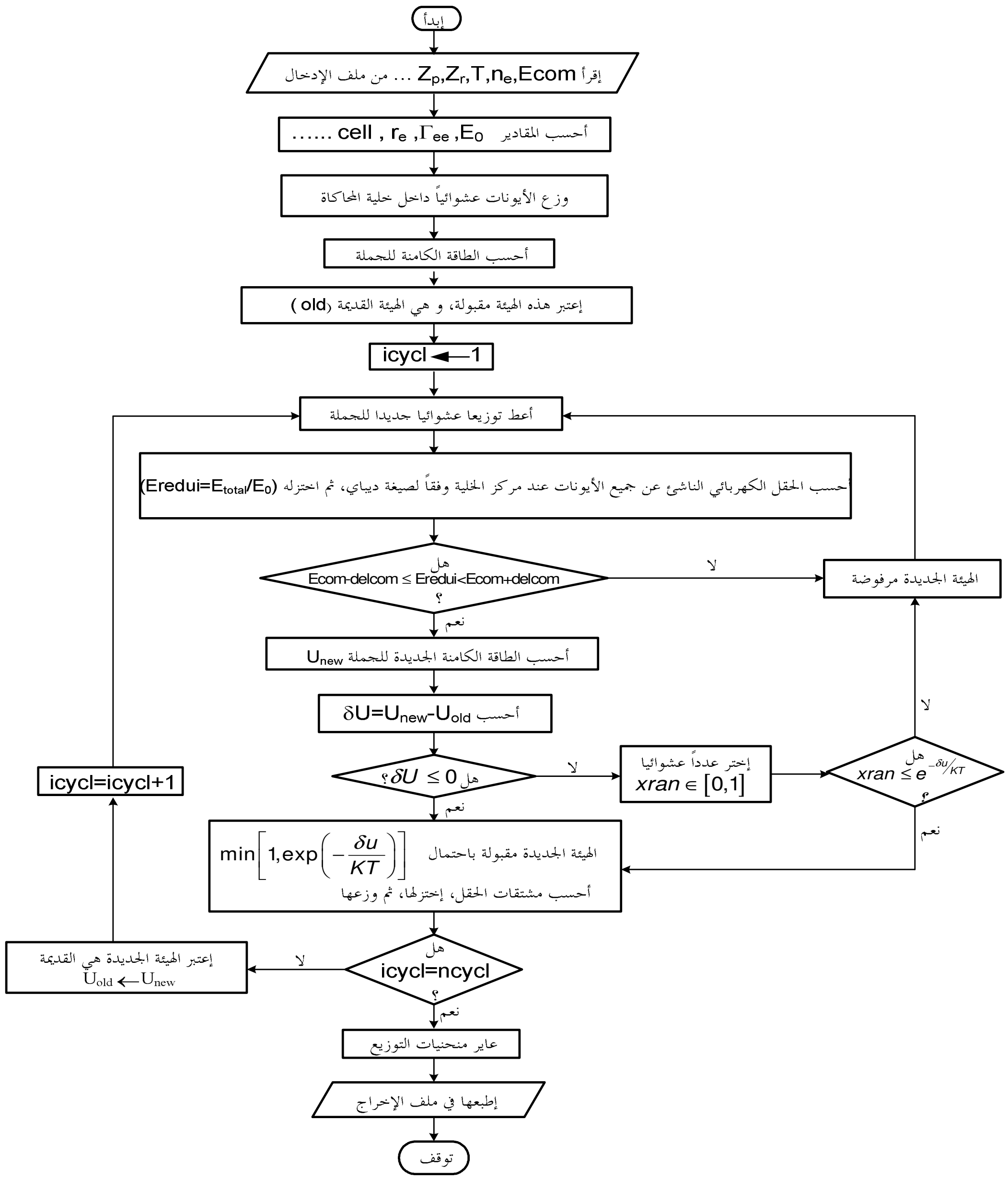
الشكل (2): خلية المحاكاة المكعبة

يتألف برنامج الحساب من شطرين متتاليين، يحسب الشطر الأول دالة توزيع الحقل الكهربائي الموضعي لبلازما ذات شروط فيزيائية محددة، و ذلك قصد استخلاص القيمة الأكثر احتمالا للحقل عند هذه الشروط. أمّا الشطر الثاني فيقوم بحساب دوال توزيع المشتقات الفضائية للحقل الكهربائي الموضعي للبلازما السابقة نفسها، عند قيمة الحقل الموضعي المستخلصة من الشطر الأول، فلا يقبل إلا الهيئات التي تنشئ حقلا مساويا للحقل المطلوب، ثم يختبرها وفقًا لاختبار مونتي كارلو، فيَقْبَلُها أو يرفضُها. لا يُبْدأُ بحساب المشتقات إلا بعد مرور الجملة بعدة آلاف من الهيئات، بعد أن تكونَ قد اقتربت من مرحلة الاتزان الترموديناميكي، مثلما يوضح الشكل (3)، ثم تُحْسبُ المشتقات و تُوزَّع على سلم المقادير الممكنة لها.



الشكل (3): تناقص الطاقة الكامنة للجملة بتناقص عدد الهيئات

الشكل (4) يوضح مخطط انسياب خوارزمية حساب دوال توزيع المشتقات الفضائية للحقل الكهربائي الموضعي، باستخدام طريقة مونتي كارلو.



الشكل (4): مخطط انسياب خوارزمية حساب دوال التوزيع باستخدام طريقة مونتي كارلو

Z_p العدد الذري لأيونات البلازما المحدثة للاضطراب، Z_r العدد الذري للأيون المشع، n_e الكثافة الإلكترونية للوسط، T درجة الحرارة المطلقة للوسط، و لقد اعتبرناها متساوية للأيونات و للإلكترونات $T_e = T_i$، $\lambda = 6,9\sqrt{\frac{T}{n_e}}$ طول ديباي، $r_e = \left(\frac{3}{4\,\pi\, n_e}\right)^{1/3}$ نصف قطر الكرة الإلكترونية، $r_i = \left(\frac{3}{4\,\pi\, n_i}\right)^{1/3}$ نصف قطر الكرة الأيونية، $E_0 = \frac{e}{r_e^2}$ الحقل الوحدوي، و $e = 4.8\times10^{-10} cgs$ الشحنة الإلكترونية.

$\Gamma_{ee} = \frac{e^2}{k\; T\; r_e}$ **معامل التزاوج إلكترون–إلكترون، و** $k = 1.38\times10^{-16} erg\,/\,kelven$ **ثابت بولتزمان.**

يُحسب الحقل الكهربائي الناشئ عن كل الأيونات الموجودة داخل الخلية عند مركزها وفقا لصيغة ديباي المعرَّفة كما يلي:

$$\vec{E} = \sum_{i=1}^{npart} \vec{E}_i = \sum_{i=1}^{npart} \frac{Z_p e}{r_{i0}^2}\left(1+\frac{r_{i0}}{\lambda}\right)\exp\left(-\frac{r_{i0}}{\lambda}\right)\frac{\vec{r}_{i0}}{r_{i0}}$$

أمّا صيغ المشتقات الفضائية لمركبات الحقل الموضعي عند المبدأ المتطابق مع مركز الخلية فهي:

$$\left.\frac{\partial E_x}{\partial x}\right|_{\text{المبدأ}} = Z_p e\left\{\left(1+\frac{r}{\lambda}\right)\left(1-3\left(\frac{x}{r}\right)^2-\frac{x^2}{r\lambda}\right)+\frac{x^2}{r\lambda}\right\}\frac{e^{-\frac{r}{\lambda}}}{r^3}$$

$$\left.\frac{\partial E_y}{\partial y}\right|_{\text{المبدأ}} = Z_p e\left\{\left(1+\frac{r}{\lambda}\right)\left(1-3\left(\frac{y}{r}\right)^2-\frac{y^2}{r\lambda}\right)+\frac{y^2}{r\lambda}\right\}\frac{e^{-\frac{r}{\lambda}}}{r^3}$$

$$\left.\frac{\partial E_z}{\partial z}\right|_{\text{المبدأ}} = Z_p e\left\{\left(1+\frac{r}{\lambda}\right)\left(1-3\left(\frac{z}{r}\right)^2-\frac{z^2}{r\lambda}\right)+\frac{z^2}{r\lambda}\right\}\frac{e^{-\frac{r}{\lambda}}}{r^3}$$

$$\left.\frac{\partial E_x}{\partial y}\right|_{\text{المبدأ}} = \left.\frac{\partial E_y}{\partial x}\right|_{\text{المبدأ}} = -Z_p e\,(xy)\left\{\frac{3}{r^2}\left(1+\frac{r}{\lambda}\right)+\frac{1}{\lambda^2}\right\}\frac{e^{-\frac{r}{\lambda}}}{r^3}$$

$$\left.\frac{\partial E_x}{\partial z}\right|_{\text{المبدأ}} = \left.\frac{\partial E_z}{\partial x}\right|_{\text{المبدأ}} = -Z_p e\,(xz)\left\{\frac{3}{r^2}\left(1+\frac{r}{\lambda}\right)+\frac{1}{\lambda^2}\right\}\frac{e^{-\frac{r}{\lambda}}}{r^3}$$

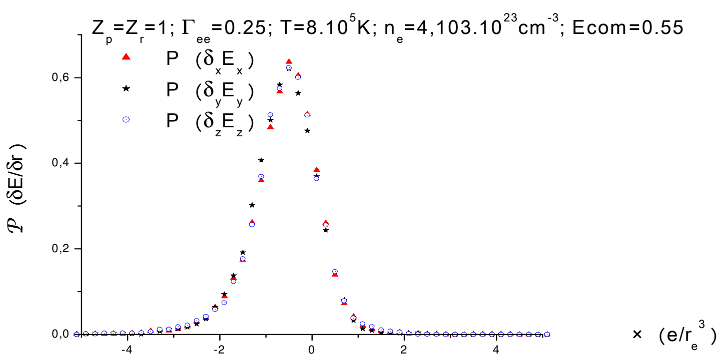
$$\left.\frac{\partial E_z}{\partial y}\right|_{\text{المبدأ}} = \left.\frac{\partial E_y}{\partial z}\right|_{\text{المبدأ}} = -Z_p e\,(zy)\left\{\frac{3}{r^2}\left(1+\frac{r}{\lambda}\right)+\frac{1}{\lambda^2}\right\}\frac{e^{-\frac{r}{\lambda}}}{r^3}$$

لقد سمَّيْنَا $\frac{\partial E_z}{\partial z}$ ، $\frac{\partial E_y}{\partial y}$ ، $\frac{\partial E_x}{\partial x}$ المشتقات القطرية، و سمَّينا $\frac{\partial E_y}{\partial z}$ ، $\frac{\partial E_x}{\partial z}$ ، $\frac{\partial E_x}{\partial y}$ المشتقات اللاّقطرية، وفقًا لمواقعها في المصفوفة التالية:

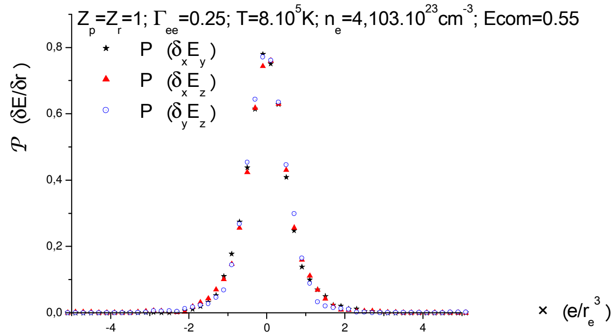
$$\begin{pmatrix} \frac{\partial E_x}{\partial x} & \frac{\partial E_x}{\partial y} & \frac{\partial E_x}{\partial z} \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} & \frac{\partial E_y}{\partial y} & \frac{\partial E_y}{\partial z} \\ \frac{\partial E_z}{\partial x} & \frac{\partial E_z}{\partial y} & \frac{\partial E_z}{\partial z} \end{pmatrix}$$

3. 2. النتائج:

لقد كنا نتوقع قبل إجراء الحسابات أن تتطابق دوال التوزيع القطرية فيما بينها، و كذا اللاّقطرية فيما بينها، ذلك أنه لا يوجد اتجاه مُفَضَّلٌ عن الآخر، بسبب تماثل المناحي الموجود في البلازما، لذلك قمنا بإجراء مقارنات للتأكد من ذلك، و أظهرناها في الشكلين (5) و (6)



الشكل (5): دوال توزيع المشتقات القطرية

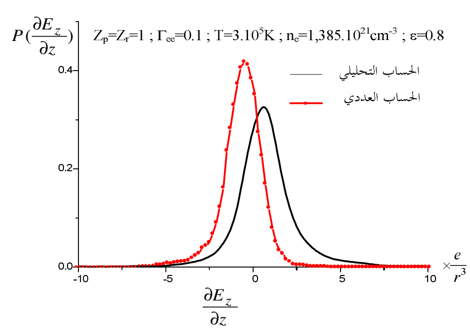


الشكل (6): دوال توزيع المشتقات اللاقطرية

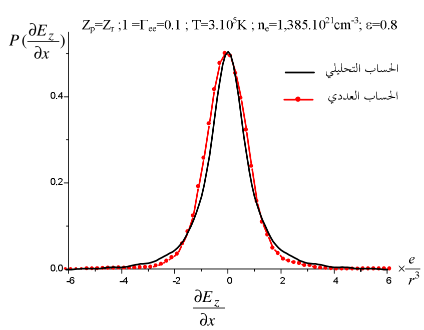
يبدو جلياً مدى التطابق بين دوال توزيع المشتقات القطرية $\frac{\partial E_z}{\partial z}$، $\frac{\partial E_y}{\partial y}$، $\frac{\partial E_x}{\partial x}$ فيما بينها، و كذا بين دوال توزيع المشتقات اللاّقطرية $\frac{\partial E_y}{\partial z}$، $\frac{\partial E_x}{\partial z}$، $\frac{\partial E_x}{\partial y}$ فيما بينها أيضا. إن هذه النتائج تساعدنا في اختزال حساب دوال توزيع المشتقات إلى حساب دالتين فقط، هما دالة توزيع المشتقة القطرية و دالة توزيع المشتقة اللاّقطرية.

3. 3. مقارنات:

لقد قمنا في أعمال سابقة [21-25] بنشر نتائج حسابات تحليلية، تتضمن الدوال التي نحن بصدد حسابها عدديا. من خلال المقارنة بين نتائجنا التحليلية و نتائجنا العددية لمنحنيات دوال توزيع المشتقات الفضائية للحقول الموضعية بدا لنا التقارب واضحا من حيثُ الهيئةُ العامّةُ للمنحنيات، الشكل (7)، خاصة المركبات اللاّقطرية، الشكل (8). أمّا ما يظهر من تباين نتائج الحسابين فيمكن ردُّه إلى اختلاف اعتبار التفاعل فيهما؛ ففي الحساب التحليلي اعتبرنا فقط طاقةَ التفاعل بين الأيون المشع و الأيونات المحدثة للاضطراب، و أهملنا بقية التفاعلات، في حين أَخذنا في الحساب العددي كلَّ التفاعلات بعين الاعتبار، و لعلَّ تحليلًا أكثرَ دقةً كفيل بترجيح بعض النتائج عن الأخرى.



الشكل (7): مقارنة بين الحساب العددي و الحساب



الشكل (8): مقارنة بين الحساب العددي و الحساب

خلاصة:

لقد قمنا في هذا العمل بإيجاد دوال توزيع المشتقات الفضائية للحقول الكهربائية الأيونية الموضعية في البلازما باستخدام المحاكاة العددية مونتي كارلو. لقد تبيّن لنا أن العناصر القطرية في مصفوفة دوال التوزيع متساوية فيما بينها، كما أن بقية العناصر اللاّقطرية متساوية فيما بينها أيضا، و هو أمرٌ متوقَّع جدا بسبب تماثل المناحي في البلازما التي نعالجها.

إن المقارنة التي أجريناها بين حساباتنا العددية و حساباتنا التحليلية بيّنت تقاربا واضحا بينها، رغم بعض الاختلاف الذي يمكن ببساطة ردُّه إلى التفاعلات المعتبرة في الحسابين و كذا للتقريبات المتخَذَّة في الحساب التحليلي.

مما سبق يتبين لنا أنه من المجدي و المفيد جدا استخدام المحاكاة العددية بطريقة مونتي كارلو؛ ذلك أنها توفر لنا الكثير من خطوات الحساب، و تُجنِّبنا الغوص في تفاصيل المعادلات و التقريبات و الترجيحات، كما أنها سريعة نسبيا و تعطي نتائج يمكن التعويل عليها لاستخدامها لحساب مقادير أخرى.

المراجع:

[1] H. R. Griem ; ***"Spectral Line Broadening by Plasmas"***, New York, Academic Press (1974).
[2] D. Salzmann ; ***"Atomic Physics in Hot Plasmas"***, Oxford University Press (1998).
[3] H. B. Nersisyan, C. Toepffer and G. Zwicknagel ; Phys. Rev. E **72**, 036403 (2005).
[4] K. Chenini, F. Khelfaoui, S. Guerricha, S. Chihi, A. Ouahab and M.T. Meftah ; Contrib. Plasma Phys, Vol. **51**, No. 1, 34-43 (2011).
[5] I. O. Golosnoy ; Plasma Physics Reports, Vol. **27**, No. 6, pp. 497–506 (2001).
[6] H. R. Griem, J. Halenka and W. Olchawa ; J. Phys. B, **38**, 975–1000 (2005).
[7] W. Filkenburg ; Z. Phys. **70**, 375 (1931).
[8] C. Stehlé, D. Gilles, and A.V. Demura ; Eur. Phys. J. D **12**, 355-367 (2000).
[9] A.V. Demura, G.V. Demchenko and D. Nikolic ; Eur. Phys. J. D **46**, 111-127 (2008).
[10] J. Halenka and W. Olchawa ; Eur. Phys. J. D **42**, 425-433 (2007).
[11] G.V. Sholin ; Opt. Spectrosc. (USSR) **26**, 275 (1969).
[12] L.P. Kudrin and G.V. Sholin ; Sov. Phys. Dokl. **7**, 1015 (1963).
[13] S. Sorge and S. Günter ; Eur. Phys. J. D **12**, 369-375 (2000).
[14] V. Demura and G. V. Sholin ; J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, **15**, 881 (1975).
[15] N. Limnios ; **"Introduction à la méthode de Monte Carlo"**, Université Technologique de *Compiègne* (UTC) (2005).
[16] Michael S. Murillo and Jon C. Weisheit ; Physics Reports, **302**, 1-65 (1998).
[17] M. K. Hadj-Kali ; Thèse de doctorat, Ecole Nationale Polytechnique d'Alger (2004).
[18] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth. A.H. Teller and E. Teller, J. Chem. Phys. **21,** 1087-1092 (1953).
[19] Paul Coddington ; ***"Monte Carlo Simulation for Statistical Physics"***, Northeast Parallel Architectures Center, Syracuse University, (January 1996).
[20] M. P. Allen and D. J. Tildesley ; ***"Computer Simulation of liquids"***, Clarendon Press, Oxford (1987).
[21] S. Chihi and S. Guerricha, Journal of Plasma Physics, Cambridge University Press 2013, Published online: 02 avril 2013.
[22] S. Guerricha, S. Chihi and M. T. Meftah ; AFSSI, Vol. **1** n°3 ; pp 32-42 (2009) (article in arabic).
[23] S. Guerricha ; Mémoire de magister, Université de Ouargla (2008).
[24] S. Guerricha and S. Chihi ; SIPP2011, University of Ouargla (2011).
[25] S. Guerricha, S. Chihi and M.T. Meftah ; Spectral Line Shapes Vol. **15**, edited by M.A Gigosos and M.A Gonzalez, AIP conference Proceeding 1058, AIP , N.Y., 2008, pp. 72-74.