

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الفيزياء



مذكرة

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

فرع: فيزياء

تخصص: فيزياء الإشعاعات

من إعداد الطالبة: طويل مريم

بعنوان:

نمذجة التصادمات بطريقة مونتي كارلو لجسيمات غاز لمركبة
واحدة أو اثنتين مع سطح

نوقشت بتاريخ:

2020 / 09 / 29

أمام أعضاء لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا	جامعة ورقلة	أستاذ تعليم عال	أ.د. بابا حني أم الخير
ممتحنا	جامعة ورقلة	أستاذ محاضر(ب)	د. لمقدم سومية
مشرفا	جامعة ورقلة	أستاذ تعليم عال	أ.د. فتحي خلفاوي

الموسم الجامعي: 2020/2019

الإهداء

إلى

أمي الغالية

روح والدي تغمده الله برحمته

إخوتي

كل الأهل والأحباب والعائلة الكريمة

إلى خالي العزيز (طارق علالي)

كل صديقاتي

كل من علمني حرف

أهدي ثمرة هذا الجهد

طويل مريم

تشكرات

أتقدم أولاً وآخراً بشكر الله عز وجل الذي بنعمته تتم الصالحات فله الحمد حتى يرضى وله الحمد إذا رضي وله الحمد بعد الرضا.

أتقدم بالإمتنان والشكر والعرفان إلى أستاذي أ.د. خلفاوي فتحي أستاذ تعليم عال بجامعة ورقلة على منحي أفضل فرصة علمية بأن يكون مؤظراً لي وتحمله من ذلك عبئاً كبيراً وصبراً طويلاً في مختلف مراحل إعداد هذه المذكرة والذي أثبت لي بأن العلم أخلاق.

أتقدم بالشكر الجزيل لأعضاء لجنة المناقشة الأساتذة الأجلاء:

أ.د. باباحنى أم الخير أستاذ تعليم عال بجامعة ورقلة على تقبلها رئاسة لجنة المناقشة.

د. لمقدم سومية أستاذة محاضرة (ب) بجامعة ورقلة على تقبلها مناقشة هذه المذكرة.

أشكر كل القائمين على مخبر الفيزياء الإشعاع والبلازما وفيزياء السطوح (LRPPS)

على توفيرهم كل إمكانيات والظروف المتاحة لديهم.

أشكر أعضاء العائلة لمساندتهم المعنوية وتوفيرهم ظروف عمل مناسبة في هذه الفترة

العصيبة لوباء COVID-19 ؛ رفع الله الوباء والبلاء على البلاد والعباد.

كما لا أنسى أن أتقدم بالشكر الجزيل إلى صديقاتي ربيعة وشيماء وسعدية.

فهرس المحتويات

i	الإهداء
ii	التشكرات
iii	فهرس المحتويات
vi	قائمة الأشكال والجداول
1	المقدمة العامة

الفصل الأول: عموميات حول التصادمات والتفاعل غاز سطح

03	1. النظرية الحركية للغازات
03	II. نظرية التصادمات
03	1. II. التصادمات المرنة
04	2. II. التصادمات غير المرنة
04	III. نظرة عامة حول البلازما وخصائصها و مقاديرها الفيزيائية
04	1. III. تعريف البلازما
04	2. III. درجة التأين
05	3. III. طول ديبياي λ_D
05	4. III. تردد البلازما $\omega_{p,e,i}$
06	5. III. درجة الحرارة
06	6. III. تعريف تردد التصادم
06	7. III. متوسط المسار الحر
07	8. III. المقطع الفعال للتصادم
07	IV. أنواع الإنتقال الحراري
07	1. IV. الإنتقال الحراري بالتوصيل
08	2. IV. إنتقال الحرارة بالإشعاع
08	3. IV. إنتقال الحرارة بالحمل
08	1. 3. IV. الحمل الحراري الطبيعي
09	2. 3. IV. الحمل الحراري القسري
09	3. 3. IV. الظروف المتحكممة في سريان السوائل والغازات
09	4. 3. IV. سريان السوائل والغازات على الأسطح
10	5. 3. IV. تأثير الغازات بجوار الأسطح أثناء عملية التلحيم

11.....	7. بعض التعريفات المهمة في الفيزياء الإحصائية.
11.....	7.1. توزيع ماكسويل - بولتزمان للسرعات.
12.....	7.2. التوزيع العشوائي.
13.....	7.6. طرق المحاكاة العددية.
13.....	7.6.1. طريقة الديناميكا الجزيئية.
13.....	7.6.2. طريقة مونتني كارلو.
14.....	7.6.3. مميزات تقنية المحاكاة مونتني كارلو.
14.....	7.6.4. مبدأ نموذج محاكاة مونتني كارلو.

الفصل الثاني : المحاكاة العددية بطريقة مونتني كارلو

16.....	1. مقدمة.
16.....	2. الظاهرة الفيزيائية.
17.....	3. النموذج الرياضي.
17.....	4. النموذج العددي.
17.....	4.1. خلية المحاكاة المقترحة للدراسة.
18.....	4.2. شروط الحدودية الدورية.
18.....	4.3. خطوات برنامج دراسة التصادم (غاز - سطح) باستعمال لغة الفورترن 77.
24.....	4.4. مخطط برنامج الحساب العددي.

الفصل الثالث: نتائج وتحاليل

26.....	1. مقدمة.
26.....	2. دوال التوزيع النظرية المعتمدة في المحاكاة.
26.....	2.1. دوال التوزيع للسرعات حسب المركبات.
27.....	2.2. دالة التوزيع للمسار الحر للجسيمات.
27.....	3. نتيجة الموضوع الجديد (النهائي).
28.....	4. نتيجة الإحصاء الأولي لطبيعة التصادمات عند تصادم واحد.
28.....	4.1. نتائج نسب التصادم.
29.....	4.2. نتائج القيمة المتوسطة للسرعات.
30.....	4.2.1. قبل التصادم مع السطح.
30.....	4.2.2. بعد التصادم مع السطح.
31.....	4.2.3. قبل التصادم في الحجم.

32.....	4.2.IV. بعد التصادم في الحجم.
32.....	5.2.IV. قبل التصادم خارج الحجم.
33.....	3.IV. توزيع السرعات.
33.....	3.IV. 1. توزيع سرعة عند السطح.
34.....	3.IV. 2. توزيع السرعة في الحجم.
35.....	3.3.IV. توزيع السرعات خارج الحجم.
35.....	V. الإحصاء لطبيعة التصادمات من أجل التصادمات متتالية.
35.....	1.V. نسب التصادمات من أجل التصادمات متتالية.
36.....	2.V. القيم المتوسطة للسرعات من أجل التصادمات متتالية.
36.....	1.2.V. بعد التصادم مع السطح.
36.....	2.2.V. بعد التصادم في الحجم.
37.....	3.2.V. قبل التصادم خارج الحجم.
37.....	3.V. توزيع السرعات من أجل تصادمات متتالية.
37.....	1.3.V. عند السطح.
38.....	2.3.V. عند الحجم.
39.....	3.3.V. خارج الحجم.
39.....	VI. تأثيرات أبعاد الخلية.
39.....	1.VI. قبل التصادم في السطح.
40.....	2.VI. قبل وبعد التصادم في الحجم.
41.....	3.VI. قبل التصادم خارج الحجم.
42.....	الخلاصة العامة و الآفاق
44.....	قائمة المراجع

قائمة الأشكال والجداول

قائمة الأشكال:

الفصل الأول	
07	الشكل (1.1): مخطط بسيط للطرق الثلاث لإنتقال الحرارة.
11	الشكل (2.1): تغير درجة حرارة سطح عند التلحيم بالليزر لصفحة معدنية.
12	الشكل (3.1): نموذج للحركة البراونية في خلية محاكات بطريقة مونتني كارلو.
الفصل الثاني	
16	الشكل (1.11): مخطط موضح للظاهرة الفيزيائية.
18	الشكل (2.11): رسم لخلية المحاكاة المقترحة للدراسة.
18	الشكل (3.11): رسم توضيحي للشروط الحدية الدورية.
22	الشكل (4.11): سرعة الجسيمات في مستوى التصادم.
25	الشكل (5.11): مخطط سير الحساب العددي.
الفصل الثالث	
27	الشكل (1.111): دالة التوزيع للسرعة وفق توزيع ماكسويل بولتزمان حسب المركبة z.
27	الشكل (2.111): دالة التوزيع للمسار الحر للجسيمات.
28	الشكل (3.111): نتيجة الموضع النهائي ل 20 جسيمة.
29	الشكل (4.111): نتائج للنسبة بين عدد التصادمات في الحجم و العدد الكلي للجسيمات المختارة عشوائيا.
29	الشكل (5.111): نتائج للنسبة بين عدد التصادمات مع السطح وخارج الحجم و العدد الكلي للجسيمات المختارة عشوائيا.
30	الشكل (6.111): نتائج القيمة المتوسطة لسرعة الجسيمات قبل التصادم مع السطح.
31	الشكل (7.111): نتائج القيمة المتوسطة لسرعة الجسيمات بعد التصادم مع السطح.

31	الشكل(8.III): نتائج القيمة المتوسطة لسرعة الجسيمات قبل التصادم في الحجم.
32	الشكل(9.III): نتائج القيمة المتوسطة لسرعة الجسيمات بعد التصادم في الحجم.
33	الشكل(10.III): نتائج القيمة المتوسطة لسرعة الجسيمات بعد التصادم خارج الحجم.
34	الشكل(11.III): توزيع السرعة عند تصادم مع السطح للمركبات المحسوبة بالمحاكاة مع منحنى دالة التوزيع للسرعات على المركبة Z.
34	الشكل(12.III): توزيع السرعة قبل التصادم في الحجم للمركبات المحسوبة مع منحنى دالة التوزيع للسرعات وفق المركبة النظرية Z.
35	الشكل(13.III): توزيع السرعة بعد تصادم الحجم لمركبات السرعة المحسوبة بالمحاكاة مع المركبة النظرية Z.
35	الشكل(14.III): توزيع السرعة عند التصادم خارج الحجم لمركبات السرعة المحسوبة بالمحاكاة مع المركبة النظرية Z.
37	الشكل 15.III: توزيع السرعة عند التصادم مع السطح للمركبات المحسوبة بالمحاكاة مع منحنى دالة التوزيع للسرعات على المركبة Z عند إجراء 10 تصادمات متتالية.
38	الشكل 16.III: توزيع السرعة قبل التصادم في الحجم للمركبات المحسوبة بالمحاكاة مع منحنى دالة التوزيع للسرعات على المركبة Z عند إجراء 10 تصادمات متتالية.
38	الشكل(17.III): توزيع السرعة بعد التصادم في الحجم للمركبات المحسوبة بالمحاكاة مع منحنى دالة التوزيع للسرعات على المركبة Z عند إجراء 10 تصادمات متتالية.
39	الشكل(18.III): توزيع السرعة قبل التصادم خارج الحجم للمركبات المحسوبة بالمحاكاة مع منحنى دالة التوزيع للسرعات على المركبة Z عند إجراء 10 تصادمات متتالية.
39	الشكل III. 19: توزيع السرعة قبل التصادم في السطح للمركبات المحسوبة بالمحاكاة في بعد $4\lambda_0 6\lambda_0$ لخلية المحاكاة.
40	الشكل(20.III): توزيع السرعة قبل التصادم في الحجم للمركبات المحسوبة بالمحاكاة في بعد $4\lambda_0 6\lambda_0$ لخلية المحاكاة
40	الشكل(21.III): توزيع السرعة بعد التصادم في الحجم للمركبات المحسوبة بالمحاكاة في بعد $4\lambda_0 6\lambda_0$ لخلية المحاكاة.
41	الشكل(22.III): توزيع السرعة قبل التصادم خارج الحجم للمركبات المحسوبة بالمحاكاة في بعد $4\lambda_0 6\lambda_0$ لخلية المحاكاة.

قائمة الجداول:

الفصل الثالث	
30	الجدول(1.iii): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات قبل التصادم مع السطح.
30	الجدول(2.iii): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات بعد التصادم مع السطح.
31	الجدول(3.iii): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات قبل التصادم في الحجم.
32	الجدول(4.iii): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات بعد التصادم في الحجم.
32	الجدول(5.iii): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات قبل التصادم خارج الحجم.
36	الجدول(6.iii): نتائج نسب التصادمات من أجل تصادمات متتالية.
36	الجدول(7.iii): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات بعد التصادم مع السطح من أجل 10 تصادمات متتالية.
36	الجدول(8.iii): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات بعد التصادم في الحجم من أجل 10 تصادمات متتالية.
39	الجدول(9.iii): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات قبل التصادم خارج الحجم من أجل 10 تصادمات متتالية.

المؤتمنة العامة

المقدمة العامة

التلحيم هو العملية التي تسمح بإعادة ربط أو صهر المعادن فيما بينها أي البناء المعدني بين أسطح العناصر المراد تجميعها لتتشتت الأسطح. من أجل تنشيط الأسطح يمكن اعتبار الانصهار طريقة فعالة جدا من أجل ضمان تثبيت رابطة بين المعادن المراد وصلها مع بعضها وبالتالي يتم الحصول بعد التصلب على قطعة متجانسة من نفس التركيب المعدن الأساسي أو قطعة غير متجانسة في حالة اللحام بين المعادن المختلفة [1].

نقترح في هذه الدراسة دراسة تصادمات جنس من جسيمات غازية؛ ولتكن مثلا جزيئات أو أيونات أو الإلكترونات ذات كتل m وسرعات v_p تحقق توزيع السرعة $f(v)$. يحدث التصادم مع سطح عند درجة حرارة T_s ، بينما درجة حرارة الغاز T_g . في هذه الدراسة كان الجنس المختار هو جزيئات الأكسجين أو النيتروجين باعتبار أن عملية التلحيم تتم في الهواء. الإشكالية هنا مرتبطة بما هو مقدار تبادل الطاقة بين جسيمات هذا غاز بعد اصطدامه بالسطح أثناء عملية التلحيم.

الهدف من مشروع المذكرة هذه هو المعالجة المجهرية لتصادم جسيمات الغاز مع السطح. تم اقتراح طريقة مونتّي كارلو للنمذجة العددية الخاصة بنا. يمكن للنمذجة المقترحة أن تساعد في اقتراح الظروف المناسبة من كثافة جسيمات ودرجات حرارة وسرعات على مستوى الفضاء غاز-سطح.

تقنيات المحاكاة الذرية مثل الديناميك الجزيئي (DM) ومونتّي كارلو (MC) لها إمكانيات كبيرة في فهم ظاهرة التفاعل بلازما-سطح [2]. فمعرفة الخوارزمية ضرورية لتطوير محاكاة مونتّي كارلو؛ حيث أن في الفيزياء الإحصائية لا يمكن سوى حل عدد قليل من المسائل بضبط ودقة. بالنسبة للمسائل المعقدة يمكن للطرق العددية أن تعطي نتائج دقيقة للمشكلات التي لا يمكن حلها إلا بالطرق التقريبية [3].

في عملنا هذا سنقوم بتحديد نسب التصادمات والقيم المتوسطة وتوزيع سرعات جزيئات الأكسجين أو النيتروجين بعد تصادمها مع السطح أثناء عملية التلحيم في الهواء في درجة حرارة معلومة. وقد تم انجاز هذا العمل في ثلاث فصول:

الفصل الأول: نتطرق فيه لدراسة وجيزة عن الغاز والبلازما بشكل عام وخصائصها المعروفة: تعريفها وبعض المفاهيم الفيزيائية لخصائصها كتردد التصادم وتردد البلازما ومتوسط المسار الحر ثم نتطرق إلى أنواع التوزيعات في الإحصاء كما ذكرنا عبارات توزيع ماكسويل بولتزمان على المركبات الثلاث. بعد ذلك قدمنا دراسة نظرية لطرق انتقال الحرارة سريان الموائع وعلاقتها الرياضية وتطرقنا بالتفصيل إلى الانتقال الحرارة بالحمل وأنواعه والأوساط الذي يحدث فيه.

الفصل الثاني: نقدم في هذا الفصل شرح لتقنية المحاكاة العددية المعتمدة لدراسة هذه الظاهرة وهي محاكاة بطريقة مونت كارلو. حيث قمنا بتقديم مواصفات خلية المحاكاة و النموذج الرياضي والنموذج العددي المعتمد في هذه الدراسة. في الأخير نضع مخطط سير الحساب العددي لبرنامجنا.

الفصل الثالث: في هذا الفصل نعرض قيم نتائج برمجة محاكاة مونت كارلو , والتي حصلنا عليها من خلال إدخال قيم عشوائية لمواضع جسيمات الغاز، الموجود في ضغط ودرجة حرارة ثابتين ($T_g=600K, P=1atm$), في ثلاث ابعاد ومتوسط المسار الحر. برنامج المحاكاة بدوره يحسب توزيع أيونات والجسيمات الجديد في تصادم المرن بين الجسيمات والسطح. نختم هذا البحث بمناقشة النتائج واقتراح آفاق مستقبلية لهذه الدراسة.

الفصل الأول

عموميات حول التصانيفات

والتفاضل فاز سطح

الفصل الأول: عموميات حول التصادمات والتفاعل غاز سطح

I. النظرية الحركية للغازات

هي نظرية تخص الغازات وهي عبارة عن حركة عشوائية للجزيئات الغاز المدروس نتيجة لدرجة حرارة معينة. في أبسط نموذج لها يمكن تصور الغاز على أنه عبارة عن مجموعة من كرات البلياردو الصغيرة عادة ما تتحرك هذه الكرات (الجزيئات) في خط مستقيم ومع ذلك عندما يلتقي إثنان منهما يحدث تصادم مما يؤدي إلى إنحراف فوري لكل منهما [4]. في وسط بلازما وبفعل تأثير الحقول الكهربائية والمغناطيسية الخارجية أو المحلية قد تكون المسارات خطوط منحنية بين التصادمين المتتاليين.

II. نظرية التصادمات

هي نظرية تفرض حدوث رد فعل بين الجسيمات المتفاعلة من أجل معرفة سبب وقوع التفاعلات الكيميائية ومن أجل معرفة سرعة التفاعلات باختلاف المواد المتفاعلة وهي نظرية مرتبطة بالنظرية الحركية للغازات.

يمكن أن تفسر هذه النظرية حدوث التفاعل بين الجسيمات المدروسة عن طريق مجموعة محددة من التصادمات تملك الطاقة اللازمة لحدوث التصادم (التلامس) الفعال (المثمر) الذي يسبب تحول المتفاعلات إلى نواتج وهذا يعود إلى عدد محدد من الجسيمات يملك الطاقة اللازمة والزاوية المناسبة أثناء التصادم من أجل كسر الروابط الموجودة بين الجسيمات المتفاعلة وتشكيل مجموعة جديدة من الروابط (أواصر). تسمى هذه التصادمات بالتصادمات الفعالة (المثمرة). وتتقسم التصادمات إلى نوعين: تصادمات مرنة وتصادمات غير مرنة [5].

1. II. التصادمات المرنة

التصادم المرن هو تصادم تكون فيه الطاقة الحركية الكلية بعد التصادم مساوية للطاقة الحركية الكلية قبل التصادم ويحدث هذا النوع من التصادمات عندما لا يتحول أي جزء من الطاقة الحركية الكلية إلى نوع آخر من الطاقة وتكون فيه كمية حركة الجسيمات محفوظة قبل وبعد التصادم [5].

كما يمكن تمثيله بتصادم كرتين صلبتين مع الحفاظ على إجمالي الطاقة الحركية قبل وبعد التصادم هذا هو الحال بشكل خاص في حالة التصادمات المحايدة للإلكترونات منخفضة الطاقة (عند الطاقة العالية يقترب الإلكترون من الذرة جدا والمجال الكهربائي المتولد عن الإلكترون الساقط يؤثر على الإلكترونات المرتبطة بالذرة) [6].

2.11. التصادمات غير المرنة

هو عكس التصادم المرن وفيه يحدث تشتت للجسيمات المدروسة وتغير في الطاقة الحركية الابتدائية أي أن الطاقة الحركية للجسيمات المتفاعلة لا تساوي الطاقة الحركية للجسيمات الناتجة في هذه التصادمات. ويحدث هذا النوع من التصادم عندما يتحول جزء من الطاقة الحركية الكلية إلى نوع آخر من الطاقة أما عن كمية الحركة فتبقى محفوظة أيضا في هذا النوع من التصادم [5].

في هذه التصادمات يوجد تغير في الطاقة الداخلية لواحدة على أقل من الجسيمات المدروسة (مثل الإثارة والرجوع للحالة الأساسية) وربما حتى إنشاء وإفناء الجسيمات أيضا بإمكاننا قول أنه لا يوجد فقط إنحفاظ لكمية الحركة وتبادل الطاقة الحركية أيضا تحويل الطاقة الحركية إلى طاقة كيميائية والعكس بالعكس [4].

11.1. نظرة عامة حول البلازما وخصائصها و مقاديرها الفيزيائية**1.11. تعريف البلازما**

تمثل البلازما نسبة 99% من المادة الكونية بين النجوم والمجرات من حيث الكتلة والحجم كما أن بعضا من الكواكب تشكل البلازما أغلب مادتها [7]. البلازما هي الحالة الرابعة للمادة تمتاز عن غيرها من الحالات بالطاقة الهائلة التي تمتلكها وهي عبارة عن وسط غازي مؤين يحتوي عددا كبيرا وكافيا من الجسيمات المشحونة سلبيا (الإلكترونات و أيونات سالبة) والجسيمات المشحونة إيجابا (أيونات موجبة) والجسيمات المحايدة هذا الوسط يحجب نفسه إلكتروناتكيا عند مسافة صغيرة [8].

11.2. درجة التأين

في الحالة الطبيعية تكون درجة التأين راجعة إلى عدم وجود جسيمات حرة مشحونة وبالتالي يمكننا أن نقول عنها أنها:

تمثل درجة تأين البلازما إحدى معايير التي نميز بها صنف البلازما وهي عبارة عن النسبة بين كثافة الجسيمات المشحونة (الإلكترونات وأيونات) والكثافة الإجمالية للبلازما نعبر عنها رياضيا بالطريقة التالية [4]:

$$\alpha = \frac{n_{ei}}{n_{ei} + N_n} \quad (1.1)$$

n_{ei} : الكثافة العددية للجسيمات المشحونة (الإلكترونات أيونات)
 N_n : الكثافة العددية للجسيمات المحايدة

3. III. طول ديبياي λ_D

يعرف طول ديبياي على أنه المسافة التي يحدث عندها تقريبا حجب لتأثير الشحنة ويرجع تسميته إلى العالم الهولندي بيتر ديبياي [8].

وهو المسافة التي يحدث عندها حجب للفعل الكموني الناتج للجسيمة المشحونة (إلكترونات أو أيونات) داخل البلازما. هذا الكمون يدعى كمون ديبياي ويعطى بالعلاقة التالية [9]:

$$v_{debye} = \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0 r \exp(-r / \lambda_D)} \quad (2.1)$$

حيث λ_D يمثل طول ديبياي

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T}{q_e^2 n_e}} \quad (3.1)$$

$$\lambda_D = 6.9 \sqrt{\frac{T_e(K)}{n_e(cm^3)}} \quad (4.1)$$

حيث n_e و T_e الكثافة الإلكترونية و درجة حرارة الإلكترونات على التوالي.

4. III. تردد البلازما $\omega_{p,e,i}$

هو تردد مرتبط بالحركة الإهتزازية الكولومية للجسيمات المشحونة داخل البلازما نتيجة لإزاحتها عن وضع الإتزان بسبب إضطرابات خارجية إلا أنها سرعان ما تعود إلى حالة الإتزان. تم اكتشاف هذه الحركة الإهتزازية لأول مرة من طرف الفيزيائي الهولندي فرانك ميشيل بينينج سنة 1926. يعطى تردد البلازما بالنسبة للإلكترونات والإيونات بالصيغة الآتية [10]:

$$\omega_{p,e} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m_e}} \quad (5.1)$$

حيث e شحنة الإلكترون و n_e الكثافة الإلكترونية و m_e كتلة الإلكترون أما عن الأيونات :

$$\omega_{p,i} = \sqrt{\frac{4\pi (ze)^2 n_i}{m_i}} \quad (6.1)$$

حيث ze شحنة الأيون و n_i الكثافة الأيونية و m_i كتلة الأيون.

III.5. درجة الحرارة

في الغاز المتأين يمكن أن يكون للجزيئات درجات حرارة مختلفة للغاية. بسبب النقص في كتلة الإلكترونات يمكن أن تكتسب طاقة عالية بسرعة، قياس الطاقة يمثل قيمة درجة حرارة التحريك الحرارية T_e على سبيل المثال الغاز المؤين داخل المختبر الطاقة $K_B T_e$ الخاصة بالإلكترونات يعبر عنها بـ الإلكترون فولت ($1\text{eV} = 1.6 \cdot 10^{-19}\text{J}$) وهذا يتوافق أو يتماشى مع درجات حرارة أعلى من 10000K (بتعبير أدق $1\text{eV} = 11594\text{K}$) [11].

III.6. تعريف تردد التصادم

يمثل عدد التصادمات مع السطح بوحدة الزمن فبإمكاننا قول أن من أجل مجموعة من إلكترونات الواردة ذات الطاقة الحركية المعبر عنها بـ (eV الإلكترون فولت) u_{ev} لدينا العلاقة العددية التالية [11] [26]:

$$Z = \delta \sqrt{c_{rel}} \frac{N}{V} \quad (7.1)$$

N : عدد الجسيمات في الحجم V .

δ : المقطع الفعال الهندسي للتصادم حيث $\delta = \pi d^2$ بحيث $d = \frac{1}{2}(d_a + d_b)$ أين يكون كل من d_a, d_b أقطار الجسيمين المتصادمين.

$$c_{rel} = \left[\frac{8K_B T}{\pi \mu} \right]$$

السرعة النسبية المتوسطة.

$\mu = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b}$: الكتلة المختزلة بين الجسيمين المتصادمين حيث m_a, m_b كتلة الجسيمين المتصادمين.

III.7. متوسط المسار الحر

ندخل مفهوم متوسط المسار الحر وهي المسافة التي يقطعها جسيم ما بين تصادمين ومن ثم ينتج إنحرافين وتتصف هذه العملية بالعشوائية الصرفة ويعطى بالعلاقة التالية [12]:

$$\lambda = \frac{1}{n_g \delta} \quad (8.1)$$

n_g : هي كثافة الغاز

δ : هو المقطع الفعال للتصادم بين الجسيمين.

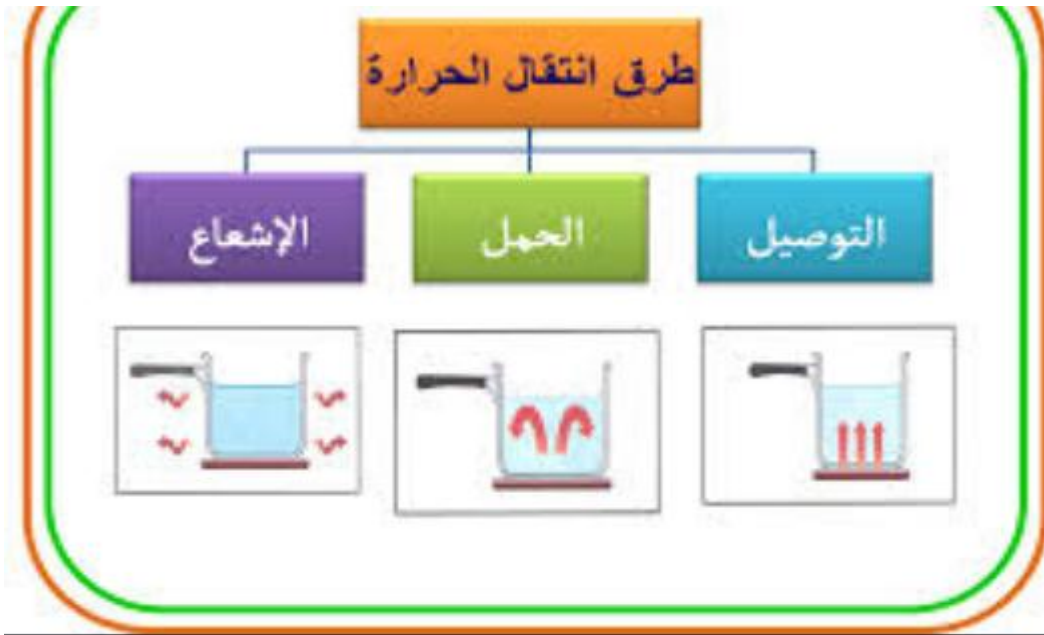
8.III. المقطع الفعال للتصادم

بإمكاننا التعبير عن مدى التصادم بين جسيمين بما يعرف بالمقطع الفعال للتصادم بحيث عند التصادم بين جسيمين a و b قيمة قطرها r_a و r_b على الترتيب فان المقطع الفعال حسب النظرية الحركية للغازات مساحة قرص التصادم بين الجسمين المتصادمين [12]:

$$\delta_{ab} = \pi.(r_a + r_b)^2 \quad (9.1)$$

IV. أنواع الانتقال الحراري

سننتقل إلى الأنواع الثلاث المعروفة للانتقال الحراري وهي موضحة في الصورة التالية ولكن في هذه الدراسة سنركز على الانتقال الحراري بالحمل على اعتبار دراستنا مرتبطة بمائع ألا وهو الهواء أثناء عملية التلحيم:



الشكل (1.1): مخطط بسيط لطرق الثلاث لانتقال الحرارة [13].

1.IV. الانتقال الحراري بالتوصيل

يعرف على أنه الانتقال الحراري في الأجسام الصلبة من جزء إلى جزء مجاور [14]:

$$Q = -k.gradT \quad (10.1)$$

Q : تمثل القيمة الشعاعية لكمية الحرارة المتحولة في وحدة الزمن ووحدة السطوح في اتجاه تناقص درجة الحرارة.

k : الناقلية الحرارية ($W.m^{-1}.K^{-1}$).

$gradT$: يمثل تدرج درجة الحرارة.

2.IV. إنتقال الحرارة بإشعاع

بعد دراسة الأمواج الكهرومغناطسية استنتج الفيزيائيون أن كل مادة درجة حرارتها أكبر من الصفر المطلق ($T > 0K$) تصدر أو تبت أو تشع أمواجا كهرومغناطسية ذات أطوال مختلفة تتراوح قيمتها بين $10^{-3}m$ و $10^{-7}m$ لتصل إلى مادة أخرى ذات درجة حرارة مختلفة [14].

3.IV. إنتقال الحرارة بالحمل

في هذه الفقرة سندرج مفهوم انتقال الحرارة بالحمل:

تنتقل الحرارة بالحمل عن طريق تحرك جزيئات المادة من الأماكن الساخنة إلى الأماكن الباردة حاملة معها الحرارة ولهذا فالحمل الحراري يحدث فقط في الغازات والسوائل (الموائع) حيث تكون جزيئات المادة طليقة الحركة فيما بينها لدينا كمثال تسخين إناء يحتوي على سائل من الأسفل حيث يسخن أولاً من أسفل ثم تنتزع الحرارة بالحمل إلى جميع أنحاء السائل وكذلك عند تبريد سطح ساخن مثلاً في الهواء فالحرارة تنتقل من السطح للهواء المجاور بالحمل الحراري ويترافق معه إنتقال للمادة [15]:

$$\Delta w = h(T_s - T_{gaz}) \quad (11.1)$$

h : هو معامل تجريبي ويسمى معامل إنتقال الحرارة بالحمل (convective heat transfer coefficient).

وحدته هي $W/m^2.K$ أو $W/m^2.c$.

T_s : درجة حرارة السطح المدروس.

T_{gaz} : درجة حرارة الغاز بجوار السطح.

وينقسم هذا النوع الى الحمل الحراري القسري والطبيعي .

من أشهر الأمثلة على الإنتقال الحراري بالحمل القسري هو مجفف الشعر الذي يتم من خلاله نفخ الهواء المحيط بواسطة مروحة من خلال مقاوم التسخين الكهربائي [16].

1.3.IV. الحمل الحراري الطبيعي

وهو ما يحدث دون تدخل الإنسان مثل حمل الهواء الحرارة من مكان حار إلى مكان بارد بسبب فرق الكثافة لأن الغازات الساخنة تقل كثافتها وبالتالي ترتفع إلى الأعلى ويحل محلها الغازات الباردة .

حيث تنشأ ظاهرة الحمل الحراري الطبيعي (الحمل الحراري الحر) من اختلاف الكثافة داخل مائع التي ترتبط بتغيرات في درجة حرارته، لذلك فإن إعداد لحركة السائل لا يرتبط بسبب خارجي ولكن بتوزيع درجة الحرارة في السائل نفسه. فالمعادلات الأساسية التي تحكم ظاهرة الحمل الحراري الطبيعي متطابقة مع تلك التي تحكم في الحمل الحراري القسري (القوي).

يأتي الاختلاف الكبير من حقيقة أنه في الحمل الحراري الطبيعي تقترن الظواهر الهيدروديناميكية والحرارية بالكثافة المتغيرة. لا يمكن دراستها بشكل منفصل كما هو الحال في الحمل الحراري القسري مما يجعل المشكلة أكثر تعقيدا بشكل عام [16].

IV.3.2. الحمل الحراري القسري

في الحمل الحراري القسري تتحرك دقائق المائع الناقل للحرارة حركة قسرية كأن تحركها تيارات قسرية تولدها أجهزة صناعية تعمل على إيجاد فرق في الضغط بين منطقتين في المائع. تعمل حركة المائع القسرية على نقل الحرارة أينما ذهبت كما في النوع الأول، ولكن بطبيعة قسرية. مثل: مروحة التبريد داخل الحاسوب التي تحرك الهواء الساخن إلى خارجه ليحل محله هواء بارد [17].

IV.3.3. الظروف المتحكممة في سريان السوائل والغازات

يعتمد سريان السوائل والغازات على عدد من العوامل والظروف نذكر منها :

1. سرعة سريان السائل أو الغاز على سطح التبادل الحراري.
2. نوع السريان على الاسطح.
3. كثافة السريان أو الغاز.
4. لزوجة السائل أو الغاز.
5. حرارته النوعية.
6. درجة حرارة سطح التبادل الحراري.
7. طول السطح أو قطره في حالة الأسطح [18].

IV.3.4. سريان السوائل والغازات على الأسطح

سواء كان سريان السوائل أو الغازات سريان حرا أو جبريا (قسريا) فنجد إما أن يسير في خطوط متوازية أو إنسيابية أو في مرحلة انتقالية كخليط من الخطوط المتوازية والمضطربة أو يسير في حالة دوامية مضطربة كما تؤثر طريقة سريان السوائل أو الغازات على قيمة معامل إنتقال الحرارة بالحمل h .

وتتحدد طريقة سريان السائل أو الغاز بمعرفة قيمة رقم رينولدز إذا كانت قيمته 2100

كان سريان السائل أو الغاز من النوع الانسيابي المتوازي وإذا زادت عن 4000 دل ذلك

على أن السريان من النوع الدوامي المضطرب نكتب الآن المعادلة الخاصة برقم رينولدز [18]:

$$R_e = \frac{\rho v D}{\mu} \quad (12.1)$$

v : سرعة سريان السائل أو الغاز.

ρ : كثافة السائل أو الغاز.

D : الطول المميز لسطح السريان.

μ : لزوجة السائل أو الغاز.

ومن الناحية العملية لا يحدث انتقال للحرارة من نوع واحد فقط بل دائما نجد على الأقل اشتراك نوعين في نقل الحرارة وتسمى العملية بانتقال الحرارة المختلط ويتوقف معدل انتقال الحرارة خلال جسم على عدة عوامل منها [14]:

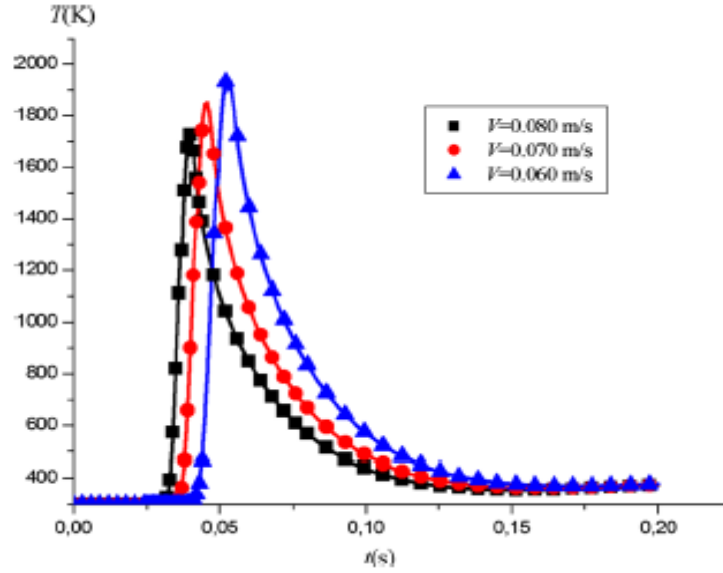
1. الفرق بين درجتي الحرارة أسطح الجسم.
2. مساحة سطح التبادل الحراري العمودي على اتجاه انتقال الحرارة.
3. مقدرة الجسم على نقل الحرارة (مدى مقاومة الجسم لانتقال الحرارة) وعموما يعبر عنه بمعامل انتقال الحرارة .

5.3.IV. تأثير الغازات بجوار الأسطح أثناء عملية التلحيم

تحدث عملية التلحيم عادة في الهواء إلا أن درجة الحرارة تكون متغيرة خلال مدة التلحيم وفي هذه الحالة يكون سريان الهواء أو الغاز حرا. وقد نحتاج إلى عمليات تلحيم في ظروف لغازات مختلفة كغازات الحماية في سريان حر أو جبري. تبين العديد من الدراسات تأثير هذه الغازات على عملية التلحيم [19] [20] [21].

إن عمليات التلحيم الحديثة بالليزر مثلا تتطلب تشخيص الوسط الغازي من خلال معرفة درجات الحرارة وكثافات مختلف العناصر (جزيئات، أيونات، إلكترونات) بجوار السطح. وربما دراسة تصادم وتفاعل الجسيمات مع السطح تكون مفيدة في فهم الظواهر الفيزيائية.

يمثل الشكل (2.1) مثلا لتغير درجة حرارة سطح عند التلحيم بالليزر لصفحة معدنية $p=2500w$ من طاقة الليزر وسرعات اللحام مختلفة عند النقطة $(x=0mm, y=3.0mm)$ لوحظ أن اتجاه مماثل لتطور درجة الحرارة لسرعات اللحام المختلفة وتم زيادة درجة الحرارة عن طريق تقليل سرعة اللحام يمكن ملاحظة أنه بالنسبة لسرعة اللحام تكون أقل من 0.06 متر/ثانية يمكن أن تصل درجة الحرارة الى نقطة الإنصهار [22].



الشكل (2.1): تغير درجة حرارة سطح عند التلحيم بالليزر لصفحة معدنية [22].

V. بعض التعريفات المهمة في الفيزياء الإحصائية

1.V. توزيع ماكسويل - بولتزمان للسرعات

هو توزيع احتمالي يستخدم في العديد من التطبيقات في الفيزياء والكيمياء وفي الديناميكا الإحصائية، حيث تعتمد درجة حرارة نظام فيزيائي بشكل كبير على حركية الجسيمات داخل هذا الأخير، وتتميز هذه الجسيمات بسرعات مختلفة يحكمها قانون ماكسويل - بولتزمان لتوزيع السرعات ويمكن إعطائه بالقانون الآتي [23]:

$$p(v)dv = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_c}{k_B T}\right) dv \quad (13.1)$$

هذا ويمكن كتابة هذه المعادلة على ثلاث محاور بإسقاطها على النحو التالي :

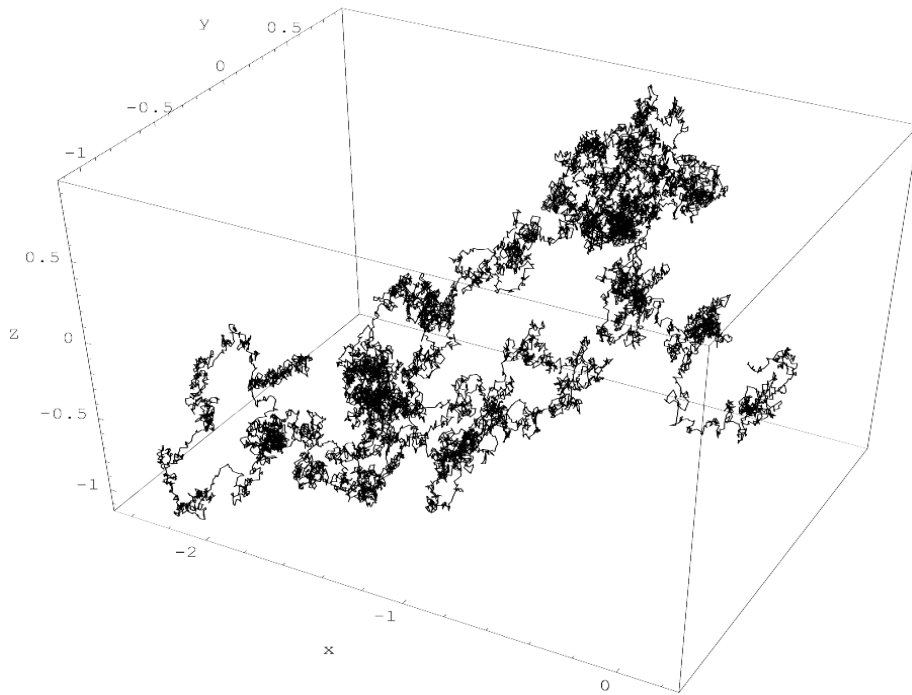
$$f(v_x) = 4\pi v_x^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{-mv_x^2}{2k_B T}\right) \quad (14.1)$$

$$f(v_y) = 4\pi v_y^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{-mv_y^2}{2k_B T}\right) \quad (15.1)$$

$$f(v_z) = 4\pi v_z^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{-mv_z^2}{2k_B T}\right) \quad (16.1)$$

2.7. التوزيع العشوائي

في هذه الفقرة نعرف التوزيع العشوائي على أنه توزيع إحصائي مستمر تتعرض فيه جميع القيم في فاصل زمني معين لإحتمال مختلف للتواجد الجسيمات في ذلك الحجم أو المجموعة المواضيع [24]. ويمكن تمثيل الحركة العشوائية بالحركة البراونية. وهذه الأخيرة حركة عشوائية لجسيمات الموائع (الغازات والسوائل) نتيجة تصادمها المستمر مع ذرات وجزيئات أخرى. أخذت الحركة البراونية اسمها من عالم النبات الاسكتلندي روبرت براون الذي لاحظ حبوب اللقاح تتحرك عشوائيا في الماء ووصف الإقتراح في عام 1827 [25]. وفي الصورة التالية نوضح الحركة البراونية في ثلاث أبعاد:



الشكل (3.1): نموذج للحركة البراونية في خلية محاكاة بطريقة مونت كارلو [26].

من ضمن الحالات الخاصة التوزيع المنتظم والتوزيع العادي. نعرف التوزيع المنتظم (distribution uniforme) على أنه توزيع إحصائي مستمر تعرض فيه جميع القيم في فاصل زمني معين نفس الإحتمال لتواجد الجسيم في ذلك الحجم أو مجموعة من المواضيع. يمكن استخدام هذا الأخير عند نمذجة تراكيز الغاز في نموذج محاكاة أو المدة بين الأحداث عند التقاطع وكذلك وضع النقاط باستخدام أداة نقاط عشوائية [24]. أما التوزيع العادي (distribution normale) فيمثل حالة من التوزيع الغاوسي للعينات. توزيع مركبات السرعة عند التوازن الحراري التام مثالا لهذا التوزيع. كلا التوزيعين يمثلان بصورة أو بأخرى توزيعا عشوائيا ويعطينا الحركة البراونية.

VI. طرق المحاكاة العددية:

نحن نقوم بإجراء محاكاة على الحاسب بهدف فهم خصائص مكونات الجسيمات بالتعبير عن تركيبها والتفاعلات الميكروسكوبية بينها أو الجسيمية وهي حالتنا هذه. هذه المحاكاة تكمل التجارب التقليدية وتعطينا المقدرة على تعلم شيء جديد لا يمكن إيجاده بالطرق الأخرى. وهناك طريقتان رئيسيتان للمحاكاة هما: طريقة حتمية وهي طريقة الديناميكا الجزيئية وطريقة احتمالية (مبنية على العشوائية) وهي طريقة مونتي كارلو. وسنتناول هاتين الطريقتين بالشرح.-

1.VI. طريقة الديناميكا الجزيئية

الديناميكا الجزيئية عبارة عن شكل من أشكال محاكاة الحاسوب حيث يسمح للذرات والجزيئات بالتفاعل لفترة زمنية في ظل قوانين الفيزياء ويتم تتبع التطور مع الزمن لمجموعة من الذرات المتفاعلة ومن ثم تكامل معادلات الحركة، وتبنى طريقة محاكاة الديناميكا الجزيئية على حل القانون الثاني لنيوتن (معادلة الحركة).

$$f_i = m_i a_i$$

f_i : القوة المؤثرة على الجسيم i بسبب تفاعله مع الذرات حيث m_i كتلته a_i تسارعه [2].

2. VI. طريقة مونتي كارلو

تم تطوير طريقة مونتي كارلو من قبل Von Neuman Ulam Metropolis في نهاية الحرب العالمية الثانية .

طريقة مونتي كارلو هي طريقة لحل المشاكل المختلفة في الرياضيات الحسابية عن طريق بناء عملية عشوائية لكل مشكلة تكون لها متغيرات تساوي الكميات المطلوبة في المشكلة . ويتم تحديد المجاهيل تقريبا عن طريق عمل ملاحظات على العملية العشوائية وحساب الخصائص الإحصائية والتي تتساوى تقريبا مع المتغيرات المطلوبة. هذا ويتم معالجة مشاكل الفيزياء الإحصائية بهذه الطريقة على ثلاثة مراحل وهي كالتالي [3]:

1. التعريف بالظاهرة الفيزيائية المدروسة .

2. التعريف بالنموذج الرياضي .

3. إعداد النموذج الرياضي:

• إعداد النموذج من أجل حالة بسيطة وهذا بغرض التحقق من صحة

هذا الأخير (تصادم مرن بين جسيمات وسطح) .

• تعميم النموذج من أجل حالات معقدة (تصادم غير مرن بين

جسيمات والسطح).

يمكن العودة لبعض المراجع المتعلقة بدراسة تفاعلات لغازات باستعمال طريقة مونتي

كارلو [5] [27] [28].

3.VI. مميزات تقنية المحاكاة مونتّي كارلو

الميزة الرئيسية لهذه الطريقة هي تغطية مقياس الوقت وحجم أكبر من الأساليب الكمية و طريقة الديناميك الجزيئي في غضون زمن قصير في الحساب أي أنها أسرع من طريقة الديناميك الجزيئي .

تعكس تقنية مونتّي كارلو التطور المنضب والدقيق للنظام المدروس بشرط أن تتم المحاكاة بشكل دقيق ومحكم بإمكاننا مقارنة النتيجة النهائية مباشرة بالتجارب الواقعية وأحيانا لا يمكن تمييزها لشدة دقتها [29].

4.VI. مبدأ نموذج محاكاة مونتّي كارلو:

يأخذ المبدأ العام لنماذج المحاكاة مونتّي كارلو (MC) الخطوات التالية [3].

(أ) اختيار خلية محاكاة ذات الشكل المناسب للظواهر المدروسة يرتبط حجمها بمقياس طول المميز للقوى وإمكانات التفاعل للظاهرة المدروسة قد تحتوي هذه الأخيرة على جزيئات و جسيمات من غاز أو بلازما أو

(ب) إختيار التكوين الأولي الذي يلبي بعض الخصائص الفيزيائية والدينامكية الحرارية الطاقة الكلية أو الداخلية للنظام هي E_i .

(ج) الإزاحة العشوائية المتناهية الصغر للجسيم وحساب الطاقة الداخلية الجديدة للنظام E_p , ترتبط هذه الإزاحة بالكميات الفيزيائية الوقت ومقياس الطول , حيث يميل النظام الفيزيائي إلى تقليل الطاقة الداخلية للنظام مع بعض التغيرات نفرض

$$E = E_f - E_i \quad (17.1)$$

(خ) إذا كانت $\Delta E < 0$ يتم الإحتفاظ بالتكوين الجديد ويمكن الحصول على المتوسطات المختلفة .

(د) إذا كانت $\Delta E > 0$ لا يتم إحتفاظ بالتكوين ويتم إختيار رقم عشوائي بحيث يكون $0 < \varepsilon < 1$ ويمكن قراءة المتوسطات المختلفة بإحتمال يساوي:

$$P_r = \exp\left(\frac{-\Delta E}{k_B T}\right) \quad (18.1)$$

(ذ) إذا كانت $\varepsilon < P_r$ نقبل هذه الخطوة وعلى أي حال نرجع للخطوة ج من أجل إختيار إزاحة جديدة متناهية الصغر (تكوين جديد) لاحظ أنه إذا تم رفض مثل هذه الخطوة التجريبية فسيتم حساب الإزاحة القديمة مرة أخرى في المتوسط مع إحتمال P_r [3].

ومن بين أعمال أعضاء المخبر التي تم فيها حساب التوزيعات بإستخدام طريقة مونتّي كارلو في المحاكاة هو عمل كل من:

- الطالبة ف.ساكري في مذكرة ماستر [30] والتي قامت بحساب توزيع سرعات أيونات بإستخدام محاكاة مونتّي كارلو عند التصادم مع الهدف في تقنية الرش المهبطي في نظام

- كهربائي مستمر حيث قامت بتحديد توزيع سرعات أيونات غاز ارغون المستخدمة لتوضع طبقات بطريقة الرش المهبطي بمصدر جهد مستمر (DC).
- الطالبة ر.قادري في مذكرة ماستر [31] والتي قامت بنفس عمل زميلتها ف.ساكري وإنما بإستخدام طريقة الديناميك الجزيئي اي قامت بحساب توزيعات سرعات الأيونات بإستخدام محاكات الديناميك الجزيئي عند التصادم مع هدف والذي كان الارغون في كلا العملين في تقنية الرش المهبطي في نظام كهربائي مستمر .
 - عمل الأستاذة أ. بابا حني في رسالة دكتوراه [5] حيث قامت بمحاكاة عددية بطريقة مونتي كارلو لتوضع الطبقات الرقيقة بإستخدام التوضع البخاري الكيميائي CVD.
 - عمل الأستاذ إ. شيحي [7] حيث حسب دوال التوزيع الحقل الكهربائي الموضعي ومشتقاته داخل البلازما باستخدام أيضا المحاكاة العددية مونتي كارلو وكان تطبيقه على طيف الهليوم.

الفصل الثاني

المحاكاة العددية بطريقة

مونتي كارلو

الفصل الثاني : المحاكاة العددية بطريقة مونت كارلو

I. مقدمة

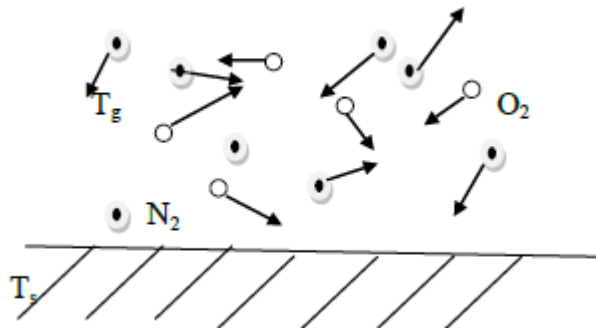
المحاكاة عبارة عن جسر بين التجارب والنظريات. فالمحاكاة تمدنا بمعلومات على المستوى الميكروسكوبي؛ وهذا يساعد على فهم الخصائص الميكروسكوبية. كما أنها تسمح من خلال التجارب الرياضية بأشياء يستحيل تنفيذها واقعيًا؛ إذ أن نتائجها تزيد من فهمنا للظاهرة بحيث يمكن تحقيقها.

سنقوم في هذا الفصل بإجراء المحاكاة العددية بطريقة مونت كارلو لدراسة التصادمات بين غاز (O_2 N_2) و سطح المرتبطة بعملية التلحيم. تم إختيار هذه الجسيمات تحديداً لأن عملية التلحيم قد تتم في الهواء وبتأكيد تلك هي عناصر الهواء. الهدف هو حساب نسب التصادمات والقيم المتوسطة وتوزيع السرعات للجسيمات بعد تصادم مرن مع السطح المدروس.

II. الظاهرة الفيزيائية

في هذا الفصل سوف نحكي ظاهرة تصادم جسيمات غاز مع سطح (الغاز المدروس في هذه الحالة هو N_2 ؛ أو O_2 باعتبار عملية التلحيم تتم في الهواء). المقادير المهمة أثناء هذا العمل هو متوسط المسار الحر وسرعة الجسيمات وتردد التصادمات. لم نأخذ في دراستنا هذه تأثير طول دوباي لضعف تأثير الحقل الكهربائي في دراستنا هذه.

وبغرض تحقيق هذا الهدف فيجب أن نتعرف على الظروف وبعض الثوابت المادية لخلية التصادم هاته ووصف هذه الظاهرة فيزيائياً. لتكن T_g درجة حرارة الغاز و لتكن T_s درجة حرارة السطح وليكن P الضغط الجوي للغاز بجوار السطح. اكتفت دراستنا هذه على التصادمات المرنة حيث لم نعطي أهمية لدرجة حرارة السطح.



الشكل (1. II): مخطط موضح للظاهرة الفيزيائية.

III. النموذج الرياضي

بالنسبة للنمذجة الرياضية نقترح شكلا من أشكال التوزيع المعروف في الفيزياء: وهو توزيع ماكسويل بولتزمان للسرعات وقمنا باقتراح توزيع غاوسي لمتوسط المسار الحر. تكون العبارات على التوالي كالتالي:

$$\bullet f(v_x) = 4\pi v_x^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{mv_x^2}{2kT}\right) \quad (1.11)$$

$$\bullet f(v_y) = 4\pi v_y^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{mv_y^2}{2kT}\right) \quad (2.11)$$

$$\bullet f(v_z) = 4\pi v_z^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{mv_z^2}{2kT}\right) \quad (3.11)$$

$$\bullet f(\lambda) = \exp\left(-\frac{(\lambda-\lambda_0)^2}{2\lambda_0^2}\right) \quad (4.11)$$

$$\lambda_0 = \frac{1}{n_g \delta} \text{ متوسط المسار الحر.}$$

وقمنا بتنظيمهم بطريقة الشبه المنحرف وذلك بجعل تكامل كل من هذه الدوال مساوي للواحد. سبب قيامنا بتنظيم الدوال هو أنها دوال معروفة بنظاميتها في فيزياء الإحصاء والفيزياء الكمية:

$$\bullet \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} f(x) dx = 1 \quad (5.11)$$

وتعتبر هذه المقادير مقادير فيزيائية تستخدم من أجل اختيار القيم العشوائية أو للمقارنة مع نتائج الدراسة.

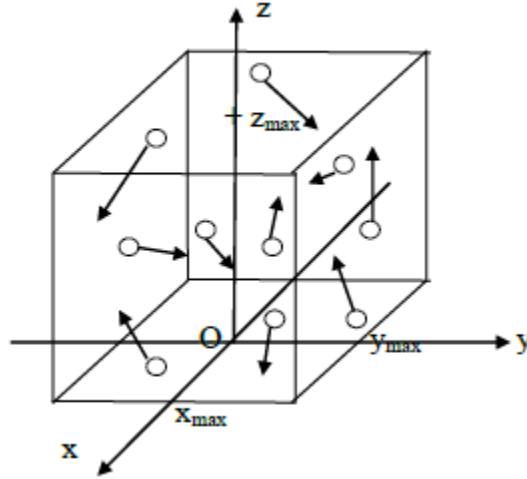
IV. النموذج العددي

IV. 1. خلية المحاكاة المقترحة للدراسة

وهي عبارة عن مكعب متوازي الوجوه تنقسم خلية المحاكاة لدراستنا هذه إلى ثلاث تقسيمات حيث:

- **المنطقة الأولى:** الجسم الإبتدائي المدروس ذو السرعة والموضع ومتوسط المسار الحر العشوائيين يتصادم مع السطح ثم ينعكس انعكاس كلي متجها إلى الحجم.
- **المنطقة الثانية:** الحجم أين يلتقي هذا الأخير مع جسم آخر في الحجم ويتصادم معه.
- **المنطقة الثالثة:** وهي حالة خارج الخلية (خارج الحجم).

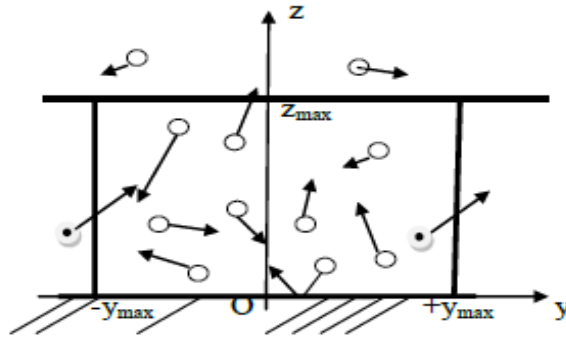
وتتكون من جزيئات الأكسجين أو النيتروجين (الآزوت)؛ وهذا يعود الى أن عملية التلحيم قد تتم في الهواء (تركيبية الهواء: 80% نيتروجين، 20% أكسجين). لم ينصب إهتمامنا على الإلكترون في هذه الدراسة. تتكون خلية المحاكاة من سطح ذو درجة حرارة $T_s=650K$ ومجموعة كبيرة من الجسيمات غاز ذو درجة حرارة $T_g=600K$. يمثل الشكل II.2. رسم لخلية المحاكاة المقترحة للدراسة.



الشكل (2.11): رسم لخلية المحاكاة المقترحة للدراسة.

IV. 2. شروط الحدية الدورية

لتقليل تأثير السطح يتم فرض شروط حدودية دورية، أي بشكل ثابت يتم إعادة إنتاج خلية محاكاة في جميع أنحاء الفضاء لتشكيل شبكة لانهائية. يمكننا إنتاج خلية محاكاة في جميع أنحاء الفضاء لتشكيل شبكة لانهائية؛ يمكننا محاكاة خصائص النظام الذي يحتوي على عدد لا متناهي من الجسيمات، التي نتبعها والموجوده في الخلية المركزية بحيث إذا عبر الجسم الحائط بسرعة معينة وطاقة وكمية الحركة معينة، فإن صورته تعود بنفس هذه الخصائص بالجدار المقابل.



الشكل (3.11): رسم توضيحي للشروط الحدية الدورية.

IV. 3. خطوات برنامج دراسة التصادم (غاز - سطح) باستعمال لغة الفورترن 77

في هذه المذكرة تم انجاز برنامج بلغة الفورترن (77)؛ لمحاكاة تصادم جسيمات غاز مع سطح. وهذه الدراسة تهدف إلى بناء نموذج يدرس أو يحسب السرعات وتوزيعاتها قبل وبعد التصادم؛ ومعدل التصادم مع السطح في الخلية (الحجم) وخارجها ومقادير اخرى. الخطوات الموضحة لدراسة البرنامج كالاتي:

أولاً : إختيار الموضع العشوائي

إختيار موضع عشوائي ابتدائي للجسيم الذي يخضع لتوزيع منتظم في الأبعاد الثلاث؛ حيث أنه من أجل برمجة الموضع العشوائي لدينا :

$$rpc(3) \text{ للأبعاد الثلاث } x \text{ و } y \text{ و } z.$$

ثانياً: إختيار السرعة العشوائية للجسيم الأول

لدينا من أجل كل جسيمة السرعة الأولية تكون عشوائية بتوزيع 'عادي' أو غاوسي لكل مركبة ويمكن الحصول عليها باستخدام مولد الأعداد العشوائية ran (عدد عشوائي بين 0 و 1) [3].

للحصول على رقم عشوائي حقيقي X_i ينتمي الى مجال $[a ; b]$ وفقا لقانون توزيع غير منتظم $f(x)$ نستخدم تقنية الرسم البياني. ليكن N_m عدد التقسيمات من أجل شبكة منتظمة. نعرف:

$$\Delta x = \frac{b-a}{N_m} \quad (6.11)$$

$$f_i = f(x_i)$$

من أجل :

$$i = 0 \dots m$$

و

$$x_i = a + i\Delta x$$

نحدد التسلسل او المساحة العنصرية المختارة عشوائيا :

$$s_0 = 0$$

و

$$s_{i+1} = s_i + \Delta x (f(x_i) + f(x_{i-1})) / 2 \quad (7.11)$$

والتسلسل:

$$rx_0 = 0 \text{ و } rx_i = \frac{s_i}{s_m} \quad (8.11)$$

حيث الرمز x في البرنامج يأخذ رمز السرعة v وكذلك هو الأمر بالنسبة للدالة f حيث تمثل دالة السرعات $f(v)$.

ومن ثم فإن كل رقم عشوائي حقيقي r_i ينتمي للمجال 0 و 1 وفقا لقانون منتظم هذا الرقم ينتمي للمجال

$$[ranv_j, ranv_{j-1}]$$

هذا الرقم يتوافق مع صيغة أو قانون التوزيع الغير المنتظم.

ومن أجل البرمجة والمطابقة مع البرنامج والتوضيح أكثر لدينا:

• السرعة العشوائية $vpc(3)$ للأبعاد الثلاث vx و vy و vz .

ثالثا : إختيار المسار الحر للجسيم الأول

نعطي للجسيمات بعد السرعة العشوائية مسار حر مختار عشوائيا بنفس الطريقة السابقة ومن أجل المطابقة مع البرنامج العددي المنجز لدينا:

• مسار حر عشوائي $alpc$.

رابعا: حساب الموضع النهائي

يحسب البرنامج الموضع النهائي الجديد عن طريق فرض زمن التصادم والذي يساوي نسبة بين المسار الحر المختار عشوائيا (والمذكور سابقا) وطويلة السرعة:

$$tcol = \frac{alpc}{vitesse} \quad (9.11)$$

حيث أن طويلة السرعة هي مجموع مربع كل مركباتها في ابعاد الثلاث تحت الجذر, كما هو في التالي:

$$vitesse = \sqrt{(vpc(x))^2 + (vpc(y))^2 + (vpc(z))^2} \quad (10.11)$$

هذا الموضع الجديد هو الناتج عن تصادم جسيمين من الغاز ثم النتيجة تتوقف على إرتفاع الخلية Z_{final} فإن يمكننا قول يمكن المناقشة حسب قيم Z_{final} ونميز ثلاث حالات:

- $Z_{max} > Z_{final} > 0$: فإن الجسيم المدروس يقع داخل خلية المحاكاة؛ ويتصادم مع جسيم آخر تصادم مرن ومن ثم يحسب البرنامج سرعة الجسيمات بعد التصادم؛ عن طريق استخدام خوارزمية غوص- صايدل التكرارية بحل بعض المعادلات، سنذكرها في الخطوات لاحقا بعد هذا يمكننا دراسة التصادم.

- $Z_{final} < 0$: فإن الجسيم مدروس يتصادم مع السطح؛ وبالتالي هنا يوجد احتمالين للتصادم تصادم مرن مع السطح أو تصادم غير مرن مع السطح. في هذه المرحلة يمكن دراسة تبادل الحرارة جسيم سطح و حساب توزيع السرعات الجديد. في دراستنا هذه اكتفينا بدراسة التصادمات المرنة.

- $Z_{final} > Z_{max}$: الجسيم المدروس يقع خارج خلية المحاكاة المقترحة. باستخدام ما يعرف بالشروط الحدية الدورية نعيد الجسيمة لأبعاد الخلية.

خامسا: دراسة التصادم مع السطح أو داخل الخلية أو خارج الخلية

1) دراسة التصادم مع السطح، حيث بحسب النموذج المقترح نفترض أن الجسيم الذي سيصطدم مع السطح بعد تصادمه ينعكس إنعكاسا كليا.

المركبتين x و y تظلان على حالهما أما المركبة z فتنعكس اشارتها، هذا النموذج طبعا أثناء انحرافها بشكل انعكاس كلي؛ فيصبح لدينا:

$$\mathbf{v}_{ap1}(x) = \mathbf{v}_{av1}(x) \quad (11.11)$$

$$\mathbf{v}_{ap1}(y) = \mathbf{v}_{av1}(y) \quad (12.11)$$

$$\mathbf{v}_{ap1}(z) = -\mathbf{v}_{av1}(z) \quad (13.11)$$

(2) دراسة التصادم في الحجم وخارج الحجم، نقوم بحساب السرعات بعد تصادم الجسيمات مع بعضها تصادم مرن. قبل التصادم: السرعة \mathbf{v}_{av2} و السرعة \mathbf{v}_{av1} للجسيمات نفترضها معلومة، فهي السرعات العشوائية المختارة. بعد التصادم: السرعة \mathbf{v}_{ap1} و السرعة \mathbf{v}_{ap2} هي سرعات الجسيمات المطلوب حسابها. في البداية العمل قمنا باستعمال طريقة أولى مباشرة لحل المسألة إلا أن الطريقة لم تمكننا من إيجاد حل التقارب بدلالة طريقة غوص-صايدل التكرارية. قمنا باقتراح طريقة ثانية بمحاولة إيجاد الحل في معلم مرتبط بمستوى الجسمين المتصادمين.

الطريقة الأولى: حساب السرعات بعد التصادم في المعلم الثابت.

لدينا معادلة إنحفاظ كمية الحركة:

$$m_1 \vec{v}_{av1} + m_2 \vec{v}_{av2} = m_1 \vec{v}_{ap1} + m_2 \vec{v}_{ap2} \quad (14.11)$$

حيث أن المعادلة شعاعيه إذن نقوم بإسقاط على المحاور الثلاث ونتحصل على ثلاث معادلات.

$$\begin{aligned} \vec{v}_{av1}: & \text{شعاع سرعة الجسيم الأول قبل التصادم في الحجم أو خارجه.} \\ \vec{v}_{av2}: & \text{شعاع سرعة الجسيم الثاني قبل التصادم في الحجم أو خارجه.} \\ \vec{v}_{ap1}: & \text{شعاع سرعة الجسيم الأول بعد التصادم في الحجم أو خارجه.} \\ \vec{v}_{ap2}: & \text{شعاع سرعة الجسيم الثاني بعد التصادم في الحجم أو خارجه.} \end{aligned}$$

وبهذا يكون لدينا ثلاث معادلات مبدئياً وأيضاً معادلة إنحفاظ الطاقة الحركية الكلية:

$$\frac{1}{2} m_1 v_{av1}^2 + \frac{1}{2} m_2 v_{av2}^2 = \frac{1}{2} m_1 v_{ap1}^2 + \frac{1}{2} m_2 v_{ap2}^2 \quad (15.11)$$

لإيجاد لمعادلتين إضافيتين نقوم بفرض أن الحركة بعد التصادم تتم في نفس المستوى الابتدائي.

وبالتالي يمكن تعريف شعاع الجداء الشعاعي العمودي على كل من السرعتين بعد

التصادم، إذن:

$$\vec{w} = \vec{v}_{av1} \otimes \vec{v}_{av2} \quad (16.11)$$

إذا كانت الحركة تتم في نفس المستوى فإن كل من \mathbf{v}_{av1} و \mathbf{v}_{av2} و \mathbf{v}_{ap1} و \mathbf{v}_{ap2} كلها في

نفس المستوي إذن \mathbf{v}_{ap1} و \mathbf{v}_{ap2} عموديان على شعاع الجداء الشعاعي \mathbf{w} . أي الجداءين السلميين

للسرعتين بعد التصادم والشعاع \mathbf{w} معدومين. ونتحصل على معادلة خامسة وسادسة.

$$\vec{w} \cdot \vec{v}_{ap1} = 0$$

$$\vec{w} \cdot \vec{v}_{ap2} = 0 \quad (17.11)$$

المعادلتين شعاعيتين نقوم بإسقاطهما على المحاور الثلاث .

تحصلنا على نظام لستة معادلات مرتبطة على شكل مصفوفي . قمنا بإقتراح حلها بإستعمال

خوارزمية غوص - صايدال التكرارية.

الطريقة الثانية: حساب السرعات بعد التصادم في معلم مستوى لمستوى التصادم

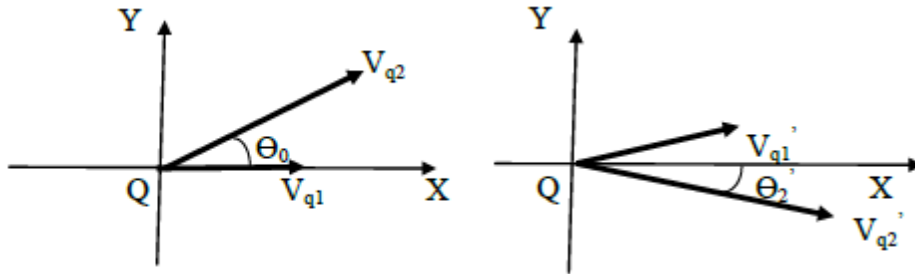
لمعالجة الإشكال المتعلق بتقارب النتائج للطريقة الاولى إقترحنا طريقة ثانية. يمكن إنجاز

هذا الحساب في ثلاث مراحل.

المرحلة الأولى: التحويل من المعلم ثلاثي الأبعاد الى المعلم المستوى.

ليكن معلم ثنائي الأبعاد مرتبط بمستوى تصادم الجسمين. يمثل الشكل (4.11) تمثيل

السرعات ومركباتها قبل وبعد التصادم.



(ب) قبل التصادم

(ا) قبل التصادم

الشكل (4.11): سرعة الجسميات في مستوى التصادم.

ثم نحدد الزاوية θ_0 من الجداء السلمي للمتجهين V_{q1} و V_{q2} قبل التصادم.

المرحلة الثانية: حساب مركبات الشعاعين V_{q1} و V_{q2} بعد التصادم في نظام الإحداثيات الثنائي

الجديد لمستوى الشعاعيين.

لدينا ثلاث معادلات إنحفاظ (كمية الحركة على المحور X وكمية الحركة على المحور Y

الطاقة الحركية الكلية).

• نقتراح ثلاث مقادير مجهولة $X_1=V_{q1X}'$, $X_2=V_{q1Y}'$, $X_3=V_{q2}'$ (مركبتان من V_{q1}'

و معامل من V_{q2}')

• نختار زاوية إنتشار عشوائية θ_2 للجسيم 2.

نتحصل على نظام لثلاث معادلات مرتبطة على شكل مصفوفي. قمنا بإقتراح حلها

بإستعمال خوارزمية غوص - صايدال التكرارية.

المرحلة الثالثة: تحويل مركبات السرعات ثنائية الأبعاد إلى ثلاثة الأبعاد.

لتكن الثلاثية $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ أشعة الوحدة للمعلم المستوي للشعاعين. ليكن الشعاع \vec{w}

شعاع الجداء الشعاعي للشعاعين V_{q1} و V_{q2} حيث

$$\vec{w} = \vec{V}_{q1} \otimes \vec{V}_{q1} \quad (18.11)$$

$$\vec{e}_X = \frac{\vec{V}_{q1}}{\|\vec{V}_{q1}\|} \quad (19.11)$$

$$\vec{e}_Z = \frac{\vec{w}}{\|\vec{w}\|} \quad (20.11)$$

$$\vec{e}_y = \vec{e}_Z \otimes \vec{e}_X \quad (21.11)$$

حيث السرعة بعد التصادم تكون في المعلم المستوى مركباتها كالاتي:

$$\vec{V}_{q1} = X_1 \vec{e}_X + X_2 \vec{e}_Y \quad (22.11)$$

$$\vec{V}_{q2} = X_3 \cos(\theta_2') \vec{e}_X + X_3 \sin(\theta_2') \vec{e}_Y \quad (23.11)$$

نستطيع كتابة المركبات في المعلم الثابت $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ كالتالي :

$$\vec{e}_X(e_{X1}, e_{X2}, e_{X3}) \quad (24.11)$$

$$\vec{e}_Y(e_{Y1}, e_{Y2}, e_{Y3}) \quad (25.11)$$

$$\vec{e}_Z(e_{Z1}, e_{Z2}, e_{Z3}) \quad (26.11)$$

أو على الشكل :

$$\vec{e}_\alpha(e_{\alpha1}, e_{\alpha2}, e_{\alpha3}) = e_{\alpha1} \vec{i} + e_{\alpha2} \vec{j} + e_{\alpha3} \vec{k} \quad (27.11)$$

وبهذا يمكننا حساب مكونات السرعة المطلوبة.

سادسا: الحساب التكراري لعينات الحساب

للقيام بالحساب العددي قمنا بإقتراحين إثنين:

في الإقتراح الأول: نعود إلى الخطوة الأولى بإعادة اختيار جسيم أول. بهذا الشكل نقوم

بدراسة تصادم أول وحيد لكل جسيم.

في الإقتراح الثاني: نقوم بتصادمات متتالية لنفس الجسيم الأول باختيار جسيم ثان. ثم نعود

إلى الخطوة الأولى بإعادة اختيار جسيم أول. بهذا الشكل نقوم بدراسة تصادمات متتالية ومتكررة

لنفس الجسيم ثم نعيد الكرة من أجل جسيم آخر.

سابعا: الحساب الاحصائي

يحسب البرنامج في كل مرحلة من مراحل دراسة التصادم، سواء كانت في السطح أو في

الحجم أو خارج الحجم:

- نسبة التصادمات؛

- القيم المتوسطة للسرعات قبل وبعد التصادم والتي تمثل مجموع السرعات في هذه

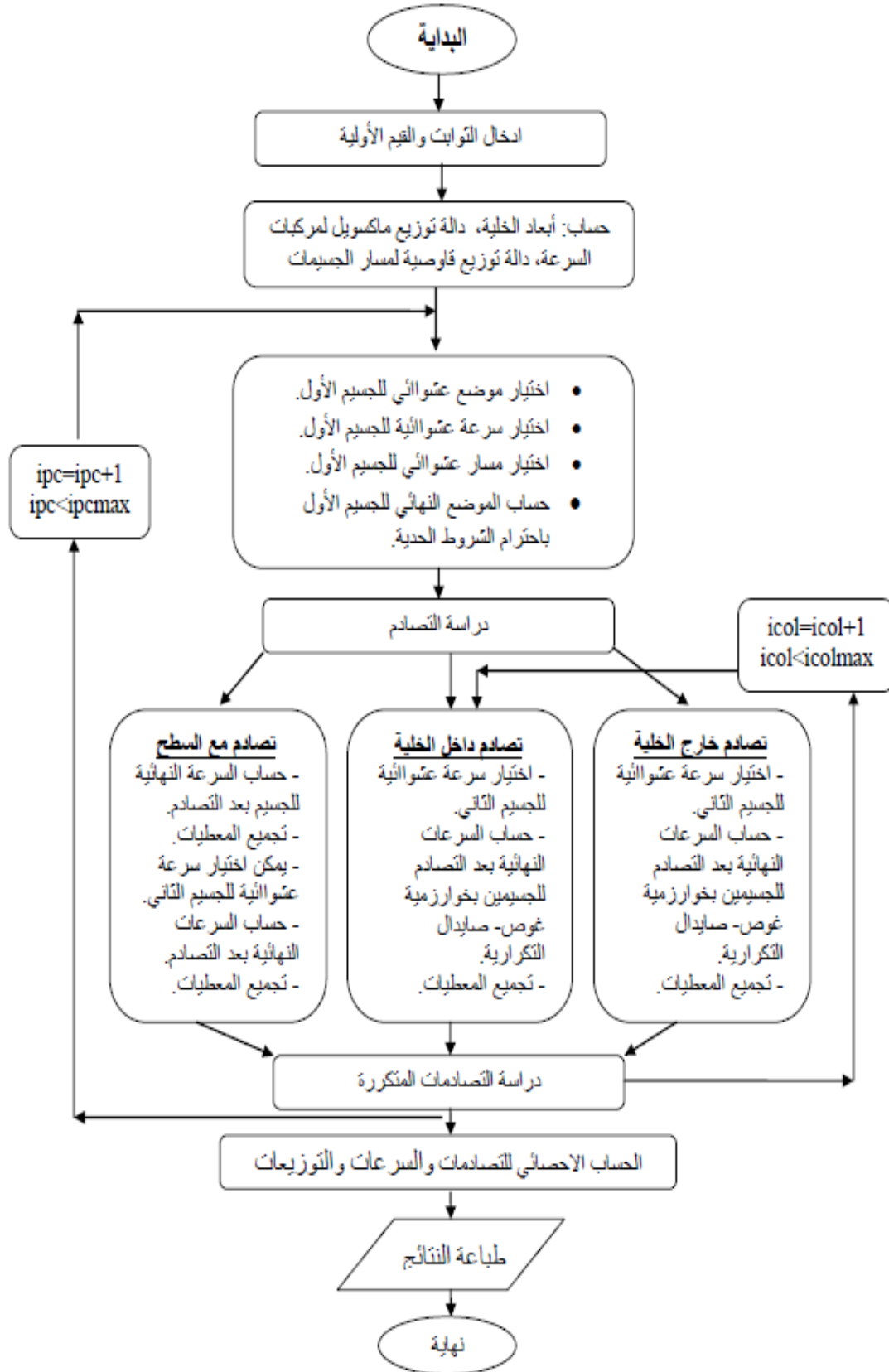
المناطق الثلاث على عدد التصادمات في هذه المناطق الثلاث على الترتيب؛

- دوال توزيع للسرعات.

يحسب البرنامج القيم المتوسطة و دوال التوزيع للجسيمات المدروسة عند المناطق الثلاثة السابقة وهي السطح وداخل الخلية وخارج الخلية باعتبار المركبتين x و y متوافقتين وتعالج المركبة z بصفة منفردة حسب النموذج الموضوع.

4.IV. مخطط برنامج الحساب العددي

أنجزنا لحل المسألة برنامجا عدديا بلغة الفورتران. الشكل (5.11) يوضح المخطط المعتمد للحساب العددي.



الشكل (5.11): مخطط سير الحساب العددي.

الفصل الثاني

نتائج وتحليل

الفصل الثالث: نتائج وتحليل

1. مقدمة

قمنا بتطبيق نموذج محاكاة مونت كارلو عن طريق إدخال قيم عشوائية للمقادير الإبتدائية المراد دراستها، حيث في حالتنا هذه كانت كل من المواضع والسرعات ومتوسط المسار الحر. وقمنا بدراسة تصادم جسيمات غاز ($O_2 ; N_2$) بالقرب من السطح لدراسة التصادم مع هذا الأخير. عن طريق إنجاز برنامج بلغة الفورترن 77، تم الحصول على مجموعة من نتائج عن طريق تغيير العدد الكلي للجسيمات المدروس وتغيير بعض الشروط الأخرى من ضغط ودرجة حرارة. النتائج المتحصل عليها متعلقة بنسب التصادمات والقيم المتوسطة لسرعات الجسيمات وتوزيعاتها عند المواضع الثلاث المذكورة في الفصل السابق (على السطح خارج الخلية وداخلها). وكما ذكرنا في الفصل الثاني، تتكون الخلية من جزيئات الأكسجين أو النيتروجين (الآزوت)؛ وهذا يعود إلى أن عملية التلحيم قد تتم في الهواء (تركيبه الهواء: 80% نيتروجين، 20% أكسجين). تتكون خلية المحاكاة من سطح ذو درجة حرارة $T_s=650\text{ K}$ ومجموعة كبيرة من الجسيمات غاز ذات درجة حرارة $T_g=600\text{ K}$. تم اعتماد في العموم أبعاد الخلية $2x_{\max}=2y_{\max}=z_{\max}=6\lambda_0$ حيث λ_0 يمثل متوسط المسار الحر للجسيمات المعرف في الفصل الثاني.

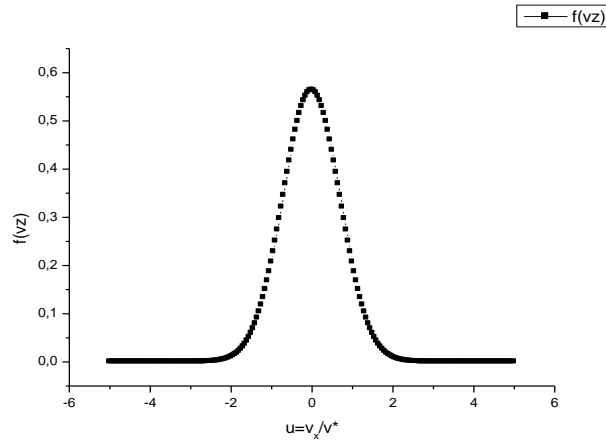
النتائج المقدمة هي في الوحدات المختزلة بالنسبة لأبعاد الخلية (مثلا $x_r=x/x_{\max}$) وبالنسبة للسرعة الأكثر احتمال ($u=v/v_{prb}$).

II. دوال التوزيع النظرية المعتمدة في المحاكاة

نعتمد في هذه الدراسة على برمجة ورسم باستخدام تطبيق أوريجين دوال توزيع إحصاء ماكسويل بولتزمان حسب المركبات الثلاث $x; y; z$ من أجل مقارنتها لاحقا بتوزيعات عند المناطق الثلاث في خلية المحاكاة أيضا قمنا ببرمجة ورسم دالة متوسط المسار الحر وفق النموذج المقترح. هذه التوزيعات النظرية أو التحليلية تستعمل من أجل الإختيار العشوائي للعينات. فكانت التوزيعات كالتالي:

1. II. دوال توزيع ماكسويل بولتزمان حسب المركبات

الشكل (1. III) يمثل منحنى دالة التوزيع الإحصائي على المركبة z وفق توزيع ماكسويل بولتزمان المعروف في الفيزياء الإحصائية بدلالة الوحدة المفترضة في البرمجة وهي $u = v_x / v_{prb}$ حيث أننا لم نرقم المركبتين الأخريين لأنهما متطابقتان مع المركبة المرسومة.



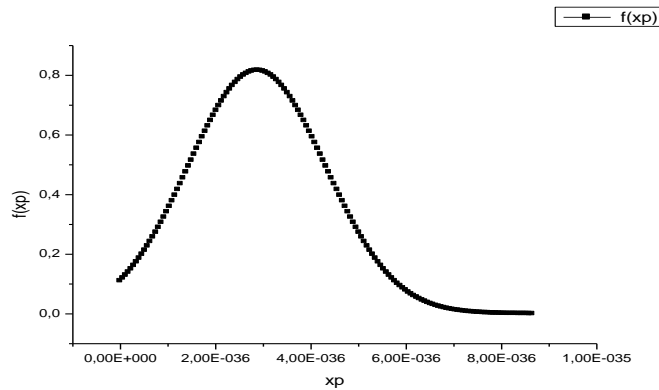
الشكل (1. III): دالة التوزيع للسرعة وفق توزيع ماكسويل بولتزمان حسب المركبة

Z

2. II. دالة التوزيع للمسار الحر للجسيمات

الشكل (2. III) يمثل دالة التوزيع لمتوسط المسار الحر وهي حسب النموذج المقترح في

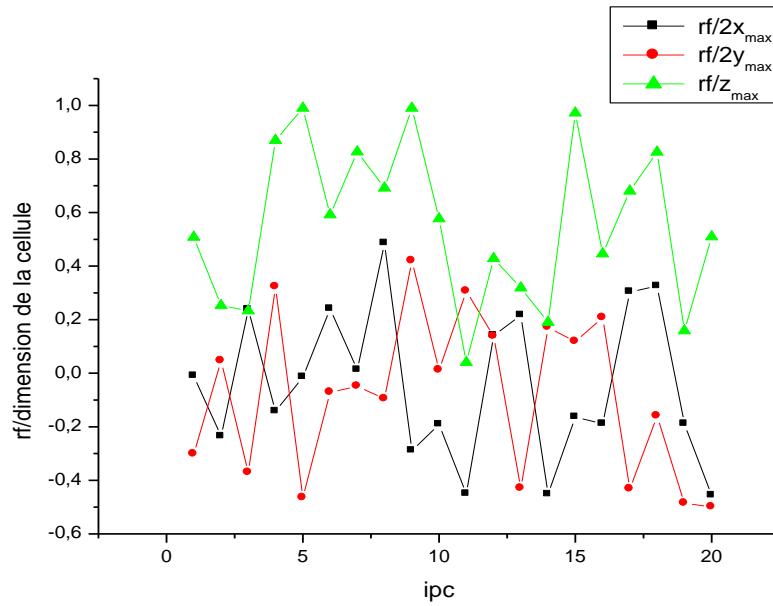
البرمجة والتي كتبت عبارتها في الفصل السابق.



الشكل (2. III): دالة توزيع للمسار الحر للجسيمات.

III. نتيجة الموضع الجديد (النهائي)

بعد اختيارنا للخلية بأبعاد X_{max} و Y_{max} و Z_{max} قمنا بالحساب من أجل عدد جزئي وصغير من الجسيمات لأجل الملاحظة عن قرب مدى تطابق الشروط الحدية الدورية في المحافظة على المادة في الخلية بحيث كل واحدة تخرج من خلية من جهة مقابلة تدخل من جهة أخرى نظيرتها في الكتلة والسرعة والطاقة الحركية وكمية الحركة الشكل (3. III) يوضح إحترام هذه الشروط الحدية.



الشكل (3.III): نتيجة الموضع النهائي ل 20 جسيمة

IV. نتيجة الإحصاء الأولي لطبيعة التصادمات عند تصادم واحد

توضح النتائج الآتية لاحقا الإحصاء الأولي لطبيعة الجسيمات وهذا الإحصاء يتمحور حول حساب بعض النسب أهمها النسبة $taux$ التي حسابها يجري في الثلاث حالات للخلية والقيمة المتوسطة للسرعات في أربع حالات عند إجراء تصادم واحد (بدون تصادمات متكررة) وهي:

- القيمة المتوسطة للسرعة قبل التصادم مع السطح,
- القيمة المتوسطة للسرعة بعد التصادم مع السطح,
- القيمة المتوسطة للسرعة قبل التصادم في الحجم,
- القيمة المتوسطة للسرعة بعد التصادم في الحجم,
- القيمة المتوسطة للسرعة قبل التصادم خارج الحجم.

1.IV. نتائج نسب التصادم

$$taux = \frac{\text{عدد التصادمات عند السطح المدروس و داخل الخلية وخارجها}}{\text{العدد الكلي للجسيمات}}$$

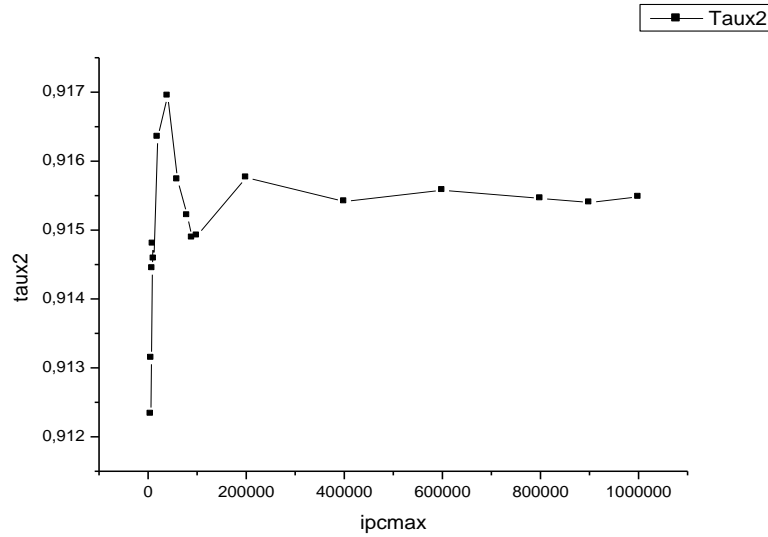
بداية نعرف كل نسبة وما يقابل مكان حسابها في الخلية:

$Taux_1$: تمثل النسبة بين عدد التصادمات مع السطح و العدد الكلي للجسيمات المختارة عشوائيا.

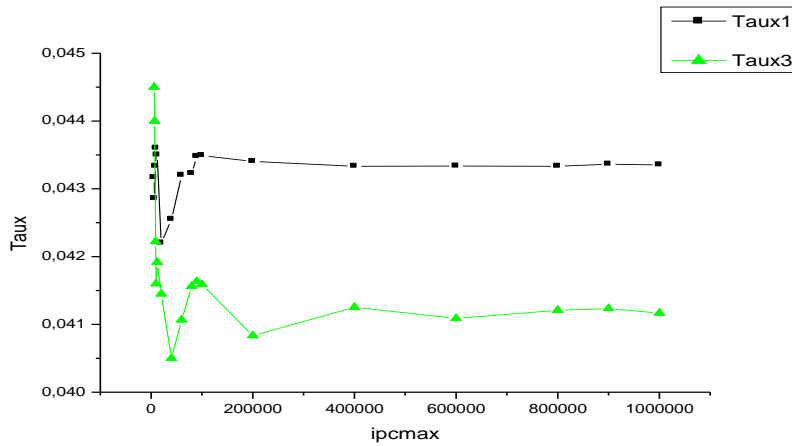
$Taux_2$: تمثل النسبة بين عدد التصادمات في الحجم و العدد الكلي للجسيمات المختارة عشوائيا.

$Taux_3$: تمثل النسبة بين عدد التصادمات خارج الحجم و العدد الكلي للجسيمات المختارة عشوائيا.

الشكل (4.III) والشكل (5.III) يوضحان تغير هذه النسب مع تغير عدد الجسيمات المختارة عشوائيا. نلاحظ أن هذه النسبة في الحجم تتقارب وتثبت قبل نظيرتها مع السطح وخارج الحجم.



الشكل (4.III): نتائج للنسبة بين عدد التصادمات في الحجم و العدد الكلي للجسيمات المختارة عشوائيا.



الشكل (5.III): نتائج النسبة بين عدد التصادمات مع السطح وخارج الحجم و العدد الكلي للجسيمات المختارة عشوائيا.

2.IV. نتائج القيم المتوسطة للسرعات

عند تغيير عدد الجسيمات وحساب هذه القيم باستخدام البرامج الفرعية في مختلف أنحاء التجربة المحاكية للواقع تحصلنا عليها في عدة مناطق نذكر منها :

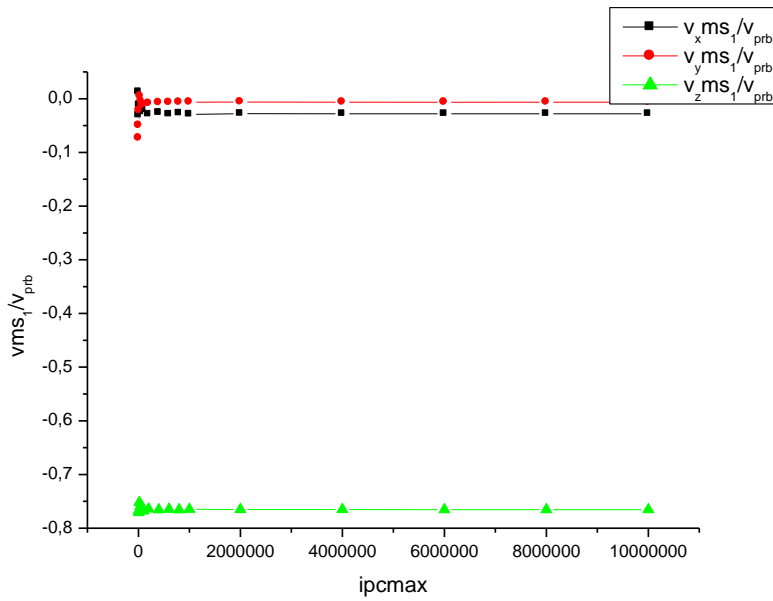
1.2.IV. قبل التصادم مع السطح

حيث أن القيمة المتوسطة للسرعة بالنسبة للسرعة الأكثر احتمالاً قبل التصادم مع السطح هي القيمة الأخيرة في الحساب والتي توافق ثبوت هذه الأخيرة أثناء الحساب للأعداد كبيرة من الجسيمات موضحة في الجدول التالي (ipcmx هو العدد الاجمالي للجسيمات):

الجدول(1.III):نتائج القيمة المتوسطة للسرعات قبل التصادم مع السطح

ipcmx	$V_{x_{moy,s1}}/V_{pr}$	$V_{y_{moy,s1}}/V_{pr}$	$V_{z_{moy,s1}}/V_{pr}$
10000 000	-2.807358E-02	-6.310191E-03	-7.654963E-01

الشكل(6.III) يوضح نتائج القيمة المتوسطة للسرعة للجسيمات قبل التصادم مع السطح.



الشكل (6.III): نتائج القيمة المتوسطة للسرعة للجسيمات قبل التصادم مع السطح.

2.2.IV. بعد التصادم مع السطح

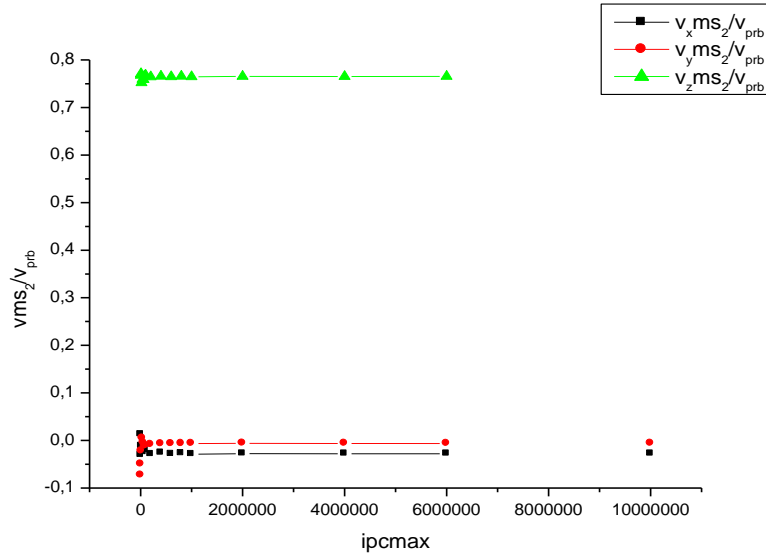
حيث أن القيمة المتوسطة للسرعة بالنسبة للسرعة الأكثر احتمالاً بعد التصادم مع السطح هي القيمة الأخيرة في الحساب والتي توافق ثبوت هذه الأخيرة أثناء الحساب للأعداد كبيرة من الجسيمات موضحة في الجدول التالي:

الجدول (2.III): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات بعد لتصادم مع السطح.

ipcmx	$V_{x_{moy,s2}}/V_{pr}$	$V_{y_{moy,s2}}/V_{pr}$	$V_{z_{moy,s2}}/V_{pr}$
10000 000	-2.807358E-02	-6.310191E-03	7.654963E-01

الشكل (7.III) يوضح نتائج القيمة المتوسطة للسرعة للجسيمات بعد التصادم مع السطح.

فعند أعداد كبيرة من الجسيمات يبدأ الثبات تدريجياً.



الشكل (7.III): نتائج القيمة المتوسطة للسرعة الجسيمات بعد التصادم مع السطح

3.2.IV قبل التصادم في الحجم:

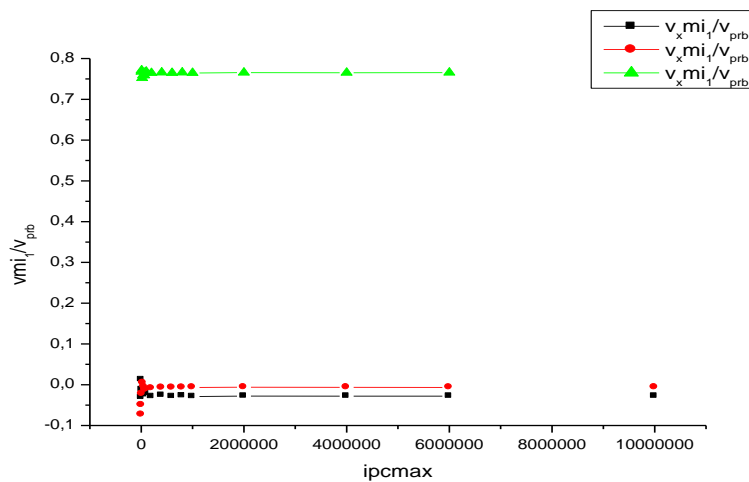
القيمة المتوسطة لسرعة بالنسبة للسرعة الأكثر احتمالاً لأعداد كبيرة من الجسيمات موضحة

في الجدول التالي:

الجدول (3.III): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات قبل لتصادم في الحجم.

ipcmax	$V_{x_{moy,i1}}/V_{pr}$	$V_{y_{moy,i1}}/V_{pr}$	$V_{z_{moy,i1}}/V_{pr}$
10000 000	-3.122370E-02	-2.049557E-02	-2.104105E-02

الشكل (8.III) يوضح نتائج القيمة المتوسطة للسرعة الجسيمات قبل التصادم في الحجم.



الشكل (8.III): نتائج القيمة المتوسطة للسرعة الجسيمات قبل التصادم في الحجم

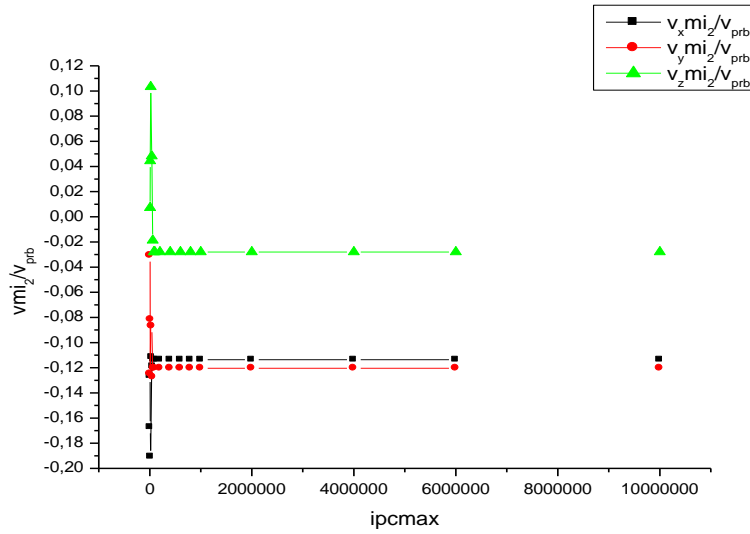
4.2.IV. بعد التصادم في الحجم

قيمة متوسطة السرعة بالنسبة للسرعة الأكثر احتمالاً للأعداد كبيرة من الجسيمات موضحة في الجدول التالي:

الجدول (4.III): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات بعد لتصادم في الحجم.

ipcmx	$V_{x_{moy,i2}}/V_{pr}$	$V_{y_{moy,i2}}/V_{pr}$	$V_{z_{moy,i2}}/V_{pr}$
10000 000	-1.135917E-01	-1.203958E-01	-2.801600E-02

حيث أن الشكل (9.III) يوضح نتائج القيمة المتوسطة للسرعة للجسيمات بعد التصادم في الحجم.



الشكل (9.III): نتائج القيمة المتوسطة للسرعة للجسيمات بعد التصادم في الحجم.

يكون الثبات في الحجم أسرع من المنطقتين الأخرتين بسبب العدد الكبير للتصادمات في هذه المنطقة.

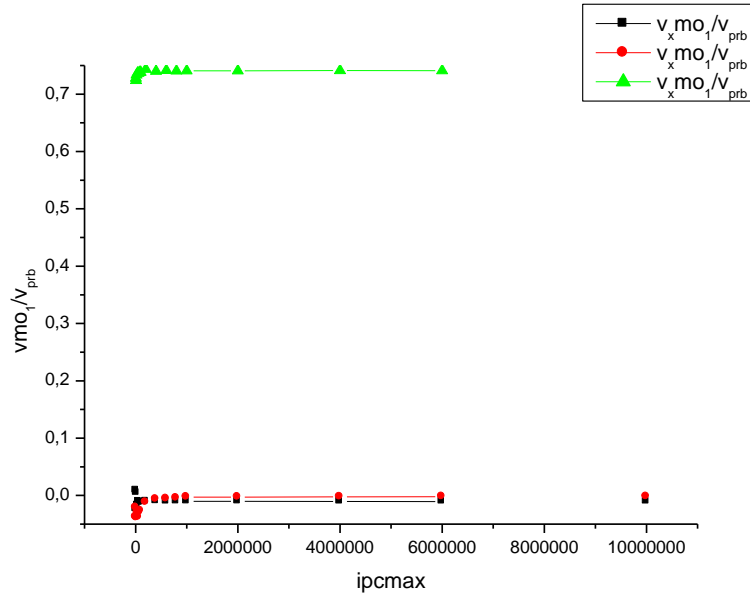
5.2.IV. قبل التصادم خارج الحجم

القيمة المتوسطة لسرعة بالنسبة للسرعة الأكثر احتمالاً للأعداد كبيرة من الجسيمات موضحة في الجدول التالي:

الجدول (5.III): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات قبل التصادم خارج الحجم.

ipcmx	$V_{x_{moy,o1}}/V_{pr}$	$V_{y_{moy,o1}}/V_{pr}$	$V_{z_{moy,o1}}/V_{pr}$
10000 000	-1.067645E-02	-2.068986E-03	7.410510E-01

منحنى النتائج لمتوسط قيم السرعات حسب المركبات خارج الخلية.



الشكل (III 10): نتائج القيمة المتوسطة للسرعة للجسيمات بعد التصادم خارج الحجم.

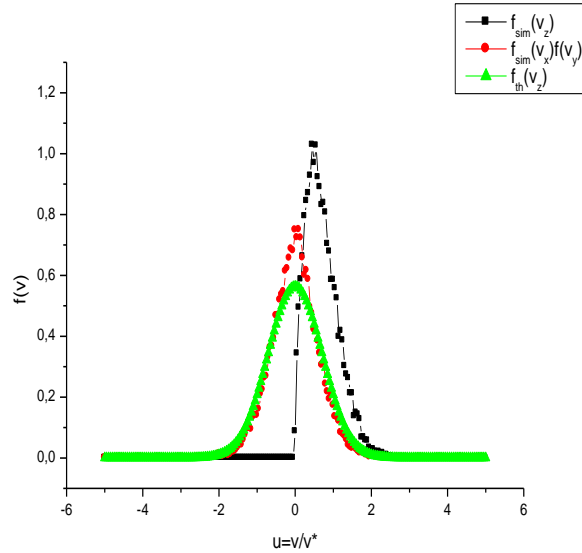
3.IV. توزيع السرعات

من خلال البرنامج الذي صممناه يمكن حساب توزيع السرعات للجسيمات بالقرب من السطح وفي الحجم وخارج الحجم حيث أن المركبتين X و Y (المتوافقتان) تعالجان بنفس الطريقة في البرنامج الإختلاف يكون في المركبة Z حسب النموذج المتبع في الدراسة. نقوم بتغيير عدد الجسيمات ونرى التوزيع الناتج.

في هذه الدراسة وباستخدام البرامج الفرعية في المناطق الثلاث للخلية نقوم بحساب توزيع بجوار كل منطقة فكانت النتائج كالتالي:

3.IV.1. توزيع سرعة عند السطح

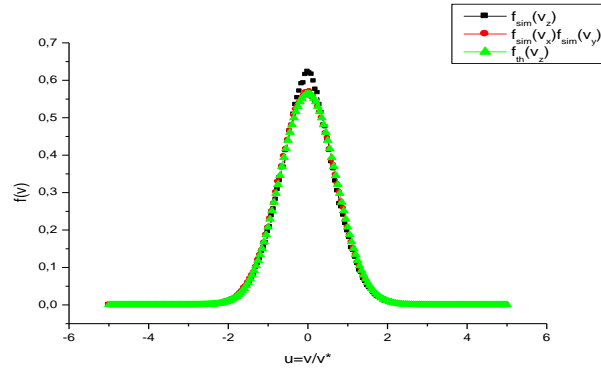
المقارنة مع المنحنيات النظرية تبين أن التوزيع بجوار السطح يشبه توزيع ماكسويل بولتزمان للسرعات غير أن بجانب السطح يكمن الإختلاف في أن منحنيات السرعات غير متطابقة مثل نظيراتها حسب المركبات.



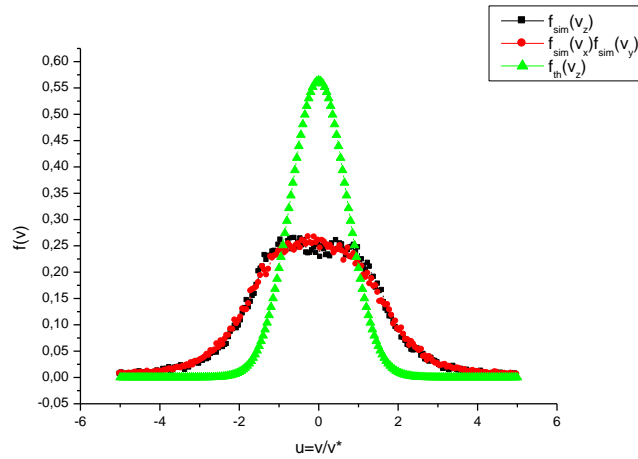
الشكل (11.111): توزيع السرعة عند تصادم مع السطح للمركبات المحسوبة بالمحاكاة مع منحنى دالة التوزيع للسرعات على المركبة Z.

2.3IV. توزيع السرعة في الحجم

في الحجم يوجد على منطقتين قبل التصادم وبعد التصادم حيث أن قبل التصادم نتائجها كالآتي:

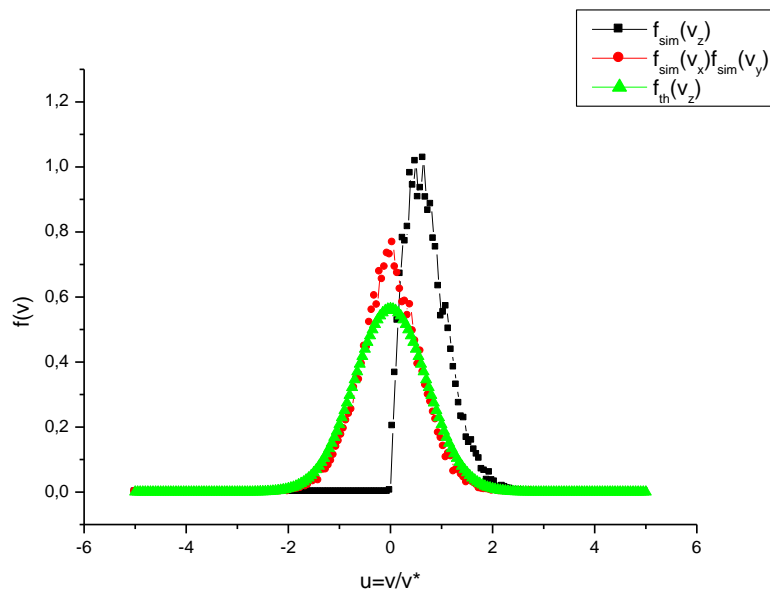


الشكل (12.111): توزيع السرعة قبل التصادم في الحجم للمركبات المحسوبة مع منحنى دالة التوزيع للسرعات وفق المركبة النظرية Z



الشكل (III 13): توزيع السرعة بعد تصادم الحجم لمركبات السرعة المحسوبة بالمحاكاة مع المركبة النظرية Z

3.3.IV. توزيع السرعات خارج الحجم



الشكل (III 14): توزيع السرعة عند التصادم خارج الحجم لمركبات السرعة المحسوبة بالمحاكاة مع المركبة النظرية Z

V. الإحصاء لطبيعة التصادمات من أجل التصادمات متتالية

في هذه المرحلة من الحساب نفترض عدة (10) تصادمات متتالية للجسيم الأول.

1.V. نسب التصادمات من أجل التصادمات متتالية

نعرف نسبة التصادم من أجل تصادمات متتالية كالآتي:

$$taux = \frac{\text{عدد التصادمات عند السطح المدروس و داخل الخلية وخارجها}}{\text{العدد الكلي للتصادمات}}$$

يمثل الجدول (6.iii) النسب المتحصل عليها من أجل 10 تصادمات متتالية.

الجدول (6.iii): نتائج نسب التصادمات من أجل التصادمات متتالية

ipcmax	taux1	taux2	taux3
6000	1.871673E-01	7.785712E-01	3.426143E-02
10 000	1.864351E-01	7.798429E-01	3.372201E-02

بالمقارنة مع تصادم واحد غير متكرر نجد في السطح يرتفع عددها تصل إلى 18% أما في الحجم ينخفض عددها من 90% إلى 77% وخارج الحجم بدورها هي أيضا تنخفض من 4% إلى 3% هذا الإنخفاض في كل من الحجم وخارج الحجم بالضرورة يؤدي إلى زيادة التصادمات مع السطح.

2.V. القيم المتوسطة للسرعات من أجل التصادمات متتالية

1.2.V. بعد التصادم مع السطح

يمثل الجدول (7.iii) القيم المتوسطة للسرعات بعد التصادم مع السطح من أجل

10 تصادمات متتالية.

الجدول (7.iii): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات بعد التصادم مع السطح من أجل 10

تصادمات متتالية

ipcmax	$V_{x_{moy,s2}}/V_{pr}$	$V_{y_{moy,s2}}/V_{pr}$	$V_{z_{moy,s2}}/V_{pr}$
6000	-18.853150	-82.892400	-1593.258000
10 000	-10.206730	-1.105500	-122.511700

2.2.V. بعد التصادم في الحجم

يمثل الجدول (8.iii) القيم المتوسطة للسرعات داخل الخلية من أجل 10

تصادمات متتالية.

الجدول (8.iii): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات بعد التصادم في الحجم من أجل 10

تصادمات متتالية.

ipcmax	$V_{x_{moy,i2}}/V_{pr}$	$V_{y_{moy,i2}}/V_{pr}$	$V_{z_{moy,i2}}/V_{pr}$
6000	-72.855530	54.661180	-846.527800
10 000	-15.855790	-28.219760	124.437900

3.2.V. قبل التصادم خارج الحجم

يمثل الجدول (9.III) القيم المتوسطة للسرعات قبل التصادم خارج الخلية من أجل 10 تصادمات متتالية.

الجدول (9.III): نتائج القيمة المتوسطة للسرعات قبل التصادم خارج الحجم من أجل 10 تصادمات متتالية.

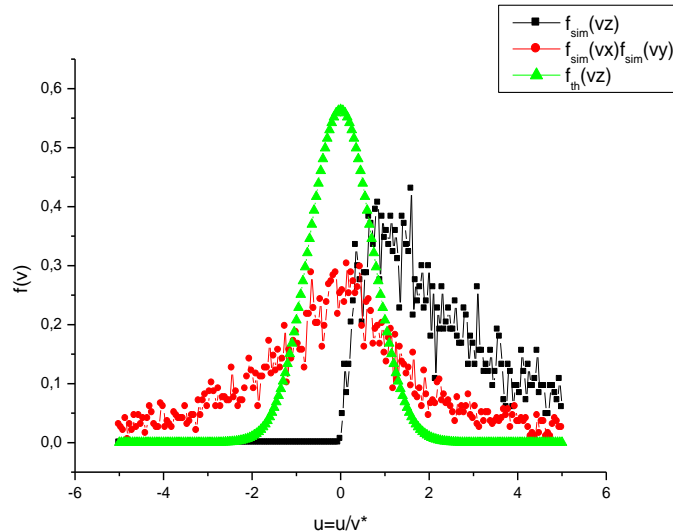
ipcmx	$V_{x_{moy,o2}}/V_{pr}$	$V_{y_{moy,o2}}/V_{pr}$	$V_{z_{moy,o2}}/V_{pr}$
6000	23.538980	68.582630	226.355100
10 000	14.950610	52.947380	732.917400

تبدو القيم المتوسطة المحسوبة في المناطق الثلاث غير معقولة فهي أكبر بكثير من السرعة V_p في حين أن الحساب عند كل تصادم يقدم سرعات في حدود V_p . ربما يكون هناك خطأ في تقدر حساب القيم المتوسطة في هذه الحالة و ربما يكون راجع لتحديد في اختيار الحلول (زاوية شعاع السرعة في المعلم المتحرك) في خوارزمية غوص - صايدل المقترحة.

3.V. توزيع السرعات من أجل تصادمات متتالية

1.3.V. عند السطح

تمثل المنحنيات توزيع السرعات بعد التصادم مع السطح من أجل 10 تصادمات متتالية.

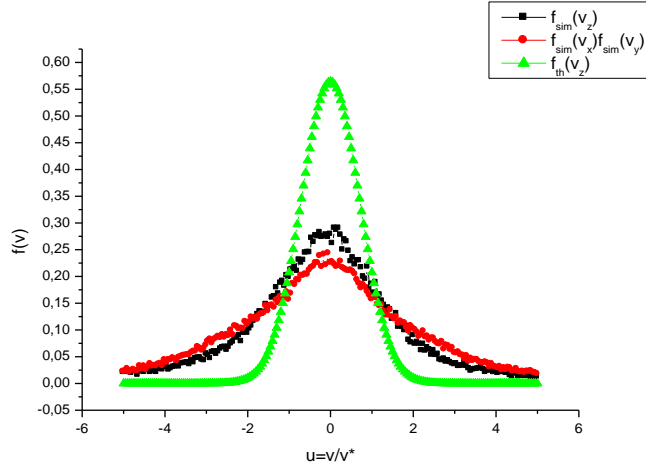


الشكل (15.III): توزيع السرعة عند تصادم مع السطح للمركبات المحسوبة بالمحاكاة مع منحنى

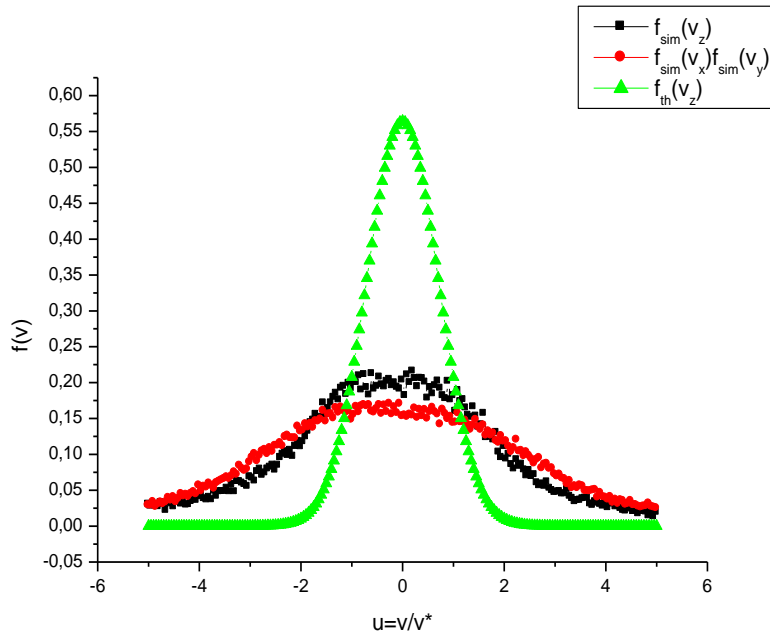
دالة التوزيع للسرعات على المركبة Z عند إجراء 10 تصادمات متتالية.

2.3.V. عند الحجم

تمثل المنحنيات توزيع السرعات بعد التصادم داخل الخلية من أجل 10 تصادمات متتالية.



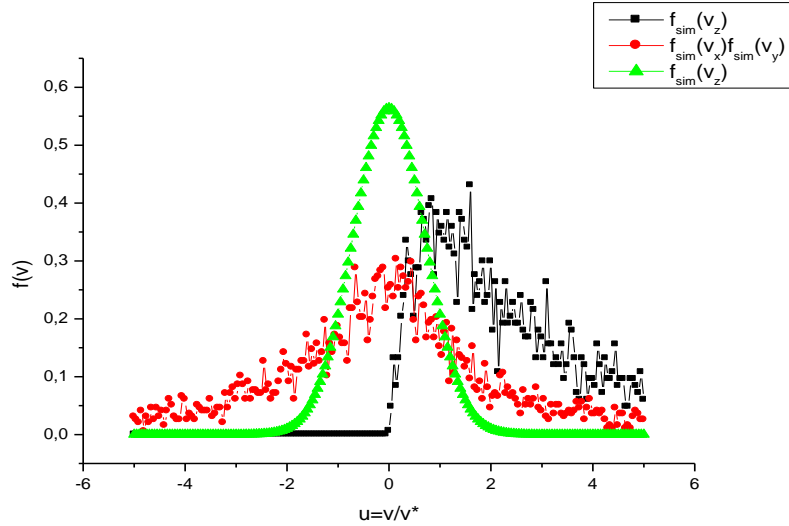
الشكل (16.III): توزيع السرعة قبل تصادم في الحجم للمركبات المحسوبة بالمحاكاة مع منحنى دالة التوزيع للسرعات على المركبة Z عند إجراء 10 تصادمات متتالية.



الشكل (17.III): توزيع السرعة بعد تصادم في الحجم للمركبات المحسوبة بالمحاكاة مع منحنى دالة التوزيع للسرعات على المركبة Z عند إجراء 10 تصادمات متتالية.

3.3.V خارج الحجم

تمثل المنحنيات توزيع السرعات قبل التصادم خارج الخلية من أجل 10 تصادمات متتالية.



الشكل (III 18): توزيع السرعة قبل تصادم خارج الحجم للمركبات المحسوبة بالمحاكاة مع منحنى

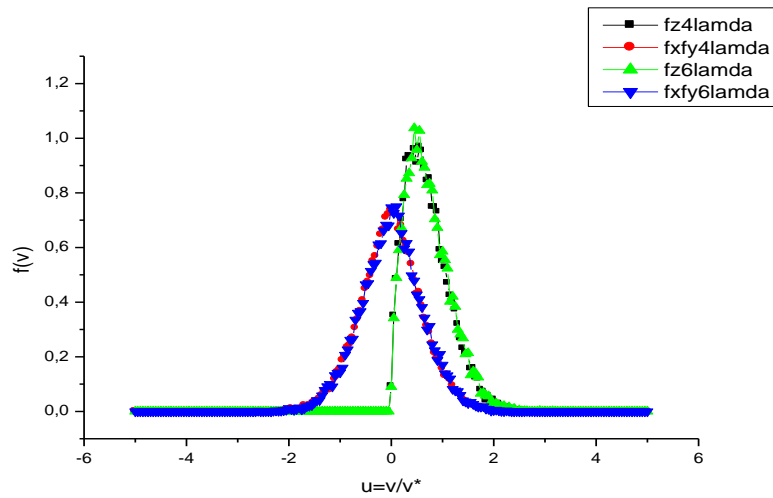
دالة التوزيع للسرعات على المركبة Z عند إجراء 10 تصادمات متتالية.

VI. تأثيرات أبعاد الخلية:

قمنا بدراسة تأثير أبعاد الخلية على الخصائص الاحصائية المدروسة. الأشكال اللاحقة تبين

مختلف النتائج من أجل $6\lambda_0$ و $4\lambda_0$.

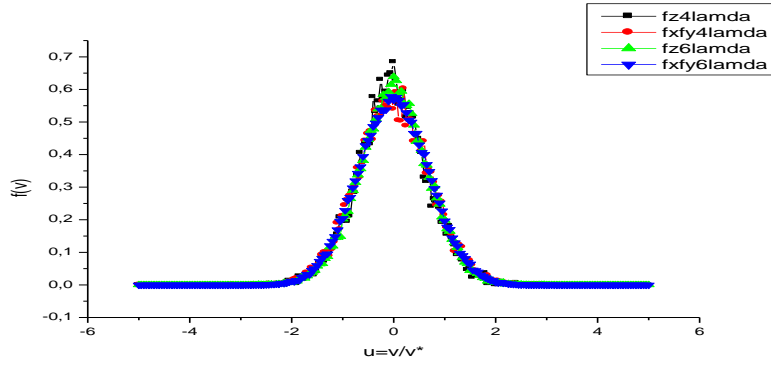
1.VI. قبل التصادم مع السطح



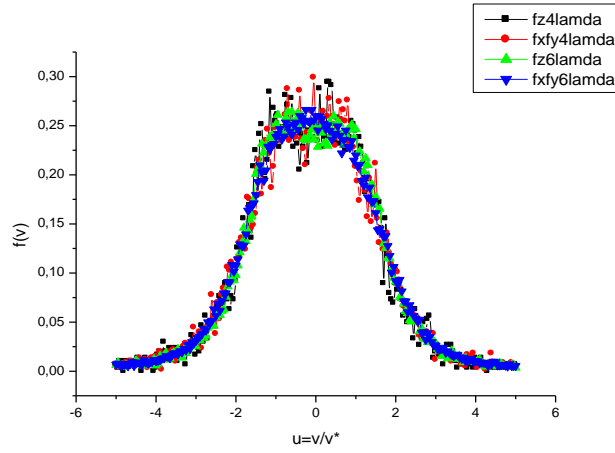
الشكل (III 19): توزيع السرعة قبل تصادم مع السطح للمركبات المحسوبة بالمحاكاة في البعدين

$6\lambda_0$ و $4\lambda_0$ المحاكاة.

2.VI. قبل وبعد التصادم في الحجم

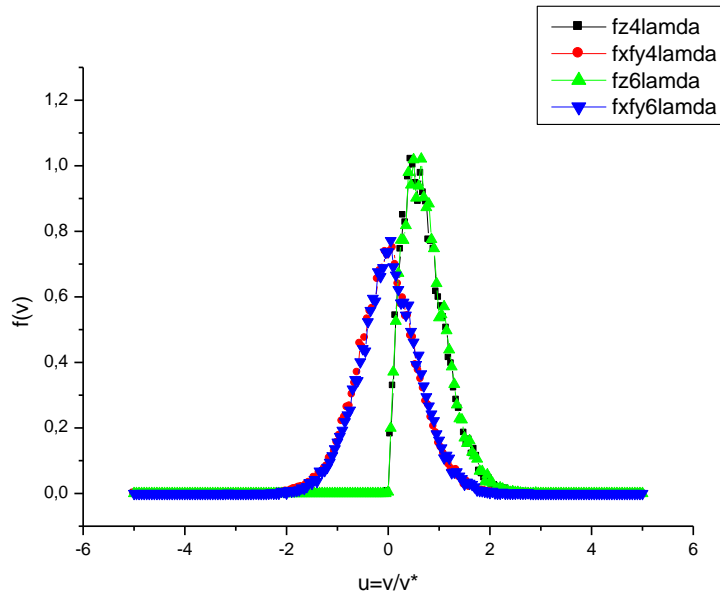


الشكل (20.III): توزيع السرعة قبل تصادم في الحجم للمركبات المحسوبة بالمحاكاة في البعدين $4\lambda_0$ و $6\lambda_0$ لخلية المحاكاة.



الشكل (21.III): توزيع السرعة بعد تصادم في الحجم للمركبات المحسوبة بالمحاكاة في البعدين $4\lambda_0$ و $6\lambda_0$ لخلية المحاكاة.

3.VI. قبل التصادم خارج الحجم



الشكل (22.III): توزيع السرعة قبل تصادم خارج الحجم للمركبات المحسوبة بالمحاكاة في البعدين

$4\lambda_0$ و $6\lambda_0$ المحاكاة

الملاحظة العامة بالنسبة لتوزيعات السرعات في المناطق الثلاثة أن التطابق كبير بين $6\lambda_0$ و $4\lambda_0$ لأبعاد الخلية.

الخلاصة العامة

والآفاق

الخلاصة العامة والأفاق

تعتبر دراسة الخصائص الإحصائية لجسيمات الغاز أو الهواء بجانب سطح أثناء عملية التلحيم مهمة لفهم الكثير من الظواهر الفيزيائية. ويمكن لطرق المحاكاة العددية أن تلعب دورا مهما في معالجة هذه المسائل.

الهدف من دراستنا هذه هو دراسة عن طريق المحاكاة العددية لمونتي كارلو، لتصادم بين جزيئات الأكسجين أو النيتروجين مع سطح. الظروف مرتبطة عملية التلحيم تتم في الهواء. وفي هذا السياق قمنا بإنجاز برنامج يعرض تجربة عددية تتمذج التفاعل بين هذا السطح والجسيمات السابق ذكرها.

قسمنا المذكرة إلى ثلاث فصول.

الفصل الأول تطرقنا فيه لدراسة وجيزة لبعض المفاهيم الفيزيائية كتردد التصادم ومتوسط المسار الحر ودوال التوزيع للسرعات لماكسويل بولتزمان وطرق انتقال الحرارة. أما الفصل الثاني فقدمنا فيه النموذج المقترح للمحاكاة العددية بطريقة مونتي كارلو. حيث قمنا بتقديم مواصفات خلية المحاكاة و النموذج الرياضي والنموذج العددي المعتمد في هذه الدراسة. تم اعتماد ثلاث مناطق (داخل الخلية وخارجها والسطح) وتمت معالجة التصادمات المرنة لجسيم مع جسيم آخر أو مع السطح حسب الحالة. لحساب سرعة الجسيمات بعد التصادم تم استعمال خوارزمية غوص- صايدل التكرارية.

في الفصل الثالث من أجل جسيمات غاز الأكسجين وفي ضغط ودرجة حرارة ثابتين ($T_0=600K, P=1atm$) قمنا بحساب نسب التصادمات والقيم المتوسطة للسرعات وتوزيعها في المناطق الثلاث. فقمنا ب:

- عرض دوال التوزيع للسرعات لماكسويل بولتزمان حسب المركبات؛ وكذلك دالة المسار الحر للجسيمات.
- احصاء دقيق لنسب التصادمات ومقارنتها وكيفية التقارب مع عدد الاجمالي لجسيمات المحاكاة العددية.
- تم التأكد من أن هذه الجسيمات المختارة عشوائيا واقعة في الخلية بتطبيق مايسمى بالشروط الحدودية الدورية.
- توزيع السرعات الناتج في المناطق الثلاث على شكل منحنيات بيانية.
- تمت المحاكاة من أجل تصادم واحد ومن أجل عدة تصادمات حيث أن الفرق في مقادير التوزيعات كان كبيرا. كما لاحظنا أن نسبة التصادم مع السطح ترتفع.
- بالنسبة لأبعاد الخلية ($6\lambda_0$ و $4\lambda_0$) على توزيعات السرعات في المناطق الثلاثة كان ضئيلا.

- بالنسبة للأفاق المستقبلية يمكن اقتراح الآتي:
- تطبيق النموذج من أجل مركبتين أو أكثر ذات كتل مختلفة،
 - دراسة التصادمات غير مرنة داخل الغاز،
 - دراسة التصادمات غير مرنة مع السطح وطبيعته،
 - دراسة التصادمات المرنة وغير مرنة من أجل مقادير متغيرة مع الزمن،
 - تعميم الدراسة لظروف غير عمليات التلحيم.

قائمة المراجع

قائمة المراجع

[1] H. Daoui ; "Contribution à l'étude du comportement fluide de plasma lors de l'interaction des torches à plasma avec les métaux " ; Mémoire de Magister ; Université de Ouargla, 2008.

[2] Y. Benzahi ; « Simulation numérique par la dynamique moléculaire de l'interaction de plasma-surface lors de déposition sur couches minces » ; Mémoire de Magister, Université de Ouargla, 2003.

[3] F. Khelfaoui and O. Babahani; How to Use the Monte Carlo Simulation Technique? Application: A Study of the Gas Phase during Thin Film Deposition; Book Chapter; Academic Editor : Pooneh Saidi; in intechopen; August 2019; DOI: 10.5772/intechopen.88559.

[4] J. L. Delcroix et A. Bers ; « Physique des Plasmas » ; Ed. CNRS, Paris, 1994.

[5] O. Babahani ; « Simulation numérique par la méthode de Monte Carlo de la déposition de couches minces par procédés CVD » ; Thèse de doctorat, Université de Ouargla, 2013.

[6] M. Moisan et J. Pelletier ; « Physique des plasmas collisionnels » ; Edition sciences, France ,2006.

[7] إ. شحي ؛ "حساب دوال توزيع الحقل الكهربائي الموضوعي ومشتقاتها داخل البلازما بإستخدام المحاكاة العددية مونت كارلو تطبيق على طيف الهيليوم" ؛رسالة دوكتوراه دولة؛جامعة منتوري قسنطينة، 2005.

[8] س. قريشة؛ "إستخدام نموذج الجسيمات المستقلة لحساب الدوال توزيع المشتقات الفضائية للحقل الكهربائي الأيوني الموضوعي في البلازما" ؛ رسالة دوكتوراه ؛ جامعة قاصدي مرباح ورقلة، 2012.

[9] S. Ichimqru ; « Basic principles of plasma physics » ; W. A. Benjamin INC , 1973.

[10] R. Fitzpatrick ; "Introduction To Plasma Physics " ; The Institute For Fusion studies ; The Univesity of Texas At Astin, 1998.

[11] J. Mateo-Velez ; "Modélisation et simulation numérique de la génération de plasma dans les décharge couronnes et de son interaction avec l'aérodynamique" ; Thèse de doctorat ; Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 2006.

[12] P. Savoini ; « Introduction à la physique des plasmas », 2009.

[13] www.mawdoo3.com (إطلعت عليه يوم 2020/09/08).

[14] ر.العلمي؛ "مبادئ إنتقال الحرارة، الجزء الأول، التوصيل الحراري"؛ ديوان المطبوعات الجامعية؛قسنطينة،1994.

[15] م.الشمري؛ "مبادئ إنتقال الحرارة"؛ دار الصفاء للنشر والتوزيع عمان،2008.

[16] S. Tabet ; "Etude numérique de la convection naturelle dans une enceinte fermée partiellement chauffée " ; Thèse de doctorat, Université de Oran , 2017 .

[17] د.جيانوكلي؛ "الفيزياء المبادئ والتطبيقات"؛ سلسلة الكتب الجامعية المترجمة؛المملكة العربية السعودية،2007.

[18] ف. السهريجي؛ "اساسيات التصنيع الزراعي"؛ المكتبة الأكاديمية،1998.

[19] N. Guessoum et F. Benatallah " Echange de chaleur entre les gaz de protection et les pièces d'alliages métalliques " ; Mémoire de Master Université de Ouargla ; 2018.

[20] F. Hathat ; Etude des vitesses de gaz de protection dans les dispositifs de soudage aux lasers de pièces d'alliages métalliques " ; Mémoire De Master Université De Ouargla ; 2017.

[21] S. Bannour, K. Abderrazak, H. Mhiri and G. Le Palec ; « Effects of temperature –dependent material properties and shielding gas on molten pool formation during continuous laser welding of AZ91 magnesium alloy» ; Elsvier, **Vol.** 44, 2459–2468, (2012).

[22] S. Lemkeddem, F. Khelfaoui and O. Babahani; "Calculation of energy lost by radiation and convection during laser welding of TA6V titanium alloy" ; Journal of Theoretical and Applied Physics, Vol. 12, pp 113–120 (2018).

[23] C. Ngo et H. Ngo ; « Physique statistique » ; Ecoles d'ingénieurs ; Sciences sup ; Dunod ; France, 1988.

[24] L. Laurencelle ; Hasard nombres aléatoires et méthode Monté Carlo; Presses de l'Université du Québec, 2001.

[25] E. Nelson ; "Dynamical Theories of Brownian Motion" ; Princeton University Press, 1967.

[26] www.statisticshowto.com; (إطلعت عليه يوم 2020/09/08)

[27] O. Babahani, S. Hadjadj, F. Khelfaoui, H. O. Kebaili and S. Lemkeddem; "Monte Carlo Simulation of reactions occurring in SiH₄/H₂ plasma during the a-Si:H growth by Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD): from microscopic view to macroscopic results"; Silicon; Vol. 11 N° 03, pp 1267–1274, 2019.

[28] O. Babahani and F. Khelfaoui ; Simulation Monte Carlo de réactions chimiques dans le volume d'un réacteur PECVD lors de déposition d'une couche mince a-C:H ; Annales des Sciences et Technologie; Vol. 6, N°2, pp 156 – 164 (2014).

[29] H. Khachab ; "Modélisation de croissance épitaxiale par jets moléculaires (MBE) avec la méthode de monte de Monte Carlo Cinétique (KMC)" ; Thèse de Doctorat ; Université de Tlemcen, 2010.

[30] ف. ساكري ; " حساب توزيع سرعات الأيونات بإستعمال محاكاة مونت كارلو عند تصادم مع الهدف في تقنية الرش المهبطي في نظام كهربائي مستمر DC "؛ مذكرة ماستر أكاديمي، 2015 .

[31] ر. قادري ; " حساب توزيع سرعات الأيونات بإستعمال محاكاة الديناميكا الجزيئية عند تصادم مع الهدف في تقنية الرش المهبطي في نظام كهربائي مستمر DC "؛ مذكرة ماستر أكاديمي، 2015 .

ملخص:

تعتبر دراسة الخصائص الإحصائية لجسيمات الغاز أو الهواء بجانب سطح أثناء عملية التلحيم مهمة لفهم الكثير من الظواهر الفيزيائية. قمنا بتحضير برنامج محاكاة عددية يعتمد على طريقة مونت كارلو لدراسة التصادمات المرنة لجسيمات الغاز مع السطح. تم اعتماد ثلاث مناطق بالنسبة لخلية المحاكاة (داخل الخلية وخارجها والسطح). وتمت معالجة التصادمات المرنة لجسيم مع جسيم آخر أو مع السطح حسب الحالة. لحساب سرعة الجسيمات بعد التصادم تم استعمال خوارزمية غوص صايدل التكرارية.

قمنا بحساب نسب التصادمات والقيم المتوسطة للسرعات وتوزيعها في المناطق الثلاث لجسيمات غاز الأوكسجين وفي ضغط ودرجة حرارة ثابتين ($T_g=600K$, $P=1atm$). تمت المحاكاة العددية من أجل تصادم واحد ومن أجل عدة تصادمات متتالية؛ كان الفرق في مقادير التوزيعات كبيرا من أجل تصادمات متتالية. كما لاحظنا أن نسبة التصادم مع السطح ترتفع. و بالنسبة لأبعاد مختلفة للخلية ($6\lambda_0$ و $4\lambda_0$). بينت المحاكاة أن الفرق في توزيعات السرعات في المناطق الثلاثة كان ضئيلا.

الكلمات المفتاحية: تردد التصادم، المسار الحر، حركة براونية، توزيع ماكسويل بولتزمان، توزيع غاوصي، طريقة مونت كارلو، خوارزمية غوص-صايدل التكرارية، توزيع السرعات.

Résumé :

L'étude des propriétés statistiques des particules de gaz ou d'air près d'une surface pendant le processus de soudage est importante pour comprendre de nombreux phénomènes physiques. Nous avons élaboré un programme de simulation numérique basé sur la méthode de Monte Carlo pour étudier les collisions élastiques des particules de gaz avec la surface. Trois régions ont été adoptées pour la cellule de simulation (intérieur, extérieur et surface). Et les collisions élastiques d'une particule avec une autre particule ou avec la surface ont été traitées, selon les cas. Pour calculer la vitesse des particules après la collision, l'algorithme itératif de Gauss-Seidel a été utilisé.

Nous avons calculé les taux de collisions, les valeurs moyennes des vitesses et leurs distributions dans les trois régions pour des molécules d'oxygène gazeux, à pression et à température constante ($T_g = 600K$, $P = 1atm$). Des simulations numériques ont été effectuées pour une seule collision et pour plusieurs collisions successives ; La différence entre les grandeurs des distributions était importante pour les collisions successives. Nous avons également remarqué que le taux de collision avec la surface augmente. En ce qui concerne les différentes dimensions de la cellule ($6\lambda_0$ et $4\lambda_0$), la simulation a montré que la différence dans les distributions de vitesse dans les trois régions était minimale.

Mots clés: Fréquence de collisions, libre parcours, mouvement brownien, distribution de Maxwell Boltzmann, distribution gaussienne, méthode de Monte Carlo, l'algorithme itératif de Gauss-Seidel, distribution de vitesse.

Abstract:

The study of the statistical properties of gas or air particles alongside a surface during the welding process is important for understanding many physical phenomena. We have elaborated a numerical simulation program based on the Monte Carlo method to study the elastic collisions of gas particles with the surface. Three regions were adopted for the simulation cell (inside, outside, and surface). Elastic collisions of one particle with another particle or with the surface were dealt with, depending on the case. To calculate the velocity of the particles after the collision, the Seidel iterative shear algorithm was used.

We calculated collision rates, mean values of velocities and their distributions in the three regions for oxygen gas molecules and at constant pressure and temperature ($T_g = 600K$, $P = 1atm$). Numerical simulations have been done for one collision and for several successive collisions; the difference in the magnitudes of the distributions was large for consecutive collisions. We also noticed that the rate of collision with the surface increases. For different dimensions of the cell ($6\lambda_0$ and $4\lambda_0$), the simulation showed that the difference in the velocity distributions in the three regions was minimal.

Key words: Collision Frequency, Free Path, Brownian Motion, Maxwell Boltzmann Distribution, Gaussian Distribution, Monte Carlo Method, Gauss-Seidel iterative algorithm, Velocity distribution.