الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

رقم الترتيب:

رقم التسلسل:

جامعة الشهيد حمة لخضر الوادي

كلية العلوم الدقيقة

قسم: الفيزياء

مذكرة تخرج مقدمة لنيل شهادة

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

تخصص: فيزياء إشعاع

من إعداد:

بوطيب حليمة

خطاب خديجة

الموضوع:

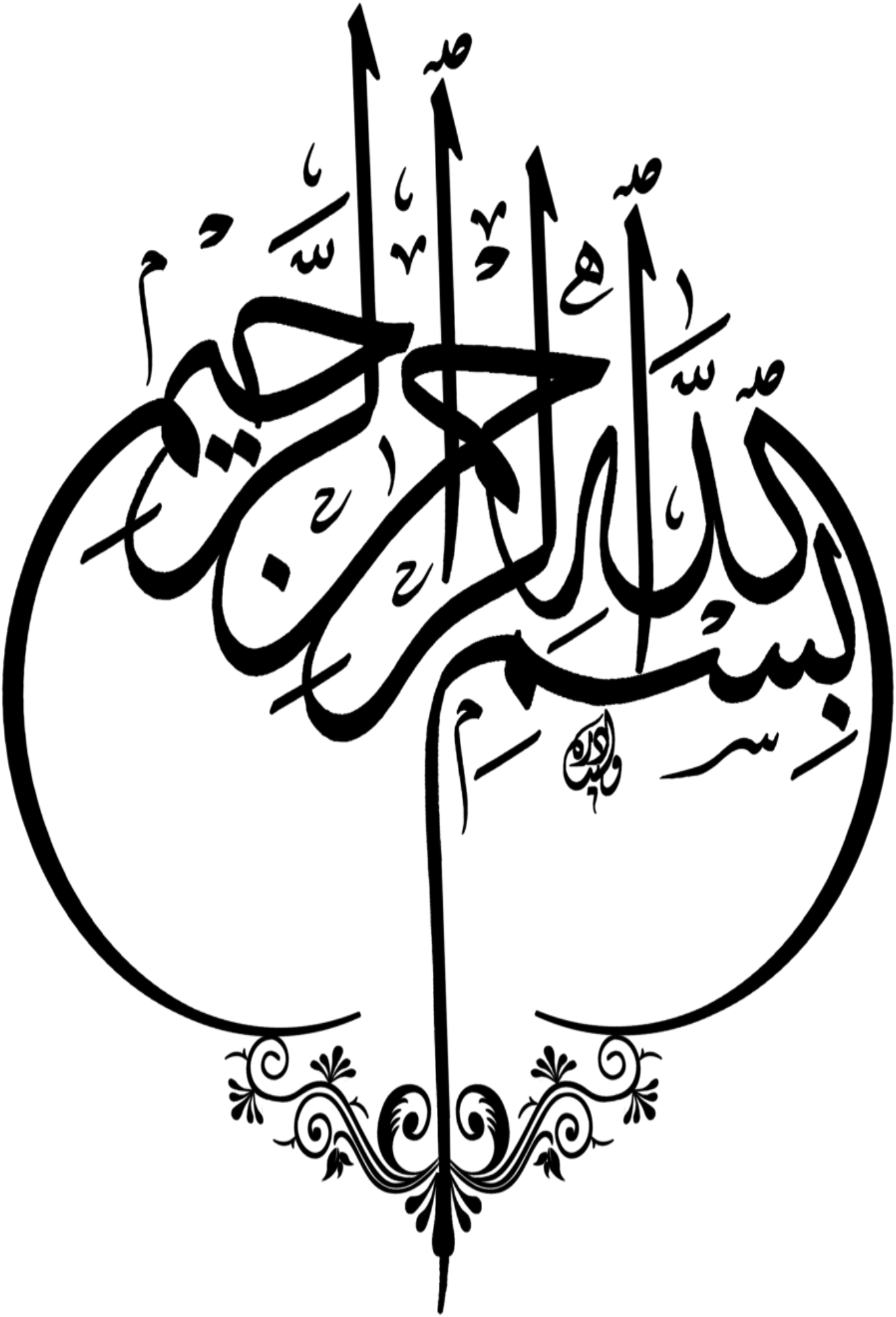
محاكاة الانتشار والمشي العشوائي

نوقشت يوم: 28/ 2021/06

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

ليتيم فتحي	أستاذ محاضر ب	جامعة الوادي	رئيسا
احميم رشيد	أستاذ محاضر ب	جامعة الوادي	مناقشا
بسر الزوبير	أستاذ مساعد أ	جامعة الوادي	مؤطرا

الموسم الجامعي: 2021/2020


بسم الله الرحمن الرحيم

الإهداء

الحمد لله الذي هدانا لهذا وما كنا لنهتدي لولا أن هدانا الله والذي وفقنا إلى إنجاز هذا العمل المتواضع.

إلى عطاء الحب والحنان وجنة الرحمان , إلى الشمعة التي تحتَّرق حتى أضيء "أمي الحبيبة" .

إلى من أنار لي دروب العلم والمعرفة منذ الصغر إلى سندي في الحياة إلى الذي يشجعني على حب العلم والنجاح والتفوق "أحمد خطاب " "أبي العزيز"

إلى جميع أفراد عائلتي بدأ بمؤنسات وحدتي في الحياة أخواتي : *هالة, عبير, ريان, مريم* .

إلى شموع حياتي إخوتي: *محمد رحمة الله عليه , عبد الرحيم, عبد الجليل *.

إلى رفيقة مشواري "حليمة بوطيب "

إلى أعمامي وعماتي وأبنائهم كل باسمه ووسمه وأخص بالذكر عمي العزيز "صالح خطاب" وعمي الغالي "بشير خطاب" الذين أفادوني كثيرا بنصائحهم وخبرتهم وتوجيهاتهم.

إلى أخوالي (بلال إبراهيم أنور) وخالاتي العزيزات وأخص بالذكر الأم الثانية "خالتي أمال" وعائلتها بأكملها والى إخوتي الذين لم تلدهم أمي "الطالب محمد خطاب، محمد بوترعة، محمد علي خطاب"

أهدي هذا العمل إلى الأستاذ المشرف "الزوبير بسر" جزاه الله عنا كل خير.

أهديه بكل شكر وتقدير واحتَّرام لكل أساتذتي بكلية "العلوم الدقيقة" وأخص بالذكر الدكتور"احيم رشيد" على كل ما قدمه لنا من نصح وتوجيه وعمل، وكذلك عون الأمن والإدارة "رجاء خنوفة، هشام بريكي، الطاهر بالشيخة، خالد بيه" لما قدموه لنا من مساعدة في توفير بعض البرامج والمراجع والوسائل .

إلى صديقات الطفولة اللاتي لن أنساهن ما حييت:"خديجة، العطرة، بثينة، نبيلة، كوثر،رجاء، دلال، صفاء، آية، ليلى عازب الشيخ"

إلى أخواتي اللاتي لم تلدهن أمي:"بشيرة وعفاف وسارة و فادية وأميرة ومنال وبلقيس ودنيا و خولة، رجاء فطحيزة عمار، ابتسام صالحي، خولة شيباني، ابتسام قدورة، جبارية " وإلى زملائي في مقاعد الدراسة وإلى كل من لم تسعها قائمتي .

خديجة خطاب

الإهداء

اهدي ثمرة جهدي هذا .....

الى من نطق بكلمة التوحيد لسانه وصدقها قلبه، الى كل من صلى على خير البرية محمد

عليه أفضل الصلاة والتسليم.

إلى من كلله الله بالهيبة والوقار .....إلى من علمني العطاء بدون إنتظار.....إلى من احمل اسمه بكل افتخار.ستبقى كلماته نجوم اهتدي بها اليوم وفي الغد وإلى الأبد.....إلى من تمنيت أن يرى ثمار تعبه....**إلي روح والدي العزيز رحمة الله عليه**

إلى ملاكي في هذه الحياة.....إلى معنى الحب والحنان.....إلى بسمة وسر الوجود إلى من كان دعاؤها سر نجاحي وحنانها بلسم جراحي إلى أغلى ما أملك ....**أمي الحبيبة**

إلى من لا يمكن للكلمات أن توفيهم حقهم ولا للأرقام أن تحصي فضائلهم أخواتي الأعزاء

" السعيد، ياسين، طه، أشرف "

إلى النور الذي يضئ حياتي وسند قوتي وما لذي بعد الله إلى من أثروني على نفسهم إلى من أظهروا الي ما هو أجمل ما في الحياة أخواتي :" **دليلة، صحرة، وداد، جمعة، مغنية، أميمة**"

إلى من تقسمت معها ضحكتي وفرحتي وعملي هذا: "**خطاب خديجة** "

إلى من كان سندي في مشواري الدراسي وقدوتي إلى مصدر النور والعلم :

"**أستاذي الفاضل الدكتور رشيد احيم** "

إلى من أعطوني من نبض حبهم حتى أرضاني إلى منبع الحنان والعطف: "**جدتي حفظها الله** "

إلى من تحلو بالإخاء وتميزوا بالعطاء وحب الوفاء صديقاتي: " **دلال، خولة، رجاء خنوفة، عقيلة، مروة، رجاء، ليلى، لمياء، أمال، صفاء**"

إلى من ضاقت بهم السطور من ذكرهم فوسعهم قلبي " **صديقات الدراسة** "

إلى كل من علمني حرفا أصبح برقه يضئ الطريق أمامي "**أساتذتي كل باسمه** "

حليمة بوطيب

شكر وعرفان

الحمد لله رب العالمين حمدا كثيرا طيبا مباركا فيه وصلى الله على الهادي البشير محمد عليه

الصلاة والسلام وعلى آله وصحبه أجمعين

نشكر الله عز وجل أولا على منه وكرمه وعلى جميع نعمه اللامتناهية, والذي أعاننا على إتمام هذا العمل المتواضع

أما بعد:

نتقدم بالشكر والعرفان إلى أستاذنا الفاضل الدكتور"**بسر الزوبير**" و المشرف على هذه المذكرة و الذي

لم يبخل علينا يوما بوقته الثمين و جهده و فكره و آرائه النيرة, و ملاحظاته و توجيهاته السديدة و نصائحه القيمة التي كان لها بعد الله أكبر الأثر في إتمام هذه الدراسة و إخراجها بهذه الصورة.

كما نشكر رئيس اللجنة " **فتحي لتيم** "

ونوجه شكرنا أيضا إلى كل أساتذة " **كلية العلوم الدقيقة** " على ما قدموه لنا من نصائح وتوجيهات.

كما نتقدم بالشكر الجزيل لأستاذنا الفاضل الدكتور "**احميم رشيد**" الذي أعاننا وبذل معنا مجهودا كبيرا

لإتمام هذه المذكرة

كما نتقدم بالشكر الجزيل إلى كل من ساهم في إعداد هذا العمل البسيط من قريب أو بعيد بتشجيعهم

و بالخصوص كل من عائلتينا حفظهم الله.

خديجة &حليمة

الإهــداء	I
شكــر وعرفان	III
الفهـرس	IV
فهـرس الأشكــال	VII
فهـرس الجــداول	IX
قائمة الرموز	X
قائمة المصطلحات العلمية	XI
قائمة الاختصارات	XII
المقدمة العامة	2

الفصل الأول: المتغيرات والأرقــام العشوائية

1.1 تمهيد	5
2.1 الأرقام العشوائية	5
3.1 طرق توليد الأرقام العشوائية	5
1.3.1 طريقة التطابق الخطي	5
2.3.1طرق الأوسط	6
4.1 دوال التوزيع الاحتمالية	6
5.1 المتغيرات العشوائية	9
1.5.1 دوال التوزيع للمتغيرات العشوائية	9
2.5.1 التوزيع الاحتمالي المنفصل	9
1.2.5.1 دوال التوزيع للمتغيرات العشوائية المنفصلة	9
2.2.5.1 المتوسط E(x)	10
3.2.5.1التباين والانحراف المعياري	10
3.5.1 التوزيع الاحتمالي المستمر	11
1.3.5.1 دوال التوزيع للمتغيرات العشوائية المستمرة	11
2.3.5.1 المتوسط	12

3.3.5.1 التباين والانحراف المعياري 12
4.3.5.1 التمثيل البياني 12
6.1 نظرية المعاينة 13
1.6.1 المجتمع والعينة 13
2.6.1 المعاينة 13
3.6.1 العينات العشوائية 13
4.6.1 معالم المجتمع 14
5.6.1 إحصاءات العينة 14
6.6.1 توزيعات المعاينة 14
7.6.1 متوسط العينة 14
8.6.1 تباين العينة 15
7.1 تعدد المتغيرات العشوائية 15

الفصل الثاني: الانتشار والمشي العشوائي

1.2 تمهـيد 20
2.2 الانتشار 20
1.2.2 نبذة تاريخية 20
2.2.2 قوانين فيك للانتشار 20
3.2.2 أنواع الانتشار 22
1.3.2.2 الانتشار الذاتي 22
2.3.2.2 الانتشار الكيميائي 22
3.3.2.2 الانتشار الثنائي الفعال 23
4.3.2.2الانتشار الحراري 24
5.3.2.2 انتشار حدود الحبوب 24
3.2 المشي العشوائي 25
1.3.2متوسط الإزاحة 25

2.3.2 المشي العشوائي في بعد واحد من خلال التوزيع ذي الحدين 29

3.3.2 المشي العشوائي في 2D و3D 31

4.2 علاقة الانتشار بالمشي العشوائي 32

الفصل الثالث: محاكاة الانتشار والمشي العشوائي

1.3 تمهـيد 36

2.3 مولدات الأرقام العشوائية 36

3.3 المشي العشوائي. 42

4.3 محاكاة الانتشارو المشي العشوائي 45

5.3 الانتشار والانتروبي وعلاقتها بالزمن . 52

الخلاصة العامة 60

قائمة المراجع 62

فهرس الأشكال

ترتيب الشكل	عنوان الشكل	الصفحة
	الفصل الأول	
(1.1)	التمثيل البياني لدالة توزيع التراكمية بين a و b	12
(2.1)	التمثيل البياني لدالة توزيع الاحتمال f(x)	13
	الفصل الثانـي	
(1.2)	رسم تخطيطي لمسيرة عشوائية في بعد واحد. بدأ المشاة عند $x = x_o = 0$	29
	الفصل الثالث	
(1.3)	رسم متناثرلأزواج من الأرقام العشوائية (y_i, y_{i+1}) تم الحصول عليها بإستخدام خوارزمية التطابق الخطي	38
(2.3)	توزيعات الأعداد العشوائية الناتجة عن طريقة التحويل	41
(3.3)	رسم تخطيطي يوضح استخدام طريقة الرفض. يتناسب احتمال الحصول على قيمة معينة لـ y_i مع $f_Y(y_i)$	41
(4.3)	-أ -: موضع الجسيم بدلالة رقم الخطوة أي الزمن لمسيرتين عشوائيتين في بعد واحد. -ب-: $\langle x^2 \rangle$ كدالة لرقم الخطوة لمجموعة من مسارات المشي العشوائي أحادية البعد بخطوة ثابتة الطول.	43
(5.3)	-أ-: x مقابل رقم الخطوة لثلاث مسيرات عشوائية في بعد واحد، الخطوات ذات أطوال عشوائية في المجال من [-1,1]. -ب-: متوسط x^2 بدلالة الزمن على عدد كبير من المسارات العشوائية أحادية البعد المختلفة بخطوات عشوائية الطوال.	44
(6.3)	-أ-: متوسط مربع الموضع بدلالة رقم الخطوة (أي الزمن) لمجموعة من المسارات العشوائية ثلاثية الأبعاد ($r^2 = x^2 + y^2 + z^2$). تم تقييد طول الخطوة بالوحدة وتم حساب متوسط نتائج 500 مشي. –ب-: مسار مشاء عشوائي واحد بدلالة الزمن.	45
(7.3)	منحنيي الحلول التخطيطية لمعادلة الانتشار في زمنين مختلفين.	47
(8.3)	الحلول العددية لمعادلة الانتشار في بعد واحد، عند اللحظات الزمنية $t = 0$ و $t = 10\,\Delta t$ و $t = 100\,\Delta t$. تم تثبيت الخطوة المكانية عند $\Delta x = 1$ و الزمنية عند $\Delta t = 0.5$ وهذا من اجل ثابت انتشار $D = 1$	48

(9.3)	تصوير للكثافة في بعد واحد بدلالة الموضع عند جميع اللحظات الزمنية.	48
(10.3)	التطور الزمني لحلول معادلة الانتشار في بعدين. عند اللحظات الزمنية $t = 0$ و $t = 6\Delta t$ و $\Delta t = 20$. تم تثبيت الخطوات المكانية عند $\Delta x = \Delta y = 1$ و الزمنية عند $\Delta t = 0.25$ وهذا من اجل ثابت انتشار $D = 1$.	50
(11.3)	تطور العرض الوسطي للانتشار بدلالة الزمن محسوب من حلول معادلة الانتشار في بعدين عند منتصف الارتفاع. يمثل البيان المستمر بلون احمر المنحني المحاذي وفقا للمعادلة الظاهرة في الشكل.	51
(12.3)	أ- التوزيعات العشوائية في بعد واحد لعدد عدد كبير من المشاة بوضع ابتدائي معدوم: أ- 10 خطوات زوجية. ب- ب10 خطوات فردية. ج- 100 خطوة. د- 100 خطوة بطول عشوائي لكل خطوة.	52
(13.3)	محاكاة المشي العشوائي لانتشار الكريمة في القهوة:(على اليسار) توزيع الكريمة الابتدائية (t = 0) في فنجان مربع طول ضلعه 200 .(على اليمين) فنجان مربع نصف قطره 100. عدد الجزيئات في كلتا الحالتين 400	53
(14.3)	انتشار الكريمة في القهوة. استمرار محاكاة السير العشوائي.(اليمين): بعد 10^2 خطوة زمنية (اليسار) : بعد 10^3 خطوة زمنية (الاسفل) 10^4 خطوة زمنية	54
(15.3)	تقسيم تخطيطي لفنجان القهوة إلى خلايا شبكية بأشكال مختلفة	55
(16.3)	طريقة ومراحل حساب الانتروبي في حالة فنجان قهوة مربع الشكل. -أ- توزيع للجزيئات عند لحظة معينة. -ب- احصاء عدد الجزيئات عند كل خلية شبكية. - ج-عرض ثلاثي الابعاد لعدد الجزيئات عند كل خلية شبكية.- د- حساب الاحتمالات P_i عند كل خلية $1000 \times$. -و- حساب المساهمة S_i لكل خلية في الانتروبي.	56
(17.3)	الانتروبي بدلالة الزمن لامتزاج الكريمة في القهوة مقدرة بعدد مشاة كبير وعدد خطوات عالي يضاهي 20000 وهذا مع شبكة مربعة بأبعادها $8 \times 8 = 64$ خلية.	57

ترتيب الجدول	عنوان الجدول	الصفحة
	الفصل الأول	
(1.1)	خصائص مهمة لدوال التوزيع الاحتمالية	7

قائمة الرموز

C	متغير ثابت
N_i	رقم عشوائي
N_{i+1}	رقم عشوائي الذي يلي N_i
N_0	قيمة البذرة او البداية
M	اسم الفترة
D	عدد ثابت صحيح
K	عدد صحيح موجب
P(x)	احتمال العثور على الرقم x
μ	المتوسط
σ	الانحراف المعياري
Var	التباين
$P(x_i)$	الاحتمال التراكمي
f(x)	دالة توزيع الاحتمال
α	رقم العينة
Y	احتمال حدث معين
‹cov›	التباين لمتعدد المتغيرات
ρ (x)	دالة الارتباط للمتغير x
C_{ij}	العناصر القطرية للمصفوفة
J_i	التدفق الانتشاري
D_i	معامل الانتشار
C_i	تركيز للمركبة iعلى المحور
∇^2	مؤثر لابلاس
L_i	معامل الظواهر للانتشار
D_i^E	معامل الانتشار الثنائي الفعال
ρ	كثافة السائل
w_1	الجزء الكتلي للمكون 1 في السائل
S_T	معامل سوريت

D_{gb}	انتشار حدود الحبوب
f_{gb}	الكسر الحجمي لحدود الحبوب في البلورات المتعددة
x_n	مجموعة الخطوات (المساهمات) التي تتخذها الجسيمات الكلية في مسارها باعتبار كل خطوة
$B_N(m)$	دالة توزيع ذي الحدين
O_{jk}	الزاوية المحصورة بين الخطوتين
$\overrightarrow{S_N}$	الازاحة الكلية
l	متوسط المسار الحر
N	عدد الخطوات
$\bar{v}$	متوسط السرعة الجزيئية
τ	وقت الاصطدام

Monte Carlo	مونت كارلو
Linear Congruence	التطابق الخطي
Cumulative Probability	الاحتمال التراكمي
Variance	التباين
Average	المتوسط
Standard Deviation	الانحراف المعياري
Random Walk	المشي العشوائي
Adolf F'ick	أدولف فيك
Chemical Phase	الطور الكيميائي
Focus Latency Gradient	تدرج كمون التركيز
Molten Silicates	السيليكات المنصهرة
Crystals	كريستالات
Self diffusion	الانتشار الذاتي
Chemical diffusion	الانتشار الكيميائي
Effective binary diffusion	الانتشار الثنائي الفعال
Thermal diffusion	الانتشار الحراري
Grain boundary diffusion	انتشار حدود الحبوب
Diffusion Coefficient	معامل الانتشار
Pearson	بيرسون
Average Displacement	متوسط الإزاحة
Black Jac Game	لعبة بلاك جاك
Binomial Distribution	التوزيع ذي الحدين
Central Limit Méthod	طريقة الحد المركزي
Poissons	بواسون
Maxwell	ماكسويل
Smolochovsky	سمولوتشوفسكي

قائمة الاختصارات

PDF	دوال التوزيع الاحتمالية
RNG	توليد الأرقام العشوائية
MSD	متوسط الإزاحة التربيعية
RMS	متوسط الجذر التربيعي

المقدمة العامة

الفيزياء الحاسوبية هي إحدى فروع العلوم الحاسوبية، حيث ندمج فيها بين عناصر الفيزياء (خاصة الفيزياء النظرية) وعناصر الرياضيات (خصوصا الرياضيات التطبيقية) بالإضافة الى عناصر من علم الحاسوب (البرمجة) لغرض حل مسألة فيزيائية.

هناك طريقتان تقليديتان في الفيزياء هما: الطريقة التجريبية والطريقة النظرية، وفي هذا الوقت قد تعتبر الطريقة الحاسوبية كطريقة ثالثة. يمكن القول أن الطريقة الحاسوبية مستقلة على الطريقتين السابقتين وليست مجرد جسر بينهما. حيث كان أهم ما تم استخدامه في الفيزياء الحاسوبية هو المحاكاة[1] .

فالمحاكاة هي تجربة افتراضية متممة للتجارب التقليدية في الواقع[2] ، مجهزة للإستعمال من أجل المسائل غير الخطية التي لا يمكن حلها بالطرق التحليلية. إن نقطة البداية في المحاكاة هي دراسة نموذج مثالي لمسألة فيزيائية لتحقيق ما إذا كان سلوك هذا النموذج متوافق مع الملاحظة ام لا [1].

إن المحاكاة العددية في الفيزياء تلعب دورا كبيرا في تحقيق نتائج جيدة للمسائل الصعبة التي لا يمكن حلها إلا بطرق التقريب، ولها الهدف الرئيسي هو حل تلك المسائل بعدة طرق احتمالية[3]. حيث تم استخدامها من طرف العديد من الفيزيائيين والتي أصبحت تطبق بشكل عام في المسائل العشوائية ومن بينها المشي العشوائي [2].

كان أول من اقترح مصطلح "المشي العشوائي" العالم كارل بيرسون عام 1905م. في رسالته الى مجلة الطبيعة، قدم نموذجا بسيطا لوصف انتشار البعوض في الغابة. حيث انه في كل خطوة زمنية، تتحرك بعوضة واحدة بمسافة ثابتة a، وبزاوية يتم اختيارها عشوائيا. حيث أراد معرفة توزيع البعوض بعد اتخاذ العديد من الخطوات. تم الرد عليه من قبل اللورد رايلي، الذي كان قد قام بحل مسألة أكثر عمومية لهذه المسألة في عام 1880م، في سياق الموجات الصوتية في المواد غير المتجانسة. الذي اعتبر أن نمذجة الموجة الصوتية التي تنتقل عبر المادة على أنها جمع لسلسلة من الاشعة الموجية العشوائية ذات السعة الثابتة وطور عشوائي. تتميز هذه الأمواج الصوتية في المادة أن لديها تقريبا أطوال موجية ثابتة، لكن اتجاهاتها تتغير في مواقع التشتت داخل المادة[4] .

هذه المسائل تكون في أنظمة عشوائية غير حتمية يظهر ذلك من خلال حل معادلات الحركة التي تصف فيزياء النظام في جميع الأوقات[1] .

نأخذ الانتشار كمثال نموذجي للحالة العشوائية، الذي يتمثل في مجموعة من العمليات مثل إنتشار قطرة من لكريمة في كوب من القهوة فنلاحظ انتشار الكريمة ببطء حتى يصبح لون القهوة بنيا موحدا. بينما على المستوى الجزيئي (المجهري) يتصادم كل من جزيء الكريمة مع القهوة ومن الواضح أنه سيغير اتجاهه بشكل متكرر بحيث تظهر حركته بشكل عشوائي. يمكن وصف هذا المسار بمسيرة عشوائية يتحرك فيه كل جزيء من لكريمة خطوة بخطوة احتمالية متساوية الطول.

إن مسار جزيء الكريمة ليس عشوائيا حقا لأنه يمكن حسابه عن طريق كتابة معادلات الحركة لجميع جزيئات (الكريمة والقهوة)، إلا أنه لن يكون ممكنا من الناحية العملية بسبب العدد الكبير للجزيئات والتصادمات في النظام، الأمر الذي يجعل السير العشوائي تقريبا فعليا[5].

لذا كانت غايتنا من تقديم هذه المذكرة هو إعطاء وصف كامل ومفصل عن الأرقام العشوائية وكيفية توليدها ومحاكاة الإنتشار في المسائل العشوائية من خلال المشي العشوائي (إنتشار الجسيمات الكريمة في القهوة).

وقد نظمت هذه الدراسة في ثلاثة فصول يمكن سردها كالتالي:

- الفصل الأول خصص لدراسة الأرقام العشوائية وطرق توليدها مع التطرق لدوال التوزيع الاحتمالية وكذا المتغيرات العشوائية.
- الفصل الثاني نهتم فيه بدراسة الانتشار من خلال تطبيق قانوني فيك وأنواعه، وكذلك المشي العشوائي في أبعاد مختلفة.
- الفصل ثالث والأخير سيتم فيه التطرق الى توليد أرقام العشوائية عن طريق بناء برنامج بلغة الفورتران، ودراسة إنتشار جزيئات لكريمة في القهوة، بالإضافة الى فهم مدى صلاحية التقريب الاحصائي في عرض معلومات أولية عن الأنظمة المدروسة كأنتروبي الكثافة والزمن اللازم للانتشار بنفس اللغة.

الفصل الأول:

المتغيرات والأرقام العشوائية

1.1 تمهيد:

تستخدم الأرقام العشوائية في مجموعة متنوعة من الأغراض والأهداف مثل إنشاء البيانات، ونمذجة ومحاكاة الظواهر المعقدة وقد استخدمت من ناحية أخرى في الموسيقى والألعاب(القمار) . فالرقم العشوائي هو الرقم الذي نتحصل عليه من مجموعة من القيم الممكنة ولتوليد هذه الأرقام نستخدم مولد الأرقام العشوائية لإنشاء سلسلة من الأرقام العشوائية.

2.1 الأرقام العشوائية:

إن أهمية الأرقام العشوائية الناتجة من الارتباط الوثيق بينها وبين النتائج التي يمكن الحصول عليها في حل بعض المسائل الفيزيائية بطرق عديدة , فمثلا طريقة مونت-كارلو من أهم الطرق العددية لمعالجة تلك المسائل وهي تعتمد بصورة أساسية على الأرقام العشوائية وهذه الأرقام التي تم إنشاؤها بواسطة الخوارزميات القياسية هي في الواقع أرقام شبه عشوائية ، ويجب أن تلتزم بالمعايير التالية:

1- التوزيع منتظم في المجال [0،1].
2- الارتباط بين الأرقام العشوائية ضعيف.
3- دور سلسلة الأرقام العشوائية يجب ان يكون كبيرا بقدر الإمكان.
4- أن تكون الخوارزمية المستعملة سريعة.

إن الارتباط الضعيف بين الأرقام العشوائية يؤدي في الحقيقة إلى أن كل حدث يجب أن يكون مستقلا عن الأحداث الأخرى[6].

3.1 طرق توليد الأرقام العشوائية:

إن دالة توزيع الاحتمال الأساسية لتوليد الأرقام العشوائية هو التوزيع المنتظم، يعني أن إحتمال العثور على رقم x في المجال [0،1] هو p (x) =cte. ويجب أن ينتج مولد الأرقام العشوائية أرقاما يتم توزيعها بشكل منتظم في هذا المجال، بصفة عامة هناك طريقتان لتوليد سلسلة الأرقام العشوائية:

1.3.1 طريقة التطابق الخطي:

تعود بدايتها إلى عام 1951 فقد وضع أسسها الباحث D.H.Lehmer، يمكن توليد مجموعة من الأرقام العشوائية في المجال [0,1]، نستخدم التحويل التالي:

$$\mathbf{N_{i+1} = (aN_i + c)MOD(M)} \qquad \mathbf{(1.1)}$$

حيث: $x_i = \frac{N_i}{M}$

M يجب أن يكون كبيرا قدر الإمكان، N_0 هي قيمة البداية أو البذرة. الدالة MOD تعني الباقي.

لقد أوضح الباحثون كيفية إيجاد قيم a وc عند استخدام النظام الثنائي كالتالي:

$a=2^s+1$ قيم $s>2$ ، و c تحقق العلاقة $c \bmod 8=5$. يطلق عن طريقة التطابق الخطي أنها طريقة التطابق مضروب عندما $a\neq0$ و$c=0$، طريقة التطابق المختلط $a\neq0$ و$c\neq0$. ولتوليد الرقم العشوائي الجديد نستخدم طريقة التربيعي

$$N_i = (dN_{i-1}^2 + cN_{I-1} + a)Mod(m) \qquad (2.1) \quad ; i = 1, 2, \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots$$

ويتم إختيار الثابت الصحيح d وفق قواعد اختيار الثابت c

2.3.1 طريقة الأوسط:

من بين الطرق لتوليد الأرقام العشوائية سوف نعرض أهم طرقها :

أ- **طريقة التربيع الأوسط:**

تعود فكرة هذه الطريقة إلى الباحثين المعروفين Neumann وMetropolis في عام 1946م كالتالي:

- اختيار البذرة x_0 التي هي عبارة عن عدد صحيح مؤلف من n مرتبة عشرية.
- حساب مربع هذا العدد.
- قسمة 25% من طرفي العدد الناتج.
- يكون المقدار الأوسط هو العدد العشوائي الجديد x_1.

ويمكن تكرار هذه العملية للحصول على سلسلة من الأرقام العشوائية ومن خواصها أنها بطيئة التوليد وذات دور قصير.

ب- **طريقة المضروب الأوسط:**

إن هذه الطريقة مشابهة لطريقة التربيع الأوسط لكن هناك اختلاف واحد أن العدد المولد الجديد نحصل عليه كما يلي:

$$X_i = kX_{i-1} \qquad (3.1) \quad ; i = 1, 2, 3, \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots$$

حيث:

k عدد صحيح موجب.

ومن خواصها أنها تتوزع بانتظام أكثر من سابقة وذات دور أطول [7].

4.1 دوال التوزيع الإحتمالية:

تم استخدام إلى حد ألان دوال توزيع الاحتمالات لحساب قيم المتوسط الان سندرس بعض الخصائص العامة لدوال التوزيع الاحتمالية التي قد نواجهها في مسائل فيزيائية. نستمد من نظرية الحد المركزي ونناقش خصائصها في دوال توزيع الاحتمال المختلفة. يتضمن الجدول أدناه مميزات دوال التوزيع الاحتمالي. حيث p (x) الاحتمال لحدث معين، بينما P (x) هي الاحتمال التراكمي و بإستخدام دوال PDF يمكننا حساب قيم المتوسطات للكميات المحددة كما يلي[8]:

$$\langle x^k \rangle = \sum_{i=1}^{N} x_i^k p(x_i) \qquad (4.1)$$

إذا كانت دوال توزيع الاحتمال متصلة نجد:

$$\langle x^k \rangle = \int_a^b x^k p(x) dx \qquad (5.1)$$

ومنه القيمة المتوسطة لـــf(x):

$$\langle f \rangle = \int_a^b f(x) p(x) dx \qquad (6.1)$$

لحساب هذا التكاملات نطبق طريقة مونت كارلو.

الجدول (1.1): خصائص مهمة لدوال التوزيع الاحتمالية

	دوال التوزيع الإحتمال المنفصلة	دوال توزيع الاحتمال المستمرة
المجال	$\{x_1, x_2, x_3, \ldots\ldots\ldots x_N\}$	$[a, b]$
الاحتمال	$p(x_i)$	$P(x)dx$
الاحتمال التراكمي	$P_i = \sum_{l=1}^{i} p(x_l)$	$P(x) = \int_a^x p(t)dt$
الايجابية	$0 \leq p(x_i) \leq 1$	$p(x) \geq 0$
الايجابية	$0 \leq P_i \leq 1$	$0 \leq P(x) \leq 1$
رتيبة	$P_i \geq P_j \; if \; x_i \geq x_j$	$P(x_i) \geq P(x_j) \; if \; x_i \geq x_j$
تنظيم	$P_N = 1$	$P(b) = 1$

هناك عدة أنواع لدوال توزيع الاحتمالية من أهمها:

a) **التوزيع المنتظم:** $p(x) = \frac{1}{b-a}\theta(x-a)\theta(b-x)$ نجد الإحتمالات مختلفة عن الصفر في المجال $[a, b]$

b) **التوزيع الأسي:** $p(x) = \alpha e^{-\alpha x}$ نجد احتمالات مختلفة عن الصفر في المجال $[0, \infty]$ والقيمة المتوسطة تكتب:

$$\mu = \langle x \rangle = \int_0^{\infty} \mathrm{xp(x)dx} = \int_0^{\infty} \mathrm{x}\alpha e^{-\alpha x} dx = \frac{1}{\alpha} \qquad (7.1)$$

والتباين:

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} x^2 p(x) dx - \mu^2 = \frac{1}{\alpha^2} \qquad (8.1)$$

c) **التوزيع الطبيعي:**

$$p(x) = \frac{1}{b\sqrt{2\pi}} exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2b^2}\right) \qquad (9.1)$$

نجد الاحتمالات مختلفة عن الصفر في المجال $[-\infty, +\infty]$ والتكامل $\int_{-\infty}^{\infty} exp(-\mathrm{x}^2)\mathrm{dx}$ قيمته $\sqrt{\pi}$ وسنحتاجها لحساب القيمة المتوسطة :

$$\mu = \int_0^{\infty} \mathrm{xp(x)dx} = \frac{1}{b\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x\, exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2b^2}\right) dx \qquad (10.1)$$

وبتغيير مناسب للتغيرات نجد:

$$\mu = \frac{1}{b\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} b\sqrt{2}(a + b\sqrt{2}y) exp(-y^2) dy = a \qquad (11.1)$$

وكذلك التباين:

$$\sigma^2 = \frac{1}{b\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (x-\mu)^2 exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2b^2}\right) dx \qquad (12.1)$$

وبتعويض المتوسط وبتغيير متغير نجد التباين:

$$\sigma^2 = \frac{1}{b\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} b\sqrt{2}(b\sqrt{2}y)^2 exp(-y^2) dy = \frac{2b^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} y^2 exp(-y^2) dy$$
$$= b^2 \qquad (13.1)$$

5.1 المتغيرات العشوائية:

نفترض ان لكل نقطة في فضاء العينة نخصص عدد ما ، نحصل على دالة f(x)معرفة على فضاء العينة وتسمى هذه الدالة بالمتغير العشوائي .يرمز لها بالحروف الكبيرة مثل X اوY عندما يأخذ المتغير عددا محدودا يمكن حسابه من القيم ويسمى في هذه الحالة متغير عشوائي منفصل و عندما يأخذ عدد لانهائيا لا يمكن حسابه يعرف بالمتغير المتصل او الغير منفصل[9].

1.5.1 دوال التوزيع للمتغيرات العشوائية:

تعرف دالة التوزيع التراكمية للمتغير العشوائي X بـــ:

$$\mathbf{F(x) = P(X \leq x)} \qquad \mathbf{(14.1)}$$

حيث:

$-\infty \leq \mathbf{x} \leq +\infty$، أي ان دالة التوزيع تحدد احتمال ان المتغير يأخذ قيمة اقل او تساوي قيمة xومن خصائصها:

- تكون F(X) دالة غير تناقصية أي $F(x) \leq F(y)$ اذا كانت $x \leq y$.
- $\lim_{x\to-\infty} F(x) = 0$, $\lim_{x\to+\infty} F(x) = 1$
- F(x) تكون مستمرة من اليمين أي $\lim_{x\to0} F(x + h) = F(x)$ لكل قيمة من x[9].

2.5.1 التوزيع الاحتمالي المنفصل:

نعتبر X متغير عشوائي منفصل ونفترض أنه يأخذ القيم $x_1,x_2,\ldots\ldots x_n$ مرتبة. وتأخذ هذه القيم الاحتمالات التالية :

$$\mathbf{P(X = x_k) = f(x_k)} \qquad \mathbf{k=1,2,\ldots\ldots} \qquad \mathbf{(15.1)}$$

ومن الأفضل وضع دالة الاحتمال:

$$\mathbf{P(X = x) = f(x)} \qquad \mathbf{(16.1)}$$

لكل $x = x_k$ وتكون المعادلة السابقة تساوي الصفر لأي قيمة أخرى لـ x [9].

بصفة عامة فان: $\begin{cases} f(x) \geq 0 \\ \sum_x f(x) = 1 \end{cases}$

1.2.5.1 دوال التوزيع للمتغيرات العشوائية المنفصلة:

دالة التوزيع للمتغير العشوائي X يمكن الحصول عليها من دالة الاحتمال من اجل أي قيمة لـ x حيث: $-\infty \leq \mathbf{x} \leq +\infty$

$$F(x) = \begin{cases} 0 & -\infty < x < x_1 \\ f(x_1) & x_1 \leq x < x_2 \\ f(x_1) + f(x_2) & x_2 \leq x \leq x_3 \\ \vdots & \vdots \\ f(x_1) + f(x_n)x_n & \leq x \leq +\infty \end{cases}$$

ودالة الاحتمال للمتغير العشوائي المنفصل نتحصل عليها من دالة التوزيع التراكمي أي[9]:

$$P(x) = F(x)$$

2.2.5.1 المتوسط E(x):

يوجد مبدأ هام في الإحصاء والاحتمالات وهو المتوسط وبالنسبة لمتغيرات عشوائية منفصلة x ذات القيم $x_1,x_2,\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots x_n$.

فان توقعها هو:

$$E(x) = x_1P(X = x_1) + \cdots\ldots x_nP(X = x_n) = \sum_{j=1}^{n} x_jP(X = x_j) \qquad (17.1)$$

إذا كان $P(x = x_j) = f(x_j)$ فان:

$$E(x) = x_1f(x_1) + x_2f(x_2) + \cdots\ldots x_nf(x_n) = \sum_{j=1}^{n} x_jf(x_j) = \sum_x x\,f(x) \qquad (18.1)$$

حيث $\sum_x x\,f(x)$ يأخذ على كل قيم x اذا كانت الاحتمالات متساوية في كل لحالات فان:

$$E(x) = \frac{x_1 + x_2 + \ldots\ldots\ldots\ldots x_n}{n} \qquad (19.1)$$

وما يعرف بالوسط الحسابي لقيم $x_1,x_2,\ldots\ldots\ldots\ldots x_n$ [9].

3.2.5.1 التباين والانحراف المعياري:

المتوسط للمتغير العشوائي المنفصل نرمز له بـμ.وهناك كميات أخرى هامة في الاحتمال والإحصاء وهي التباين والانحراف المعياري، اذا كانت X متغيرا عشوائيا يأخذ القيم $x_1,x_2\ldots\ldots\ldots x_n$ بدالة الاحتمال f(x) .

فان تباينه هو:

$$var(x) = \sigma_x^2 = E[(x-\mu)^2] = \sum_{j=1}^{n}(x_j-\mu)^2 f(x_i) = \sum(x-\mu)^2 f(x) \qquad (20.1)$$

وفي حالة خاصة عندما تكون كل الاحتمالات متساوية نجد:

$$var(x) = \sigma_x^2 = \frac{(x_1-\mu)^2 + (x_2-\mu)^2 + \cdots\ldots\ldots\ldots(x_n-\mu)^2}{n} \qquad (21.1)$$

وهو التباين لمجموعة n تأخذ القيم $x_1,x_2\ldots\ldots\ldots\ldots x_n$ وبالتالي يمكن ايجاد الانحراف وهو جذر التربيعي للتباين $\sigma_x = \sqrt{var(x)}$ [9].

3.5.1 التوزيع الاحتمالي المستمر:

نقول على متغير العشوائي x أنه مستمر اذا كانت له دالة التوزيع كالتالي:

$$\mathbf{F(x) = P(X \leq x) = \int_{-\infty}^{x} f(\mu)d\mu} \qquad (22.1)$$

حيث f(x) لها الخصائص التالية:

1) f(x)≥ 0

2) $\mathbf{\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1}$

احتمال ان xمتغير عشوائي متصل يأخذ قيمة معينة قريبة من صفر ويقع بين قيمتين مختلفتين a وb أي[9]:

$$\mathbf{P(a < x < b) = \int_{a}^{b} f(x)dx} \qquad (23.1)$$

1.3.5.1 دوال التوزيع للمتغيرات العشوائية المستمرة:

دالة التوزيع للمتغير العشوائي تعطى ب: $\boldsymbol{F(x) = P(X \leq x)}$ حيث $\boldsymbol{-\infty \leq x \leq +\infty}$ وبالتالي

$$\mathbf{F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x)dx} \qquad (24.1)$$

ويوجد علاقة بين دالة التوزيع ودالة كثافة الاحتمال وهي ان المتغير x يأخذ القيم تكون في المدى x و $(x + \Delta x)$ و منه:

$$\mathbf{P(x < x < x + \Delta x) = \int_{x}^{x+\Delta x} f(\mu)d\mu} \qquad (25.1)$$

وإذا كانت Δx صغيرة جدا فاننا نتحصل على التقريب:

$$\mathbf{P(x < x < x + \Delta x) = f(x)\Delta x} \qquad (26.1)$$

وبمفاضلة F(x) نجد: $f(x) = \frac{dF(x)}{dx}$ وتكون f(x) دالة مستمرة أي ان تفاضل دالة التوزيع F(x) يعطي دالة كثافة الاحتمال [9].

2.3.5.1 المتوسط:

إذا كان x متغير عشوائي مستمر له كثافة الاحتمال f(x) اذن :

$$E[g(x)] = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)f(x)dx \qquad (27.1)$$

3.3.5.1 التباين والانحراف المعياري:

إذا كان x متغير عشوائي مستمر له دالة كثافة احتمال f(x) فان التباين:

$$Var(x) = E[(x-\mu)^2] = \int_{-\infty}^{+\infty} (x-\mu)^2 \, f(x)dx \qquad (28.1)$$

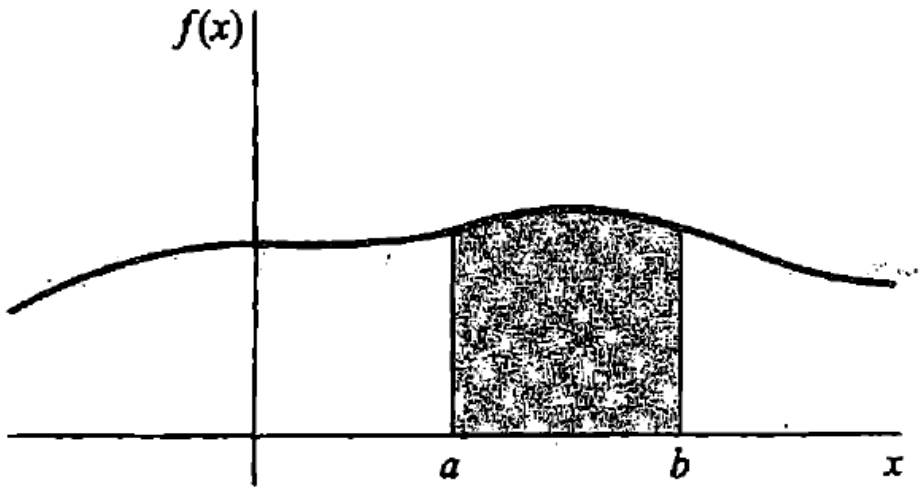
وانحرافه المعياري:

$$\sigma_x = \sqrt{Var(x)} \qquad (29.1)$$

4.3.5.1 التمثيل البياني:

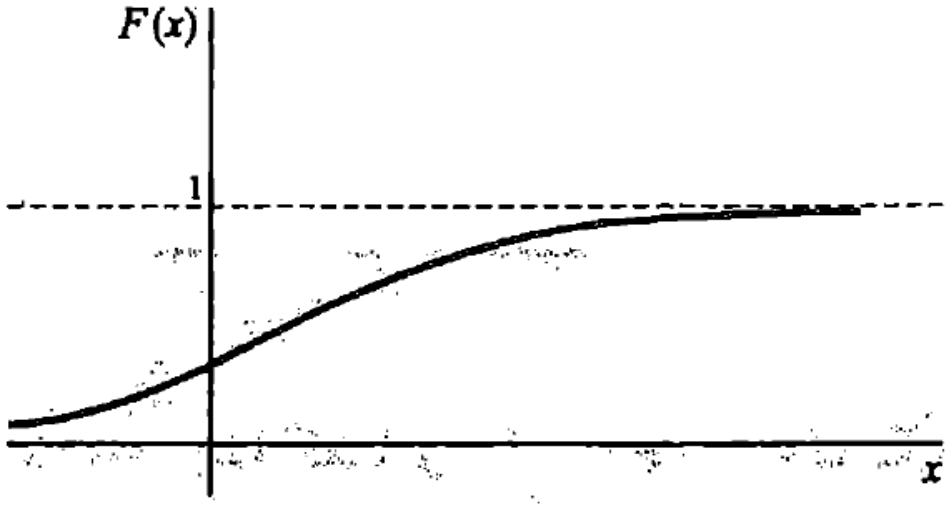
إذا كانت f(x) دالة كثافة الاحتمال للمتغير العشوائي x فانه يمكننا تمثيلها بيانيا بالمنحنى y=f(x)، حيث انه إذا كانت $f(x) \geq 0$ فان المنحنى لن يكون تحت المحور الأفقي .

والمساحة تكون مساوية للواحد معناه هندسيا ان احتمال ان x تقع بين a و b بمعنى $P(a < x < b)$ يمثل المساحة المظللة .



الشكل (1.1): التمثيل البياني لدالة التوزيع التراكمية بين a وb[9].

كما ان دالة $F(x) = P(X \leq x)$ دالة تزايدية تقع بين الصفر والواحد وتمثيلها :



الشكل (2.1): التمثيل البياني لدالة توزيع الاحتمال f(x)[9].

6.1 نظرية المعاينة:

1.6.1 المجتمع والعينة:

نهتم في الحياة العملية بتقرير النتائج على المجموعات الكبيرة من الافراد او الاشياء، وبدلا من ان نختبر كل المجموعة او ما تسمى بالمجتمع فإننا نقوم بفحص لجزء صغير من المجتمع وهذا الجزء يسمى بالعينة. ونقوم بذلك لهدف الاستدلال على عدد من الحقائق حول المجتمع بالاعتماد على نتائج العينة وهذه العملية تسمى بالاستدلال الاحصائي، كما ان عملية اختيار مفردات العينة تسمى بالمعاينة.حيث كلمة المجتمع ليس لها نفس المعنى في لغة الحياة اليومية بل يقصد بها المشاهدات او القياسات ويجب ان يكون المجتمع محدودا او غير محدود وذلك اعتمادا على حجم المجتمع نرمز له بالرمز N وحجم العينة للعدد n وهو محدود عامة.

2.6.1 المعاينة:

اذا سحبنا شيئا من صندوق فان لنا الاختيار في اعادة الشيء قبل سحب المرة الثانية او عدم اعادته الى الصندوق قبل السحب التالي، ففي الحالة الاولى يمكن لشيء معين ان يظهر مرة اخرى بينما الحالة الثانية فانه يمكن ان يظهر في الاختيار مرة واحدة، المعاينة من المجتمع هي ان نختار العضو اكثر من مرة وهذا ما يسمى بالمعاينة مع الاعادة، لكن المعاينة من المجتمع هي ان لا نختار العضو اكثر من مرة يسمى بالمعاينة بدون اعادة.

3.6.1 العينات العشوائية:

ان صلاحية النتائج الخاصة بالمجتمع تعتمد على صحة اختيار العينة وأحد مشاكل الاستدلال الإحصائي الهامة هي عملية اختيار العينة ومن بين الطرق لاختيار العينة من مجتمع محدود هي ان كل مفردة لها نفس فرصة الاختيار في العينة وهذا ما يعرف بالعينة العشوائية.

حيث ان الاستدلال الإحصائي من العينة على المجتمع لا يمكن أن يكون مؤكدا فيجب أن نستخدم لغة الاحتمالات في اي بيان نستنتجه.

4.6.1 معالم المجتمع:

يعتبر المجتمع معروفا إذا تم معرفة التوزيع الاحتمالي f(x) للمتغير العشوائي x حيث انه اذا كان x متغير عشوائي طبيعي فإننا نقول أن المجتمع موزع توزيعا طبيعيا ،وكذلك إذا كانت X موزعة طبقا لذي الحدين فان توزيع المجتمع يكون توزيعا ذي الحدين.

إذا كان موزعا طبيعيا فانه هناك قيم مؤكدة لابد ان نجدها في دالة التوزيع f(x) مثل الانحراف المعياري σ والمتوسط μ والمنوال نجدها بدلالة x وتعرف هذه القيم بمعالم المجتمع .

5.6.1 إحصاءات العينة:

يمكننا اختيار عينات عشوائية من المجتمع و نستخدمها للحصول على معالم المجتمع، بحيث يكون حجم العينة n والقيم هي $x_1,x_2,x_3,\ldots\ldots\ldots x_n$ للمتغيرات العشوائية $X_1,X_2,X_3,\ldots\ldots\ldots X_n$ في هذه الحالة تكون في المعاينة مع الإعادة والمتغيرات مستقلة وذات توزيعات متماثلة ولكل منها دالة الاحتمال ومنه :

$$P(X_1 = x_1, X_2 = x_2, \ldots\ldots X_n = x_n) = f(x_1)f(x_2)\ldots\ldots f(x_n) \qquad (30.1)$$

ومنه القيمة التي نتحصل عليها هي معلمة من معالم المجتمع تسمى إحصاء العينة, وبصفة عامة نجد ان لكل معلمة من معالم المجتمع يوجد إحصاء يحسب من العينة وللحصول على هذا الاحصاء نستخدم نفس الطريقة وسوف نستخدم الحروف الاغريقية للتعبير عن معالم المجتمع مثل μ وσ والحروف الرومانية m,s لإحصاءات العينة .

6.6.1 توزيعات المعاينة:

التوزيع الاحتمالي لإحصاء العينة يسمى بتوزيع المعاينة حيث يمكن اعتبار كل العينات الممكنة ذات الحجم n التي تسحب من المجتمع ولكل عينة نحسب الاحصاء وبهذه الطريقة نحصل على التوزيع للإحصاءوبمعرفة توزيع المعاينة يمكننا حساب المتوسط والتباين والانحراف المعياري .....،لكن احيانا الانحراف المعياري يسمى بالخطأ المعياري .

7.6.1 متوسط العينة:

نفترض $X_1,X_2,X_3,\ldots\ldots\ldots X_n$ متغيرات عشوائية مستقلة ذات توزيعات متشابهة للعينة العشوائية ذات الحجم n اذن متوسط العينة يكون متغيرا عشوائيا أي :

$$\bar{X} = \frac{X_1 + X_2 + X_3 + \dots\dots\dots + X_n}{n} \qquad (31.1)$$

وإذا كانت $x_1,x_2,x_3,\dots\dots x_n$ ترمز للعينة التي نحصل عليها من عينة حجمها n فان متوسط العينة :

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + x_3 + \dots\dots\dots + x_n}{n} \qquad (32.1)$$

8.6.1 تباين العينة:

إذا كانت $X_1,X_2,X_3,\dots\dots\dots\dots X_n$ متغيرات عشوائية لعينة حجمها nفان المتغير العشوائي الذي يعطي تباين هذه العينة هو :

$$S^2 = \frac{(X_1 - \bar{X})^2 + (X_2 - \bar{X})^2 + \dots\dots\dots\dots\dots\dots + (X_n - \bar{X})^2}{n} \qquad (33.1)$$

ومن النظرية (a) نجد ان $E(\bar{X}) = \mu$ ، واذا وجدنا $E(S^2) = \sigma^2$ معناه ان القيمة المتوقعة لهذا الإحصاء مساوية لمعلمة المجتمع ، وهذا ما يعرف بان الاحصاء يعتبر مقدار غير متحيز ويعطى المتوسط بـ :

$$E(S^2) = \mu^2 = \frac{n-1}{n}\sigma^2 \qquad (34.1)$$

حيث يكون قريبا من المعلمة σ^2 عند الاحجام العينات الكبيرة $n_1 \geq 30$ ومنه فان التقدير غير المتحيز يعرف بـ

$$\hat{S}^2 = \frac{n}{n-1}S^2 = \frac{(X_1-\bar{X})^2+(X_2-\bar{X})^2+\dots\dots\dots\dots\dots\dots+(X_n-\bar{X})^2}{n-1}: \qquad (35.1)$$

اذن :

$$E(S^2) = \sigma^2 \qquad (36.1)$$

لإيجاد تباين العينة اختار الاحصائيون $\hat{S}^2$ والقسمة على n-1 للحصول على نتائج اكثر بساطة[9] .

7.1 تعدد المتغيرات العشوائية:

باستخدام دوال التوزيع الاحتمالية المنفصلة فان القيمة المتوسطة لمتغير عشوائي Xفي المجال

x_1 ،$x_2,x_3,\dots N$ هو:

$$\langle x \rangle = \mu = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i p(x_i) \qquad (37.1)$$

والتباين هو:

$$\langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle = \frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{N}} \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\mathbf{N}} (\boldsymbol{x_i} - \langle \boldsymbol{x} \rangle)^2 \boldsymbol{p}(\boldsymbol{x_i}) = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{N}} \sum \langle (\mathbf{x_i} - \boldsymbol{\mu_i})^2 \rangle \qquad (\mathbf{38.1})$$

وبافتراض أن لدينا مجموعتين مستقلتين من المتغيرات X_1 و X_2 حيث المتوسط والتباين μ_1 و μ_2 و $\langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\mathbf{X_1}}$ و $\langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\mathbf{X_2}}$ على التوالي اي ان المتغير العشوائي الجديد هو:

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X_1} + \mathbf{X_2}$$

لدينا :

$$\boldsymbol{\mu_Y} = \boldsymbol{\mu_1} + \boldsymbol{\mu_2}$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\mathbf{Y}} = \langle (\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu_Y})^2 \rangle = \langle (\boldsymbol{X_1} - \boldsymbol{\mu_1})^2 \rangle + \langle (\boldsymbol{X_2} - \boldsymbol{\mu_2})^2 \rangle + \mathbf{2} \langle (\boldsymbol{X_1} - \boldsymbol{\mu_1})(\mathbf{X_2} - \boldsymbol{\mu_2}) \rangle \qquad (\mathbf{39.1})$$

ونحدد التباين لمتعدد المتغيرات الذي نرمز له بـ $\langle cov(X_1, X_2) \rangle$ الذي يعطى :

$$\langle \boldsymbol{cov}(\boldsymbol{X_1}, \boldsymbol{X_2}) \rangle = \langle (\boldsymbol{X_1} - \boldsymbol{\mu_1})(\mathbf{X_2} - \boldsymbol{\mu_2}) \rangle \qquad (\mathbf{40.1})$$

حيث μ_1 و μ_2 هما متوسطين لمتغيرين منفصلين. ومنه التباين لـY بدلالة التباين متعدد المتغيرات هو :

$$\langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\mathbf{Y}} = \sum_{\boldsymbol{j=1}}^{\mathbf{2}} \langle \left(\boldsymbol{X_j} - \boldsymbol{\mu_j} \right)^{\mathbf{2}} \rangle + \mathbf{2} \boldsymbol{cov}(\boldsymbol{X_1}, \boldsymbol{X_2}) \qquad (\mathbf{41.1})$$

الذي يصبح :

$$\langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\mathbf{Y}} = \langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\boldsymbol{X_1}} + \langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\mathbf{X_2}} + \mathbf{2} \boldsymbol{cov}(\boldsymbol{X_1}, \boldsymbol{X_2}) \qquad (\mathbf{42.1})$$

إذا كان X_1 و X_2 متغيرين مستقلين فإن التباين هو صفر ، ولكن لا نستطيع استنتاج من التباين متعدد المتغيرات الصفري ان المتغيرات مستقلة أم لا. إذا كانت متغيراتنا العشوائية التي ننتجها عبارة عن أرقام عشوائية حقا ، فيجب أن يكون التباين متعدد المتغيرات صفرا. هناك طريقة لقياس الارتباط بين مجموعتين من المتغيرات العشوائية هي ما تسمى بدالة الارتباط $\rho(X_1)$، $\rho(X_2)$ هي :

$$\boldsymbol{\rho}(\boldsymbol{X_1}, \boldsymbol{X_2}) = \frac{\langle \boldsymbol{cov}(\boldsymbol{X_1}, \boldsymbol{X_2}) \rangle}{\sqrt{\langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\boldsymbol{X_1}} \langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\mathbf{X_2}}}} \qquad (\mathbf{43.1})$$

إذا كان التباين هو صفر و المتغيرات مستقلة فإن الارتباط يساوي صفر. وتسمى هذه الكمية بمعامل الارتباط بين X_1وX_2. يمكننا توسيع هذا التحليل ليشمل مجموعة من المتغيرات العشوائية $Y = (x_1 + x_2 + \ldots\ldots + x_N)$ نفترض أنه لدينا عدد N قياسات مختلفة يمكننا التعرف على القيمة الكلية للمتوسط :

$$\langle \boldsymbol{\mu_Y} \rangle = \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{N}} \langle \boldsymbol{\mu_i} \rangle \qquad (\mathbf{44.1})$$

والتباين الكلي هو:

$$\langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\mathbf{Y}} = \langle (\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu_Y})^2 \rangle = \sum_{\boldsymbol{j=1}}^{\boldsymbol{N}} \langle \big(\boldsymbol{X_j} - \boldsymbol{\mu_j}\big)^2 \rangle$$

$$= \sum_{\boldsymbol{j=1}}^{\boldsymbol{N}} \langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle \boldsymbol{X_{\mathrm{j}}} + \mathbf{2} \sum_{\boldsymbol{j<k}}^{\boldsymbol{N}} \langle \big(\boldsymbol{X_j} - \boldsymbol{\mu_j}\big) \rangle \langle \big(\boldsymbol{X_j} - \boldsymbol{\mu_k}\big) \rangle \qquad (\mathbf{45.1})$$

أو:

$$\langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\mathbf{Y}} = \sum_{\boldsymbol{j=1}}^{\boldsymbol{N}} \langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle \boldsymbol{X_{\mathrm{j}}} + \mathbf{2} \sum_{\boldsymbol{j<k}}^{\boldsymbol{N}} \boldsymbol{cov}\big(\boldsymbol{X_j}, \boldsymbol{X_{\mathrm{k}}}\big) \qquad (\mathbf{46.1})$$

إذا كانت المتغيرات مستقلة، فإن التباين لمتعدد المتغيرات (cov) هو صفر ومنه يصبح التباين:

$$\langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\mathbf{Y}} = \sum_{\boldsymbol{j=1}}^{\boldsymbol{N}} \langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle \boldsymbol{X_{\mathrm{j}}} \qquad (\mathbf{47.1})$$

واذا افترضنا أن جميع مجموعات القياسات تنتج نفس التباين $\langle \sigma^2 \rangle$ فان :

$$\langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle_{\mathbf{Y}} = \boldsymbol{N} \langle \boldsymbol{\sigma^2} \rangle \qquad (\mathbf{48.1})$$

العملية العشوائية هي سلسلة متتالية من القيم $\mathrm{m}\{x_1, x_2, x_3, \cdots\cdots x_k \cdots\cdots\}$ سوف نسمي مجموعة هذه القيم المقاسة بالعينة المقاسة ونسمي إجراء قياس جميع قيم العينة بالتجربة العشوائية ،نفترض أن هذه القيم موزعة وفقا لبعض دوال توزيع الاحتمال P(x) ، حيث X هي رمز للمتغير العشوائي الذي يكون دالة توزيع الاحتمال الخاصة به هي $P_{\mathrm{X}}(\mathrm{x})$.

وللتسهيل لا نحسب التوزيع كاملا نحسب المتوسط والتباين فقط، حيث تكون العينة دائما ذات حجم محدود n ثم يتم تحديد متوسط العينة α:

$$\langle \boldsymbol{\mu_\alpha} \rangle = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{n}} \sum_{\boldsymbol{k=1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{x_{\alpha k,}} \qquad (\mathbf{49.1})$$

تباين العينة هو:

$$Var_{\alpha}(x) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(x_{\alpha,k} - \langle x_{\alpha}\rangle\right)^2 \qquad (50.1)$$

جذرها التربيعي هو الانحراف المعياري للعينة α.

ثم تتكرر هذه التجربة عدة مرات مثلا m مرة فان المتوسط الإجمالي :

$$\langle X_m\rangle = \frac{1}{m}\sum_{\alpha=1}^{m} x_{\alpha} = \frac{1}{mn}\sum_{\alpha,k}^{n} x_{\alpha k,} \qquad (51.1)$$

حيث تنتهي المجاميع الأخيرة عند m و n إذن فالتباين الكلي هو:

$$\sigma_m^2 = \frac{1}{mn^2}\sum_{\alpha=1}^{m}\left(\langle x_{\alpha,}\rangle - \langle X_m\rangle\right)^2 \qquad (52.1)$$

وهناك عدة طرق تقريبية غير مباشرة لإيجاد ما يحدث مع حجم العينة n منها نظرية الحد المركزية[6] .

الفصل الثاني:

الانتشار و المشي العشوائي

1.2 تمهيد:

تتعامل الفيزياء الكمية والإحصائية مع الأنظمة العشوائية التي تكون فيها حركة الأشياء عبارة عن مسيرة عشوائية منتشرة في جميع التطبيقات العلمية وهذا ما جعلها مثيرة للاهتمام في الجانب التطبيقي والنظري، ومع ذلك يمكن استخدامها لنمذجة العديد من الظواهر الطبيعية بما في ذلك الانتشار مثلا انتشار جزيئات الغبار في الهواء تتخذ مسارا عشوائيا بعيدا عن المكان الذي بدأت منه. وبالتالي سنعرض في هذا الفصل جزءا نظريا حول ظاهرة الانتشار، أنواعها والقانون الذي تعتمد عليه. بالإضافة الى المشي العشوائي الذي يكون في زمن واحد وحساب متوسط الازاحة وكيفية حركته في أبعاد مختلفة (1D,2D,3D)، مع ربط العلاقة بينهما.

2.2 الانـتـشـــــار:

1.2.2 نبذة تاريخية:

ظهر علم الانتشار في القرن التاسع عشر، على الرغم من أن الحدادين وحرفيي المعادن في العصور القديمة استخدموا بالفعل ظواهر الانتشار لصنع أشياء مثل السيوف الحديدية الصلبة والأواني البرونزية المذهبة. يعتمد الانتشار كنظام علمي على عدة نقاط أساسية أهمها:

نظرية الاستمرارية للانتشار التي نشأت من عمل الفيزيولوجي الألماني أدولف فيك، الذي استلهمه من التجارب حول الانتشار في الغازات، الملح في الماء التي أجراها الاسكتلندي توماس جراهام[10]. تم تفسير الحركة البراونية التي لاحظها عالم النبات الاسكتلندي روبرت براون لأول مرة، بعد عقود من قبل الفيزيائي الألماني اليهودي الشهير ألبرت أينشتاين وفي نفس الوقت تقريبا من قبل الفيزيائي البولندي ماريان فون سمولوتشوفسكي التي ربطت نظريتهم متوسط إزاحة الذرات بمعامل الانتشار، قدم الفكرة الأساسية الإحصائية للانتشار وسد الفجوة بين الميكانيك والديناميك الحرارية[11]. تم التحقق من العلاقة بين أينشتاين وسمولوتشوفسكي في تجارب كثيرة من قبل الفرنسي الحائز على جائزة نوبل جان بابتيست بيرين وزملاؤه في العمل[12]. تمت دراسة انتشار الحالة الصلبة لأول مرة بشكل منهجي، على سبيل مثال الذهب في الرصاص من قبل عالم المعادن البريطاني روبرتس أوستن في عام 1896.وخصوصا بالنسبة لأولئك الذين يتحكمون في الانتشار والعديد من الخصائص التي تنبع منه[13]. كان الفيزيائي الأمريكي والحائز على جائزة نوبل مرتين جون باردين هو أول من أشار إلى دور الارتباط في الانتشار بواسطة الخلل في المواد الصلبة، وهو جانب حسن بتفصيل كبير من قبل الفيزيائي الأمريكي جون مانينغ. بدأ عالم المواد الأمريكي ديفيد تورنبول الدراسات المنهجية الأولية لانتشار حدود الحبوب، وهي ظاهرة نقل ذات أهمية أساسية وتكنولوجية[14].

2.2.2 قوانين فيك للانتشار:

يمكن قياس انتشار المادة المنتشرة في الوسط من خلال تطبيق قوانين الانتشار التي تم تحديدها من خلال ملاحظة الظواهر الطبيعية وتجارب الانتشار المخبرية. أثناء الانتشار الحركات العشوائية للجسيمات في طور كيميائي غير متجانس ستعيد توزيع مكوناتها من المناطق ذات التركيز العالي إلى المناطق ذات التركيز المنخفض، التي تؤدي في النهاية إلى تجانس الطور. كمية المادة التي تتحرك عموديا خلال وحدة مساحة المقطع العرضي من خلال الانتشار أو الحركات العشوائية للجسيمات في الوسط تسمى التدفق الانتشاري.

وفقا لقانون فيك الأول للانتشار، يتناسب التدفق الانتشاري للمركب ذات الاهمية J_i مع تدرج تركيز المركب في النظام. من اجل الانتشار في بعد واحد، ويمكن كتابته كما يلي:

$$\mathbf{J_i} = -\boldsymbol{D_i}\frac{\boldsymbol{\partial c_i}}{\boldsymbol{\partial x}} \qquad (\mathbf{1.2})$$

حيث:

D_i : هي معامل الانتشار.

C_i : هو تركيز للمركبة iعلى المحور.

افترض أدولف فيك أول قانون لانتشار في عام 1855، بالاعتماد على التشابه بين انتشار المذاب في المذيب لقانون فوريه لنشر الحرارة بالتوصيل وقانون أوم لتدفق التيار الكهربائي في الموصل. كان يعتمد على ملاحظات الانتشار في محلول ثنائي (الملح والماء في حالة فيك). تم استخدام مصطلح الانتشار الداخلي أيضا لوصف الانتشار في السائل الثنائي أو الصلب و يسمى معامل الانتشار الذي تم الحصول عليه من خلال تجربة الانتشار الثنائي بمعامل الانتشار الداخلي . تم استخدام قانون فيك الأول لتحديد معامل الانتشار ودراسة انتشار الحالة المستقرة على طول تدرج التركيز. قانون فيك الثاني للانتشار هو بيان حفظ الكتلة ، من خلال الانتقال الانتشاري للكتلة في بعد واحد ويمكن كتابة معادلة الانتشار:

$$\frac{\boldsymbol{\partial c_i}}{\mathbf{\partial t}} = \frac{\boldsymbol{\partial}}{\mathbf{\partial x}}\left(\boldsymbol{D_i}\frac{\boldsymbol{\partial c_i}}{\mathbf{\partial x}}\right) \qquad (\mathbf{2.2})$$

حيث t هو زمن الانتشار. عندما يكون تغير في الكثافة في النظام صغير، فإن التركيز في المعادلة (2.2) يمكن استبداله بالوزن أو الكسر المولي. تم استخدام هذا التطبيق بشكل دائم في دراسات الانتشار في ذوبان السيليكات والبلورات ، عندما يكون معامل الانتشار مستقلا عن التركيز أو المركبة المكانية ، تأخذ معادلة الانتشار الشكل التالي:

$$\frac{\boldsymbol{\partial c_i}}{\boldsymbol{\partial t}} = \boldsymbol{D_i}\frac{\boldsymbol{\partial^2 c_i}}{\boldsymbol{\partial x^2}} \qquad (\mathbf{3.2})$$

للانتشار في وسائط المتماثلة المناحي ثلاثية الأبعاد ، تأخذ معادلة الانتشار في الإحداثيات الديكارتية الشكل العام التالي :

$$\frac{\boldsymbol{\partial c_i}}{\boldsymbol{\partial t}} = \boldsymbol{D_i}\left(\frac{\boldsymbol{\partial^2 c_i}}{\boldsymbol{\partial x^2}} + \frac{\boldsymbol{\partial^2 c_i}}{\boldsymbol{\partial y^2}} + \frac{\boldsymbol{\partial^2 c_i}}{\boldsymbol{\partial z^2}}\right) = \boldsymbol{D_i}\boldsymbol{\nabla^2 c_i} \quad (\mathbf{4.2})$$

حيث ∇^2 هو مؤثر لابلاس بالنسبة للانتشار على سطح كروي اكسيسمتري، تأخذ معادلة الانتشار شكلا خاصا:

$$\frac{\boldsymbol{\partial c_i}}{\mathbf{\partial t}} = \boldsymbol{D_i}\left(\frac{\boldsymbol{\partial^2 c_i}}{\mathbf{\partial r^2}} + \frac{\mathbf{2}}{\mathbf{r}}\frac{\boldsymbol{\partial c_i}}{\mathbf{\partial r}}\right) \qquad (\mathbf{5.2})$$

حيث r هي المركبة القطرية. يمكن استخدام المعادلة (5.2) لنمذجة الانتشار حول الحبوب المعدنية والسوائل أو شوائب الذوبان. المعادلات (2.2)،(3.2)،(4.2) و(5.2) هي معادلات تفاضلية جزئية تعتمد حلولهم على الشروط الابتدائية والحدية.

بالنسبة لمعامل الانتشار المتغير، يمكن حل معادلة الانتشار عدديا باستخدام طريقة الفروق المنتهية (كرنك 1975). طورت قوانين فيك اساسا من اجل الانتشار في السوائل، تطبق هذه القوانين بشكل مباشر على الانتشار في الوسائط ازيتروبيك مثل المواد المنصهرة، الزجاج والمعادن في نظام بلوري ايزومتري . معامل الانتشار في اوساط ايزومترية مستقل عن الاتجاه ويمكن تعامل معه على أنه مقدار سلمي. بالنسبة للانتشار في اوساط انايزوتروبيك، مثل معادن ذات الأنظمة البلورية على خلاف الايزومترية، سيعتمد معامل الانتشار على اتجاه الانتشار في البلورات. قد تختلف الانتشارية المقاسة على طول مختلف الاتجاهات يمكن ان يكون مختلف بالاعتماد على تناظر البلورة مثلا انتشار الاكسجين. يمكن تبسيط نمذجة الانتشار في مثل هذه الأنظمة باستخدام انتشارين في الإحداثيات الأسطوانية:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_{\perp c}\left(\frac{\partial^2 c_i}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial c_i}{\partial r}\right) + D_{\parallel c}\frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} \qquad (6.2)$$

حيث $D_{\parallel C}$ و $D_{\perp c}$ عبارة عن انتشارات عمودية ومتوازية مع المحور c الكارتيزي.

3.2.2 أنواع الانتشار:

اعتمادا على الحالة الكيميائية للنظام وطبيعة المنتشرات والشروط الابتدائية والدورية والتبسيطات المتضمنة يمكن تحديد عدة أنواع من الانتشار: الانتشار الذاتي، الانتشار الكيميائي، الانتشار الثنائي الفعال، الانتشار الحراري وانتشار حدود الحبوب.

1.3.2.2 الانتشار الذاتي (انتشار التتبع):

يحدث عندما يكون النظام المدروس في حالة توازن كيميائي، اي انه لا يوجد تركيز أو تدرج في الكمون الكيميائي لأي عنصر في النظام. يتم تحديد الانتشارية الذاتية لعنصر او مركب من خلال وسم بعض الذرات في المادة المنتشرة باستخدام متتبعات النظائر، ومن هنا جاء اسم انتشار التتبع..

2.3.2.2 الانتشار الكيميائي (الانتشار متعدد المركبات):

يحدث عندما يكون النظام المدروس غير متوازن كيميائيا. أثناء الانتشار الكيميائي قد يؤثر تدرج التركيز لمركب واحد على التدفق الانتشاري لمركب آخر. عمم لارس أونسايغر قوانين فيك للانتشار في الموائع الثنائية لأنظمة متعددة المركبات من خلال النظر في معدل إنتاج الانتروبي الذي يمكن كتابته كمجموع لجداءات سلمية، بين التدفقات الانتشارية والقوى المشتقة للانتشارعند درجة حرارة وضغط ثابتين هي تدرج الكمون الكيميائي . بما ان الكمون الكيميائي لمركب ما في مادة متعددة المركبات هي دالة لدرجة الحرارة والضغط والتركيز، يمكن كتابة قانون فيك الأول للمائع الثنائي كمايلي :

$$J_i = -L_i\frac{\partial \mu_i}{\partial x} = -\left(L_i\frac{\partial \mu_i}{\partial ci}\right)\frac{\partial c_i}{\partial x}. \qquad (7.2)$$

حيث L_i هو معامل الظواهري للانتشار. الحد المتواجد بين قوسين يمثل معامل الانتشار، استنادا الى غونسايغر فان التدفق الانتشاري لمركب معين من سائل متعدد المركبات يمكن ان يعبر عليه كتركيب خطي لتدرج التركيز للمركبات المستقلة في النظام. التدفق الانتشاري في بعد واحد للمركب i في مائع ذو n مركب عند درجة حرارة وضغط ثابتين يعطى ب :

$$J_i = -\sum_{j=1}^{n-1} D_{ij} \frac{\partial c_j}{\partial x}. \qquad (8.2)$$

حيث:

D_{ij} هي عناصر مصفوفة الانتشار.

معادلتي الانتشار للمركبين المستقلين 1و2 هي :

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D_{11} \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + D_{12} \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2}. \qquad (9a.2)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_{21} \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + D_{22} \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2}. \qquad (9b.2)$$

معادلة الانتشار للمركب i هي:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^{n-1} D_{ij} \frac{\partial^2 c_j}{\partial x^2}. \qquad (10.2)$$

3.3.2.2 الانتشار الثنائي الفعال:

هو التعامل البسيط مع الانتشار الكيميائي في الموائع أو المواد الصلبة متعددة المركبات . هنا يتم التعامل مع النظام متعدد المركبات على أنه نظام شبه ثنائي ،حيث يأخذ المركب المدروس على أنه متغير مستقل وتأخذ باقي المركبات على انها متغير غير مستقل. يفترض أن التدفق الانتشاري للمركب المدروس i يخضع علاقة مشابهة لقانون فيك الأول للإنتشار للموائع الثنائية:

$$J_i = -D_i^E \frac{\partial c_i}{\partial x}. \qquad (11.2)$$

حيث D_i^Eهو معامل الانتشار الثنائي الفعال للمركب i. التدفق الانتشاري المعرف بواسطة المعادلة (11.2)، مكافئة للتدفق الانتشاري المعرف من خلال المعادلة (8.2) ،واذا كان معامل الانتشار الثنائي الفعال يعطى بـ:

$$D_i^E = \sum_{j=1}^{n-1} D_{ij} \frac{\partial c_j}{\partial c_i} \qquad (12.2)$$

4.3.2.2 الانتشار الحراري:

هي حالة عامة للانتشار الكيميائي حيث أن تدفق الحرارة يدفع تدفق المادة. غالبا ما يشار إلى ظاهرة النقل على أنها "تأثير سوريت" على اسم الكيميائي السويسري تشارلز سورت.

التدفق الانتشاري للمركب 1 في مائع ثنائي يكتب كمجموع جزأين أحدهما يتناسب مع تدرج التركيز والآخر يتناسب مع تدرج درجة الحرارة، أي:

$$J_1 = -\rho D_1 \left[\frac{\partial w_1}{\partial x} + S_T w_1 (1 - w_1) \frac{\partial T}{\partial x}\right]. \qquad (13.2)$$

حيث:

ρ هو كثافة المائع، w_1 هو الجزء الكتلي للمركب 1 في المائع ، D_1 هو معامل الإنتشار للمركب 1 و S_T هو معامل سوريت، يطلق على الجداء D_1S_T اسم معامل الإنتشار الحراري الذي يرمز له بالرمز D_t المعامل الانتشار الحراري او معامل سوريت يمكن ان يكون موجبا او سالبا ، استنادا الى استجابة المركب للتدرج الحراري المفروض. بينما يعمل تدرج التركيز على تجانس المائع، وجود التدرج في درجة الحرارة عبر المائع يمكن ان يفصل الكتلة.

هذا هو الفرق الرئيسي بين الانتشار الحراري والانتشار الكيميائي ويمكن إثباته من خلال ضبط التدفق الانتشاري على الحالة الثابتة. المعادلة (13.2) تختصر الى:

$$\frac{dw_1}{dT} = w_1(1 - w_1)S_T \qquad (14.2)$$

5.3.2.2 انتشار حدود الحبوب:

هي حالة عامة للانتشار في المواد الصلبة البلورية حيث تكون الحدود بين الحبيبات المتجاورة وقناة الإضطراب داخل البلورات تستخدم كمسارات السريعة أو الدوائر القصيرة لإنتشار المادة المنتشرة. هناك ثلاثة أنواع لانتشار حدود الحبوب في غياب عدم انتقال حدود الحبوب: A، B و C. النوعان A و C هي حالات نهاية الأطراف حيث يكون انتشار الحجم إما مهيمنا أو غير مهم ، في حين أن النوع B هو النظام وسيط وهو أيضا الحالة الأكثر تعقيدا لانتشار حدود الحبوب. يحدث انتشار النوع C عندما يكون زمن الانتشار قصير جدا للمساهمة في الانتشار الشبكي ، يهيمن انتشار النوع A هو عندما يكون زمن الانتشار طويل و حجم الانتشار (D_L) كبير ، بحيث يكون طول الانتشار في المادة الصلبة أكبر بكثير من متوسط حجم الحبوب (d) أي:

$$\sqrt{D_L t} \gg d. \qquad (15.2)$$

يمكن محاكاة التدفق الحجمي الانتشاري في المادة متعددة الكريستالات بواسطة قانون فيك الأول للانتشار في المعادلة (1.2) مع معامل الانتشار الفعال وهو متوسط مرجح الانتشارية للشبكة وانتشار حدود الحبوب.

$$D_{eff} = f_{gb} D_{gb} + (1 - f_{gb}) D_L. \qquad (16.2)$$

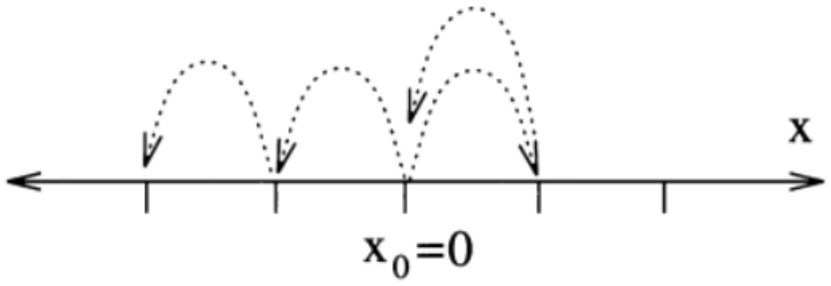
حيث D_{gb} هو انتشار حدود الحبوب؛ f_{gb} هو الكسر الحجمي لحدود الحبوب في البلورات المتعددة. يتناسب f_{gb} مع النسبة بين عرض حدود الحبوب ومتوسط حجم الحبوب[15].

3.2 المشي العشوائي:

1.3.2 متوسط الازاحة :

لدراسة حركة المشي العشوائي لجسيم. يبدأ الجسيم بالحركة من النقطة 0 (البداية) و عند حركته يقوم بخطوة قدرها d تكون في اتجاه الموجب أو السالب الى النقطة الموالية. بالتالي يمكنه بعد ذلك اجراء عدد من الخطوات المتشابهة على التوالي حيث انه يبتعد بمسافة عن نقطة البداية ونلاحظ ان اتجاه خطوة معينة مستقل تماما عن الخطوة التي قبلها [16]. تم توضيح هذه المسيرة العشوائية أحادية البعد بشكل تخطيطي في الشكل (1.2) يبدأ المشاة من الأصل $x_0 = 0$ ويتم اختيار الخطوة الأولى عشوائيا إما إلى اليمين أو اليسار ، ولكل منهما احتمال 1/2. كانت الخطوة الأولى إلى اليمين، وبالتالي كان الموقع بعد الخطوة الأولى هو $x_1 = +1$

ثم تم اختيار الخطوة التالية، إلى اليسارأي $X_2 = 0$. يمكن تكرار هذه العملية. يعتبر الموضع كدالة لرقم الخطوة سيتم الحصول عليها. حيث يكون الزمن بين الخطوات ثابت تقريبا، وبالتالي فإن رقم الخطوة متناسب تقريبا مع الزمن . لذلك غالبا ما نشير إلى وضع المشاة كدالة للزمن[5].



الشكل (1.2): رسم تخطيطي لمسيرة عشوائية في بعد واحد. بدأ المشاة عند $x = x_o = 0$ ، وتتم الإشارة إلى كل خطوة بشكل تخطيطي بواسطة سهم منقط. هنا حدثت الخطوة الأولى على اليمين والخطوات الثلاث التالية على اليسار[5].

السؤال الذي يطرح أين سيصل الجسم بعد n خطوة؟

لدينا : $$x_n = \sum_{i=1}^{n} h_i \qquad (17.2)$$

x_n : هو مجموعة الخطوات (المساهمات) التي تتخذها الجسيم في مساره.

$$h_i = \pm d$$

لتحديد موضع x_n نحتاج إلى معرفة تاريخ خطوات الجسيم، عادة ما يكون المسار جسيم واحد أقل أهمية، لانه يمثل مسار واحد من عدة مسارات ممكنة الناتجة عن محاكاة n مشاء عشوائي. استنادا الى هذا الأخير علينا إتباع الطريقة الإحصائية، إذا أردنا معرفة أي شيء مهم لمثل هذا النموذج.

إذا اعتبرنا مسارا واحدا لعدد n من الخطوات يقابل تجربة إحصائية واحدة، يمكننا اعتبار نتيجة عدد لانهائي من مثل هذه التجربة فنحصل على ما يلي:

$$< \boldsymbol{x_n} >=< \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{h_i} >$$

تم استخدام < ....> لوجود عدد لا نهائي من التجارب.

$$< \boldsymbol{x_n} >=< \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{h_i} >$$

$$= \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} < \boldsymbol{h_i} >$$
$$= \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{0}$$
$$= 0 \qquad (\boldsymbol{18.2})$$

عندما نقوم بالمشي عبر خطوات باحتمالات متساوية يكون متوسط الإزاحة يساوي صفرا. وهذا يوضح نتيجة مفيدة هو أن مجموع الخطوات غير مرتبطة بمتوسط المسارات(الازاحات) وهو امر ممكن لان خطوات مستقلة عن بعضها البعض. المتوسط الأكثر أهمية هو $< x^2 >$ وهو يعني متوسط الازاحة التربيعية. ويمكن حسابه كما يلي:

$$< \boldsymbol{x_n^2} >=< \left(\sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{h_i} \right)^{\boldsymbol{2}} >$$

$$= < \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{h_i} \sum_{\boldsymbol{j=1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{h_j} >$$

$$= < \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{h_i^2} > + < \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{h_i} \sum_{\boldsymbol{j \neq i}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{h_j} >$$

$$= \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} < \boldsymbol{h_i^2} > + < \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{h_i} \sum_{\boldsymbol{j \neq i}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{h_j} >$$

$$= \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} < \boldsymbol{h_i} > + \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} \sum_{\boldsymbol{j \neq i=1}}^{\boldsymbol{n}} < \boldsymbol{h_i h_j} >$$

$$= \boldsymbol{nd^2} \qquad (\boldsymbol{19.2})$$

للحصول على هذه النتيجة، الحد الثاني في المعادلة معدوم لان متوسط $< h_i h_j >$ مساو لصفر بسبب ان القيمة $h_i h_j$ تأخذ $\pm d^2$ باحتمال متساوي.

أي: $< \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{h_i h_j} > = \sum_{\boldsymbol{i=1}}^{\boldsymbol{n}} < \boldsymbol{h_i h_j} >$

وهذه النتيجة ذات أهمية للمحاكي الجزيئي وذلك للاعتبارين التاليين:

أولا: اذا اعتبرنا ان كل خطوة تحدث بعد فاصل زمني منتظم t وبالتالي فان nتتناسب طرديا مع tوهذا يعني ان MSD أيضا يتناسب خطيا مع t.

ثانيا: عند الحركة الانتشارية للذرات هي نتيجة للخطوات من موضع الى اخر يكشف النموذج عن متوسط العلاقة بين مسافة التنقل والفاصل الزمني بين الخطوات. ويمكن أن يأخذ هذا النموذج البسيط على نطاق أوسع.

يوضح هذا النموذج نظرة عامة لهذه الحركة ولأننا نعرف MSDكما هو في المعادلة (19.2) يمكننا اذن الحصول على التباين كمايلي :

$$\boldsymbol{\sigma_n^2 =< (x_n^2 - < x_n^2 >)^2 >}$$

معناه أن:

$$\boldsymbol{\sigma_n^2 =< (x_n^2)^2 > -2 < x_n^2 >< x_n^2 > +< x_n^2 >^2}$$

$$\boldsymbol{=< x_n^4 > -< x_n^2 >^2} \qquad \boldsymbol{(20.2)}$$

حيث:

$$\boldsymbol{< x_n{}^4 >=< \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} h_i h_j h_k h_l >} \qquad \boldsymbol{(21.2)}$$

و:

$$\boldsymbol{< x_n^2 >^2 = (nd^2)^2} \qquad \boldsymbol{(22.2)}$$

وتم تبسيط المعادلة (21.2) الى حد كبير لان $h_i h_j h_k h_l$ غير مرتبطة عندما تكون $i \neq j \neq k \neq l$ اذا فان:

a)i = j = k = l **c) (i = k) ≠ (j = l)**

b) (i= j) ≠ (k = l) **d) (i = l) ≠ (j = k)**

عندما تكون $i \neq j \neq k \neq l$ نحصل على :

$$\boldsymbol{\sum_{i,j,k,l,(i\neq j\neq k\neq l)} h_i h_j h_k h_l = 0} \qquad \boldsymbol{(23.2)}$$

ومن المعادلات (b)، (c) و (d) نتحصل على:

$$\boldsymbol{< \sum_{i=1}^{n} h_i^2 \sum_{j=1}^{n} h_j^2 >=< \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} h_i^2 h_j^2 >}$$

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} < h_i^2 h_j^2 > \; = \; (nd^2)^2 \qquad (24.2)$$

وعندما تكون (b)، (c) و (d) متكافئة نتحصل من العلاقة (a) على النتيجة التالية :

$$\sum_{i,j,k,l(i=j=k=l)=1}^{n} h_i^4 = nd^4 \qquad (25.2)$$

بالجمع نجد:

$$< x^4 >= (3n^2 + n)d^4$$

واذا كانت قيمة n كبيرة جدا فيمكن تقريب ذلك الى :

$$< x^4 > = 3n^2 d^4 \qquad (26.2)$$

ومن العلاقة (22.2) و (26.2) نتحصل على:

$$\sigma_n^2 = 2n^2 d^4 \qquad (27.2)$$

$$\sigma_n = \sqrt{2} nd^2 \qquad (28.2)$$ معناه ان :

هذه النتيجة مثيرة جدا للاهتمام، حيث توضح ان الخطأ في MSD يتناسب طردا مع MSD نفسه، وان هذه النتيجة كبيرة جدا ومع ذلك يتم تحسينها بسهولة عن طريق حساب MSD للعديد من الجسيمات في زمن واحد وإذا كانت الجسيمات مستقلة فان من السهل اظهار ان MSD لايزال كما هو ولكن يتم تقليل هذا الخطأ الى:

$$\sum_n = \sqrt{\frac{2}{N}} nd^2 \qquad (29.2)$$

حيث N هو عدد الجسيمات، ومع ذلك فان 100 جسيم ضرورية لتحسين الدقة بواسطة رتبة الطويلة

يمكن الحصول على هذه النتائج وبسهولة في ثلاثة أبعاد كالتالي:

$$< r_n^2 >= 3nd^2$$

$$\sigma_n = \sqrt{6} nd^2$$

$$\sum_n = \sqrt{\frac{6}{N}}\, nd^2$$

فهذه النتائج مهمة في حد ذاتها، إلا انها لا تعكس بشكل كامل في كيفية حساب MSD في عمليات المحاكاة. إذا فان كل نقطة على المسار تساهم مرة واحدة في حساب المتوسط الإجمالي[16].

2.3.2 المشي العشوائي في بعد واحد من خلال توزيع ذي الحدين:

في لعبة بلاك جاك تلعب مع صديقك، وأنتما لاعبان خبيران ومتقبلان بالتساوي ، أحيانا تفوز وأحيانا هو يفوز ، في كل مرة تراهن بدولار واحد هذه المسيرة عشوائية أحادية الأبعاد . لنحل مشكلة بلاك جاك سنجعلها اكثر اهتمام ، لنفترض ان لديك احتمالية a للفوز وان صديقك لديه احتمال b=1-a لكي يفوز ، وإذا لعبت N مرة فان فرصة فوزك ب M منها هي :

$$\mathbf{B_N(M) = a^m b^{N-m} \binom{N}{m}} \qquad \mathbf{(30.2)}$$

يعرف بالتوزيع ذي حدين.

حيث: $\binom{N}{m} = \frac{N!}{m!(N-m)!}$ **(31.2)**

يعرف باسم المعامل ذي حدين وهو عدد الطرق انتقاء m من الألعاب حتى تفوز بها من عدد الألعاب الإجمالي (N).

تظهر المعاملات ذات حدين في توسع قوى المبالغ وتسمى:

$$(a+b)^N = \sum_{m=0}^{N} a^m b^{N-m} \binom{N}{m} \qquad \mathbf{(32.2)}$$

التوزيع ذي حدين هو ببساطة الحد الرياضي في هذا المجموع. الحقيقة ان هذه العلاقة تجعل رؤية مجموع الاحتمالات هو $B_N = 1$

$$\sum_{m=0}^{N} B_N(m) = \sum_{m=0}^{N} a^m b^{N-m} \binom{N}{m} = (a+b)^N = 1 \qquad \mathbf{(33.2)}$$

كم تتوقع ان تربح بعد N من الألعاب؟ ويتم تحديد ذلك من خلال الألعاب التي تفوز بها، وهي القيمة المتوقعة لـ m :

$$< m >= \sum_{m=0}^{N} m\, B_N(m) = \sum_{m=0}^{N} m a^m b^{N-m} \binom{N}{m} \qquad \mathbf{(34.2)}$$

بالرغم من ان b=1- a يمكننا حساب المجموع اذا سمحنا بربط بين a و b ونلاحظ بعد ذلك ان هذا المجموع هو نفسه اذا تم اشتقاق المعادلة (4) وضربها في a.

$$\sum_{m=0}^{N} m a^m b^{N-m} \binom{N}{m} = a\partial a \left[\sum_{m=0}^{N} a^m b^{N-m} \binom{N}{m} \right] = a\partial a (a+b)^N$$

$$= Na(a+b)^{N-1} \qquad \mathbf{(35.2)}$$

وبعد أن أصبح بإمكاننا حساب مجموع أي من a وb يمكننا أن نأخذ الحالة المهمة حيث b=1- a ونتحصل على:

$$< m >= Na \qquad (36.2)$$

اذا فالانحراف المعياري هو:

$$\sigma = \sqrt{Nab} \qquad (37.2)$$

كلما $N \to \infty$ يقترب التوزيع ذو حدين من غوص بواسطة نظرية الحد المركزي،

وبهذا نتعرف على المتوسط والانحراف المعياري:

$$B_N(m) \to \frac{1}{\sqrt{2\pi Nab}} exp\left[-\frac{(m-Na)^2}{2Nab}\right]$$

ويمكننا استنتاج ذلك من خلال دراسة انخفاض $\ln B_N(m)$ عند N كبيرة، ولكن باستخدام نظرية الحد المركزي أسهل . اما بالنسبة للعبة بلاك جاك تتوقع ان تربح Na مرات وتفقد Nb مرات لذلك:

$$< winning >= N(a-b) \qquad (38.2)$$

والانحراف المعياري:

$$\sigma = 2\sqrt{Nab} \qquad (39.2)$$

عندما تكون هذه المباراة عادلة أي a = b = 1/2 وبالتالي المكاسب المتوقعة **<winning> = 0**

والانحراف المعياري: $\sigma = \sqrt{N}$

يزداد σ لان $\sqrt{N}$ هو بالضبط ما نتوقعه لمجموع القيم العشوائية بواسطة نظرية الحد المركزي، تسمى الحالة a = b = 1/2 أحيانا مسيرة عشوائية أحادية الابعاد غير متحيزة . بالنسبة لمسير عشوائي احادي الابعاد غير متحيز، يكون متوسط الازاحة هو0 في هذه الحالة، ويتم وصف المقياس النموذجي للإزاحة بشكل افضل بواسطة تذبذب RMS مما يقلل الانحراف عندما يكون المتوسط صفرا، أي ان تذبذبRMS، هو $x_{rms} = \sigma = \sqrt{N}$عادة تستخدم تقلبات RMS للكميات التي متوسطها صفر، ولكن لا توجد قاعدة صارمة وسريعة حول وقت استخدام متوسط الازاحة ومتى يتم استخدام تقلب RMS .

دعونا نقارن التوزيع ذي الحدين بتوزيع بواسون يتم تحديد التوزيع ذي الحدين $B_N(m)$ ل Nو m المنفصلين على عكس توزيع بواسون : $P_m(t) = \frac{(\lambda t)^m}{m!} e^{-\lambda t}$.

الذي له m منفصل برغم انه مستمر على t. بالنسبة لتوزيع ذي الحدين فان أصغر فترة زمنية هي خطوة واحدة منفصلة، مع احتمال حدوثها a. بالنسبة لبواسون يمكننا ان نأخذ خطوة زمنية صغيرة تقدر ب Δt ، مع احتمال $dp = \lambda \Delta t$ اذا حددنا الفاصل الزمني للتوزيع ذي الحدين مع توزيع بواسون عن طريق ضبط $a = \lambda \Delta t = \lambda \frac{t}{N}$ ثم أخذ الحد $N \to \infty$.

تعطي العلاقة:

$$\lim_{N\to\infty} B_N(m) = \lim_{N\to\infty} \binom{N}{m} \left(1 - \lambda \frac{\mathrm{t}}{\mathrm{N}}\right)^{N-m} \left(\lambda \frac{\mathrm{t}}{\mathrm{N}}\right)^{m} = \frac{(\lambda t)^m}{m!} e^{-\lambda t}$$

حيث توزيع بواسون يستند رسميا من توزيع ذي الحدين ونلاحظ أن هذا يتطلب أخذ $N \to \infty$

فان: $\lambda t = \mathrm{Na} = \mathrm{cte}$ وبمعنى أخر ، تشبه عملية بواسون بالسير العشوائي الذي يسير دائما في اتجاه واحد، لكن لانعرف متى سيتم اتخاذ الخطوة. على الرغم من أنها يمكن أن تكون مرتبطة، كما رأينا يجب أن نفكر حقا في توزيعات ذات الحدين وتوزيعات بواسون باعتبارها ذات صلة في سياقات مختلفة: يتم استخدام التوزيع ذات الحدين عندما تكون الخطوات منفصلة وغير متماسكة (اتجاهات عشوائية)، ويتم استخدام بواسون عندما يكون الوقت مستمر ولكن الخطوات متماسكة (تزداد الأعداد دائمًا). إذا كنا نقوم بنقل العملات المعدنية.

فإن $a = \frac{1}{2}$ يكون ثابتا، وبالتالي فإن توزيع بواسون ليس مناسبا لأنه يحتاج إلى $a = 0$ بالنسبة لعملية الاضمحلال يمكن أن يحدث الاضمحلال في أي وقت t وبالتالي فإن التوزيع ذي الحدين ليس ملائم. بعد فترة زمنية معينة، يمكن أن تحتوي عملية بواسون على عدد محدود من الأحداث. في عملية ذات الحدين، يكون الوقت هو عدد الخطوات N، لذلك يكون عدد الأحداث المحتملة مقيدا دائما.

3.3.2 المشي العشوائي في 2D و 3D:

بالنسبة للحالة ثنائية البعد، فإن الصورة الشائعة للمشي العشوائي هي صورة شخص سكير يتعثر. في كل خطوة زمنية تتحرك مسافة L في اتجاه عشوائي. في الصورة ثلاثية الأبعاد، يمكنك تخيل جزيء الصبغة ينتشر في الماء وفي كل خطوة يصطدم بشيء ما ثم يتجه نحو اتجاه مختلف. للتبسيط سنفترض في الحالتين ثنائية وثلاثية البعد أن المسافة متساوية في كل خطوة والزاوية عشوائية تماما. أين سيكون السكير أو الجزيء بعد N من الخطوات؟ لنفترض أنها في الخطوة j^{th} تتحرك بإزاحة $\vec{l}_j$. المتجهات $\vec{l}_j$ لها طول l. حاصل الضرب القياسي لمتجهين هو:

$$\vec{l}_j . \vec{l}_k = l^2 \cos\theta_{jk} . \qquad (40.2)$$

حيث θ_{jk} هي الزاوية المحصورة بين الخطوتين. نظرا لأننا نفترض أن الزاوية عشوائية، فإن القيمة المتوقعة لحاصل الضرب النقطي هي صفر:

$$\langle \vec{l}_j . \vec{l}_k \rangle = l^2 \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\theta \cos\theta . \qquad (41.2)$$

لنفترض أن $\vec{S}_N$ هي الإزاحة الكلية بعد عدد N من الخطوات الزمنية.

$$\vec{s}_N = \sum_{j=1}^{N} \vec{l}_j \qquad (42.2)$$

معناه:

$$\langle \vec{s}_N^2 \rangle = \langle (\vec{s}_{N-1} + \vec{l}_N)^2 \rangle = \langle \vec{s}_{N-1}^2 \rangle + 2\langle \vec{s}_{N-1}.\vec{l}_N \rangle + \langle \vec{l}_N \rangle \qquad (43.2)$$

الزاوية بين $\vec{l}_N$ و$\vec{s}_{N-1}$ كاملة، لذا $\langle \vec{s}_{N-1}.\vec{l}_N \rangle = 0$ و $\langle \vec{l}_N^2 \rangle = l^2$

لذانجد:

$$\langle \vec{s}_N^2 \rangle = \langle \vec{s}_{N-1}^2 \rangle + l^2$$

اذن :

$$\langle \vec{s}_N^2 \rangle = Nl^2 \qquad (44.2)$$

والمسافة المنقولة RMS هي $\sqrt{N}l$ هي نفسها في حالة بعد واحد [17].

4.2 علاقة الانتشار بالمشي العشوائي:

الانتشار ومعادلة الانتشار هما موضوعان محوريان في كل من الفيزياء والرياضيات، فمدى قابلية تطبيقهما يمتد من الديناميك النجوم الى الانتشار الجسيمات التي تحكمها معادلة شرود ينغر، تكتب معادلة الانتشار :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \mathcal{D}\vec{\nabla}^2 f \qquad (45.2)$$

معادلة شرود ينغر لجسيم حر ما هي الا معادلة الانتشار للمركب أي:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{t^2}{2m}\vec{\nabla}^2\varphi \Longrightarrow \frac{\partial \varphi}{\partial (it)} = \frac{\hbar}{2m}\vec{\nabla}^2\varphi \qquad (46.2)$$

بما أن $\mathcal{D} = \frac{\hbar}{2m}$ و$\tau = it$ فإن:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \mathcal{D}\vec{\nabla}^2\varphi \qquad (47.2)$$

ان التفسير الانتشاري لمعادلة شرودينغر يشكل نقطة الإطلاق لتقنية الانتشار لطريقة مونت كارلو في الفيزياء الكمية.

المشي العشوائي ناجح في محاكاة العديد من المسائل الفيزيائية لأنه مرتبط بحلول معادلة الانتشار. نبدأ من الاحتمال P(i,N) أين يكون المشي العشوائي عند الموضع s_i بعد N خطوة والذي يعطى

كما يلي :

$$\boldsymbol{P(i,N) = \frac{1}{2}P(i-1,N-1) + \frac{1}{2}(i+1,N+1)} \qquad \boldsymbol{(48.2)}$$

ليكن τ هو الزمن الفاصل بين الخطوات و a تباعد الشبكة (طول الشبكة) وعليه يمكن كتابة $x_i = ia$ و $t = N\tau$:

$$\boldsymbol{P(i,N) \longrightarrow P(x,t)}$$

$$\boldsymbol{P(x,t) = \frac{1}{2}P(x-a,t-\tau) + \frac{1}{2}(x+a,t-\tau)} \qquad \boldsymbol{(49.2)}$$

يطرح $P(x,t-\tau)$ من طرفي المساواة ثن بقسمتها على τ نجد:

$$\frac{1}{\tau}[P(x,t) - P(x,t-\tau)] = \frac{a^2}{2\tau}[P(x+a,t-\tau) - 2P(x,t-\tau) + P(x-a,t-\tau]\frac{1}{a^2} \quad (50.2)$$

عند أخذ النهايات $\tau \to 0, a \to 0$ فإن $\boldsymbol{\mathcal{D} = \frac{a^2}{2\tau}}$ يبقى ثابت ونحصل على مايلي :

$$\boldsymbol{\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \mathcal{D}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2}} \ , \boldsymbol{\mathcal{D} = \frac{a^2}{2\tau}} \qquad \boldsymbol{(51.2)}$$

هذه هي معادلة الانتشار.

الان بضرب الطرفين المعادلة الانتشار في الدالة $f(x)$ وبالمكاملة بالنسبة لـ x نجد:

$$\boldsymbol{\int f(x)\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}dx = \int \mathcal{D}f(x)\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2}dx}$$

$$\boldsymbol{\int f(x)\frac{\partial P(x,t)}{\partial t}dx = \int \frac{\partial}{\partial t}\big(f(x)P(x,t)\big)dx}$$

$$\boldsymbol{= \frac{d}{dt}\int f(x)P(x,t)dx}$$

$$\boldsymbol{= \frac{d}{dt} < f(x) >} \qquad \boldsymbol{(52.2)}$$

$$\boldsymbol{\frac{\partial}{\partial x}\left(f(x)\frac{\partial}{\partial x}P(x,t)\right) = \frac{\partial f(x)}{\partial x}\frac{\partial P(x,t)}{\partial x} + f(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t)}$$

$$\boldsymbol{\Longrightarrow f(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}\left(f(x)\frac{\partial}{\partial x}P(x,t)\right) - \frac{\partial f(x)}{\partial x}\frac{\partial P(x,t)}{\partial x}} \qquad \boldsymbol{(53.2)}$$

$$\int f(x)\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}dx = \left(f(x)\frac{\partial}{\partial x}P(x,t)\right)|_{-\infty}^{+\infty} - \int \frac{\partial f(x)}{\partial x}\frac{\partial P(x,t)}{\partial x}dx$$

$$\Longrightarrow \frac{d}{dx} < x >= -\mathcal{D}\int \frac{\partial f(x)}{\partial x}\frac{\partial P(x)}{\partial x}dx \qquad (54.2)$$

اذا كانت الدالة f(x)=x فإن:

$$\frac{d}{dx} < x >= -\mathcal{D}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial x}{\partial x}\frac{\partial P(x,t)}{\partial x}dx = -\mathcal{D}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial P(x,t)}{\partial x}dx = -\mathcal{D}P(x,t)|_{-\infty}^{+\infty} = 0$$

بما أن القيمة المتوسطة $< x >$ مساوية الثابت $< x >= c$ وبما أن x = 0 عند t = 0 فإن

$< x >= 0$.

اذا كانت الدالة $f(x) = x^2$ فإن:

$$\frac{d}{dt} < x^2 >= -\mathcal{D}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial^2 x}{\partial x}\frac{\partial P(x,t)}{\partial x}dx \qquad (55.2)$$

$$= -2\mathcal{D}\int_{-\infty}^{+\infty} x\frac{\partial P(x,t)}{\partial x}dx$$

$$= -2\mathcal{D}\left[\left(xP(x,t)\right)|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t)dx\right]$$

$$= 2\mathcal{D}$$

$$\frac{d}{dt} < x^2 >= 2\mathcal{D} \Longrightarrow < x^2 >= 2\mathcal{D}t + c \qquad (56.2)$$

بما أن c =0 فإن:

$$< x^2 >= 2\mathcal{D}t \qquad (57.2)$$

من هذه المعادلة الأخيرة يمكن ملاحظة سلوك الانتشار في مسائل المشي العشوائي وهي العلاقة الرابطة بينهم[1].

الفصل الثالث:

محاكاة الانتشار و المشي العشوائي

1.3تمهيد :

تضمنت الفصول الأولى مفاهيما أولية حول نظرية الاحتمالات والاحصاء بشكل عام. بشكل خاص تطرقنا الى مفهوم الأرقام العشوائية وطرق توليدها واستخداماتها في محاكاة الكثير من الظواهر مثل المشي العشوائي وانتشار الجسيمات. في هذا الفصل سنخوض في هذه المفاهيم بشكل عملي عن طريق كتابة برامج للحاسوب نسعى فيها لتوليد ارقام عشوائية جيدة بالمعنى العشوائي واستخدامها لمحاكاة ظاهرة الانتشار في حيز معين. بالخصوص سندرس انتشار جزيئات كريمة في كأس قهوة الصباح. الهدف هو فهم مدى صلاحية التقريب الاحصائي في استيفاء معلومات أولية عن الأنظمة المدروسة مثل الانتروبي والكثافة والزمن اللازم لانتشار جزيئات الكريمة في القهوة دون الحاجة لحل معادلات الحركة المعقدة لجميع جزيئات لكريمة والقهوة وهو أمر ممكن في الأساس لكن صعب المنال.

2.3 مولدات الاعداد العشوائية:

تتضمن جميع لغات الكمبيوتر على برامج ذاتية لتوليد سلاسل من الأرقام العشوائية المتكررة او الدورية بدور M . هذه الأرقام من الأفضل تسمتها بشبه العشوائية لأسباب سنطرقها لاحقا. عند كل استدعاء لهذه البرامج تولد هذه الاخيرة رقما او مجموعة ارقام عشوائية هي في الاصل عنصر او مجموعة عناصر متتالية من سلسلة ارقام عددها M . تتوفر لغة فورترون مثلا على دالة باسم rand و برنامج جزئي ذاتي random_number تمكن من توليد ارقام عشوائية توزيعها الاحتمالي منتظم في المجال [0,1]. تتوفر لغات البرمجة الأخرى مثل ماتلاب على دوال مشابهة. عمليا تولد هذه البرامج اولا اعدادا صحيحة m في المجال $[0, M-1]$ بتوزيع احتمالي يقارب بشكل كبير التوزيع المنتظم، ثم تنظم قيم هذه السلسلة في المجال $[0, 1]$ بالعلاقة $u = m/M$. كلما كانت قيمة M كبيرة، كان توزيع الأرقام المولدة u أقرب للتوزيع الحقيقي المنتظم $U_{[0,1]}$. سنرى في ما يلي كيفية عمل هذه الدوال وبرمجتها حتى لا تبدوا هذه البرامج لمستخدميها كأنها "علب سوداء سحرية" توفر أرقامًا عشوائية بطريقة غير معروفة ولا يمكن التحكم فيها. فيما يلي من الاقسام سنشرح استخدام مثل هذه البرامج في محاكاة الأنظمة العشوائية. توجد العديد من الخوارزميات المستخدمة لتوليد سلسلة من الأرقام شبه العشوائية. الخوارزمية الأكثر شيوعا تعتمد على معادلة الشكل التالي والتي تعرف بمعادلة التطابق الخطي:

$$u_{i+1} = (Au_i + C)\ mod\ (M) \qquad (1.3)$$

وهي تعني باقي القسمة الصحيحة لـ $(Au_i + C)$ على M حيث u_i هو الرقم العشوائي ذو الترتيب i في السلسلة و A و C و M هي ثوابت صحيحة مختارة بعناية. الدالة mod التي تحسب باقي القسمة الصحيحة متوفرة في جميع لغات البرمجة. تعمل هذه الخوارزمية بشكل التالي: يختار في البداية رقما عشوائيا ابتدائيا يسمى البذرة u_0. تختار البذرة عادة بطريقين: إما عن طريق القيمة الافتراضية المحفوظة داخل البرنامج لتجنيب المستخدم عناء إدخالها. في هذه الحالة ينتج البرنامج نفس السلسلة العشوائية عند كل استخدام جديد لنفس البرنامج وهو نهج قد يبدو غير مرغوب فيه ولا يمكن التعويل عليه في عملية المحاكاة بسبب ان نفس السلسلة تتكرر مع كل تجربة محاكاة. رغم ذلك هذا النهج المتكرر مفيد جدا في اكتشاف أخطاء برامج المحاكاة. بعد التأكد من صحة البرامج المطورة يمكن استخدام بذرات مختلفة عند كل تشغيل للبرنامج وهو الطريق الثاني. يوفر Fortran مثلا دالة اسمها srand تمكن من تغيير البذرة عن طريق ارسال البذرة الجديدة في عمدتها

كما يمكن قراءة الزمن من ساعة الحاسوب عن طريق دوال خاصة بذلك وارسالها في عمدة srand لتتغير بذلك السلسلة العشوائية تلقائيا مع الزمن. تختلف اليات تغير البذرة من لغة الى أخرى.

السؤال الذي يطرح نفسه الان، هل يعقل ان يكون تسلسل الارقام لذي تم الحصول عليه بتطبيق الخوارزمية السابقة عشوائيا بالمعنى الحقيقي؟. قطعا لا، لسبب بديهي وهو ان هذه القيم المولدة تخضع لمعادلة رياضية مضبوطة :فهي تنتج نفس النتيجة في كل مرة نقوم باستدعائها. الاجابة المناسبة لهذا التساؤل هي ان التسلسل لن يكون عشوائيًا ، لكنه سيبدو عشوائيا ونهتم فقط بما إذا كان هذا المظهر كافياً للتطبيقات التي بين ايدينا. لذلك فإنها تسمى أحيانا ، تحيزا للدقة في التغبير، أرقاما شبه عشوائية.

بمجرد اختيار بذرة $\boldsymbol{u_0}$ يولد الرقم العشوائي التالي للسلسة $\boldsymbol{u_1}$ ثم $\boldsymbol{u_2}$ وهكذا بالتوالي. من أجل اختيار ملائم للثوابت $\boldsymbol{A}$ و$\boldsymbol{C}$ و $\boldsymbol{M}$ ستبدو سلسلة الأرقام عشوائية في مجال سعة التمثيل المصرح به (مثلا للأرقام الصحيحة الممثلة في سعة من 32 بت اكبر عدد يمكن تمثيله هو2^{32}-1) دون ترابط واضح بين عناصر السلسة.

لفحص مدى تأثير اختيار الثوابت على جودة تسلسل الاعداد المولدة، لنعتبر بعض الحالات. مثلا من اجل القيم: $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{C}, \boldsymbol{M}) = (\mathbf{7}, \mathbf{0}, \mathbf{10})$ نجد السلسلة:

$$\boldsymbol{I} = \{\mathbf{1} \quad \mathbf{7} \quad \mathbf{9} \quad \mathbf{3} \quad \mathbf{1} \quad \mathbf{7} \quad \mathbf{9} \quad \mathbf{3} \quad \mathbf{1} \quad \mathbf{7} \cdots\cdots \quad \}$$

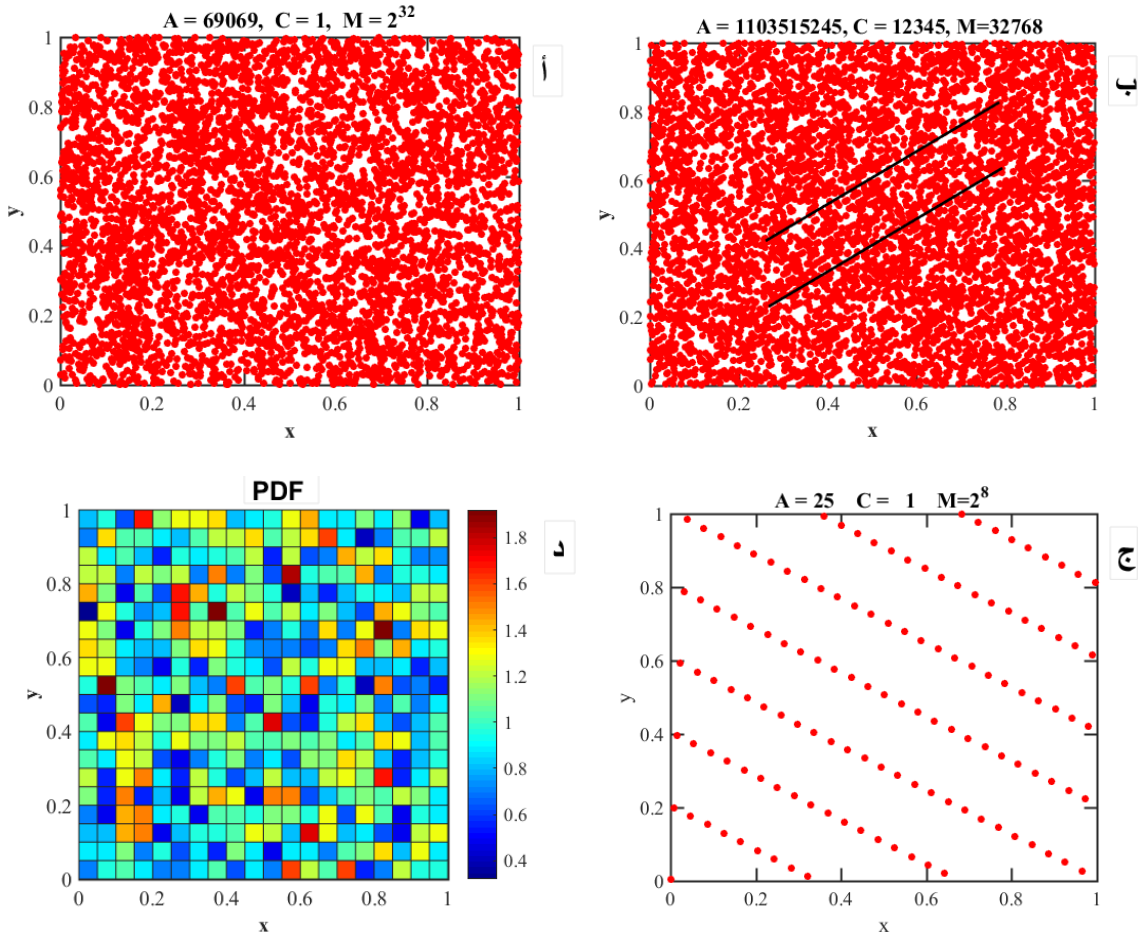
من الواضح أن اختيار القيم أعلاه لـ $\boldsymbol{A}$ و$\boldsymbol{C}$ و $\boldsymbol{M}$ ليس جيدا بشكل خاص ، حيث يتكرر التسلسل بعد أربع تكرارات فقط يعني ان الدور يساوي 4. اذا من الجلي ان المعيار الأول لتحديد جودة مولد التطابق الخطي المحدد بواسطة مجموعة الأرقام $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{C}, \boldsymbol{M})$ هو التأكد من أن دوره يأخذ قيمة عالية جدا. لهذه الغاية استنتج المختصون مجموعة من القيود على قيم $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{C}, \boldsymbol{M})$ تضمن ان يأخذ الدور اكبر قيمة له $(\boldsymbol{M} - \mathbf{1})$ والذي يعني الحصول على جميع الاعداد الصحيحة في المجال $[\mathbf{0}, \boldsymbol{M} - \mathbf{1}]$. بتطبيق هذه القيود وجدت حالات جيدة مثل:

$$\boldsymbol{M} = \mathbf{2^{35}}, \quad \boldsymbol{A} = \mathbf{139}, \qquad \boldsymbol{C} = \mathbf{1}$$

$$\boldsymbol{M} = \mathbf{2^{32}}, \quad \boldsymbol{A} = \mathbf{69069}, \qquad \boldsymbol{C} = \mathbf{1}$$

$$\boldsymbol{M} = \mathbf{2^{32}}, \quad \boldsymbol{A} = \mathbf{1812433253}, \quad \boldsymbol{C} = \mathbf{1}$$

كتقدير اولي لمدى الترابط والعشوائية بين عناصر السلسلة والذي يعكس مدى جودة السلسلة العشوائية يمكن رسم تشتت لعدد كبير من الارقام العشوائية لمولد معين وذلك باعتبار كل عددين متتالين كإحداثيات نقطة من فضاء ذو بعدين. اذا وجد في الصورة الحاصلة نزعة للتمايز وعدم انتظام في كثافة النقاط فان ذلك يشير كتقدير لعدم جودة عشوائية الارقام المولدة كما في الشكل 1.-ب و 1.-ج. في الشكل 1-د تم حساب الكثافة للتشتت في الصورة أ، حيث نلاحظ انه فعلا يوجد تجانس جيد الامر الذي يشير الى درجة عشوائية وانتظام جيدة في نفس الوقت.



الشكل 1.3: رسم متناثر لأزواج من الأرقام العشوائية (u_i, u_{i+1}) تم الحصول عليها باستخدام خوارزمية التطابق الخطي:أ- درجة العشوائية عالية. ب- درجة العشوائية منخفضة. ج- ترابط عالي جدا وكل نقطة في هذه الصورة مكررة عددا معينا من المرات. د-كثافة احتمال النقاط للشكل أ.

مع ذلك ينظر المختصون الاحصائيون لقياس جودة السلاسل المولدة باختبارات احصائية متقدمة لا نريد الخوض في تفاصيلها باي حال ولكن نذكرمنها:

- اختبار الانتظام: $\langle u_i^n \rangle = (n+1)^{-1}$ وبصفة خاصة $\langle u_i \rangle = 0.5$ و $\langle u_i^2 \rangle = 1/3$
- اختبار الترابط: $\langle u_i u_j \rangle = 0.25$ من اجل $i \neq j$
- اختبار χ^2 للانتظام
- اختبار χ^2 للاستقلال

مولدات الأرقام العشوائية المتوفرة في لغات البرمجة عادة تولد أرقاما عشوائية توزيعها الاحتمالي منتظم على مجال معين. على سبيل المثال rand في Fortran تولد أرقاما قيمها أكبر من او تساوي الصفر وأقل من الواحد. في حين أن نفس الدالة بنفس الاسم في لغة c تولد أرقاما صحيحة في المجال من 0 الى غاية 2^{M-1}-1 حيث M يمثل عدد خانات الذاكرة المخصصة لتمثيل الاعداد الصحيحة. في ما سنرى من العمليات المحاكاة تتضمن فقط اعدادا عشوائية توزيعاتها منتظمة لذلك سنستخدم في تجاربنا التالية المولدات العشوائية التي توفرها لغات البرمجة دون تغيير كبير ملحوظ. مع ذلك في بعض تجارب المحاكاة الأخرى الغير معنية بهذه المذكرة تتطلب استخدام أرقام عشوائية بتوزيعات احتمالية غير منتظمة على سبيل المثال تجربة التهافت التلقائي تتميز بتوزيع بواسون في حين أن توزيع السرعات في غاز مثالي يتبع توزيع ماكسويل.

توجد طريقتين شائعتين لتوليد سلسلة من الأرقام العشوائية بتوزيعات غير منتظمة وكلاهما تعتمدان على مولد الأرقام العشوائية المنتظمة. تسمى الأولى طريقة التحويل وهي تعتمد على نظرية الاحتمالات. مثلا اذا كان x متغير عشوائي توزيعه $f_X(x)$ منتظما على المجال $[0,1]$، عندها يخضع توزيع المتغير العشوائي $y = \varphi(x)$ لعلاقة التحويل التالية :

$$f_Y(y) = \left\{ f_X(x) \left| \frac{dx}{dy} \right| \right\}_{x=\varphi^{-1}(y)} = f_X\left(\varphi^{-1}(y)\right) \left| \frac{d\varphi^{-1}(y)}{dy} \right| \qquad 2.3$$

حيث $f_Y(y)$ هو التوزيع الاحتمالي للمتغير العشوائي Y و $\varphi(x)$ دالة مستمرة وقابلة للاشتقاق ورتيبة على طول مجال X . كتطبيق لهذه الطريقة سنقوم بمعاينة متغير عشوائيY_1 بتوزيع بواسون $= f_{Y1}(y_1)$ e^{-y_1} واخر Y_2 بتوزيع منتظم في المجال $[a,b]$ حيث:

$$f_{Y1}(y_1)\begin{cases} e^{-y_1} & if\ y_1 \in y_1 \geq 0 \\ 0 & \text{غيرذلك} \end{cases}$$

$$f_{Y2}(y_2)\begin{cases} \dfrac{1}{b-a} & if\ y_2 \in y_1[a,b] \\ 0 & \text{غيرذلك} \end{cases}$$

الجدير بالملاحظة أن توزيع بواسون والتوزيع الاسي يأخذان نفس الشكل من أجل

$\lambda = 1$ و $m = 0$.

لمعاينة مجموعة الارقام $\{y_1\}_1^N$ و $\{y_2\}_1^N$ بهذه التوزيعات يجب أن نكون قادرين في كل حالة على ايجاد و تقدير دالة التحويل $y = \varphi(x)$ التي تضمن هذه التوزيعات. لهذه الغاية نكامل المعادلة 2.3 بعد تعويض عبارة $f_{Y1}(y_1) = e^{-y_1}$ لنجد:

$$f_Y(y) = f_X(x) \left| \frac{dx}{dy} \right| = f_X(x) \frac{dx}{dy}$$

$$\int_0^{y_1} f_{Y_1}(y_1)\, dy_1 = \int_0^{x} f_X(x)\, dx = \int_0^{x} 1\, dx$$

$$1 - e^{-y_1} = x$$

$$e^{-y_1} = x - 1$$

$$y_1 = -\log(1-x)$$

وهي عبارة التحويل المطلوبة لتوزيع بواسون. بنفس الطريقة نجد عبارة التحويل المنتظم في المجال $[a,b]$:

$$\int_{a}^{y_2} f_{Y_2}(y_2)\,dy_2 = \int_{0}^{x} 1\,dx$$

$$\frac{y_2 - a}{b - a} = x$$

$$y_2 = a + (b - a)x$$

وعليه تتلخص عملية معاينة المتغيرات Y_1 و Y_2 بالتوزيعات المرغوبة في توليد مجموعة من الارقام العشوائية $\{x_1, x_2, x_3, \dots\}$ التي تتبع التوزيع المنتظم في المجال $[0, 1]$ بالدالة rand او اي دالة مكافئة ثم حساب الارقام الموافقة $\{y_1^1, y_1^2, y_1^3, \dots\}$ و $\{y_2^1, y_2^2, y_2^3, \dots\}$ بالعلاقة $y_1^i = \log(x_i + 1)$

والعلاقة $y_2^i = a + (b - a)x_i$ على الترتيب. تجدر الاشارة الى أنه يمكن استخدام طريقة التحويل في الاتجاه العكسي عن طريق اقتراح توزيع مرغوب فيه $f_X(x)$ ثم معاينة X بالدالة العكسية

$x = \varphi^{-1}(y)$ وتعرف الطريقة باسم تقنية التحويل العكسي او طريقة التحويل العكسي لدالة الاحتمال التراكمية للتوزيع المرغوب فيه. في هذه الحالة تُختار دالة التحويل $\varphi(x)$ مساوية لدالة الاحتمال التراكمية للتوزيع المرغوب فيه $f_X(x)$: $y = F_X(x)$.وعليه يكون للمتغير العشوائي Y وفقا للعلاقة التوزيع المنتظم في المجال $[0, 1]$:

$$f_Y(y) = f_X\left(F_X{}^{-1}(y)\right)\left|\frac{dF_X{}^{-1}(y)}{dy}\right| = \left\{f_X(x)\left|\frac{1}{f_X(x)}\right|\right\}_{x=\varphi^{-1}(y)} = 1 \qquad 3.3$$

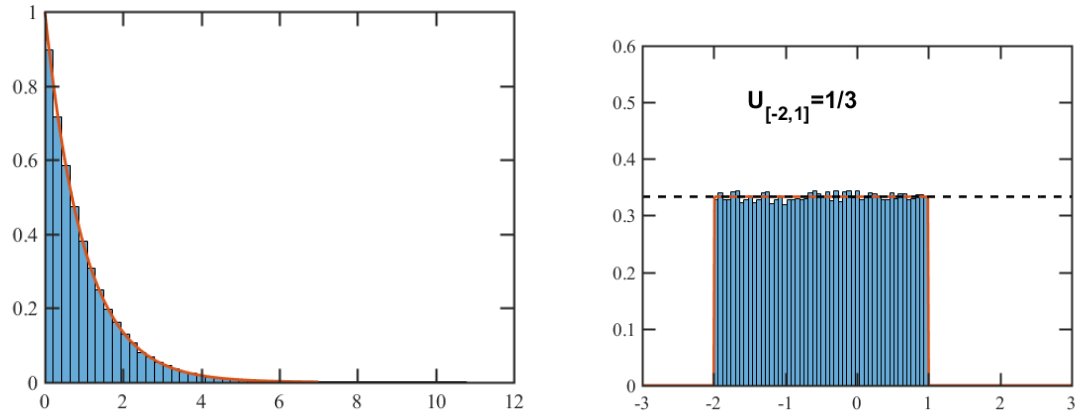
يعني ان:

$$f_Y(y) = 1, \qquad 0 \le y \le 1, \qquad f_Y(y) \sim U_{[0,1]}$$

وهي نتيجة مهمة يمكن استغلالها لتوليد ارقام عشوائية x بكثافة احتمال كيفية $f_X(x)$ بالنهج التالي:

- نحسب دالة التوزيع التراكمية $F_X(x) = \int_{-\infty}^{x} f_X(x)\,dx$.
- تولد اعداد عشوائية y_i بالتوزيع المنتظم في المجال $[0, 1]$.
- نحسب x_i الموافقة وفقا للعلاقة $x_i = F_X{}^{-1}(y_i)$ والتي ستتبع التوزيع المرغوب $f_X(x)$.

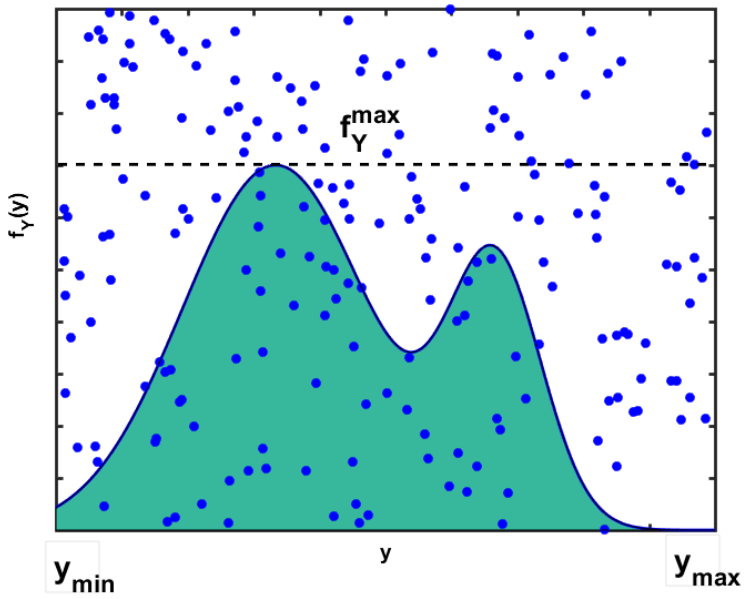
يعرض الشكل 2 أ-ب توزيع سلاسل الارقام من اجل 100000 نقطة معاينة . نلاحظ من هذه الاشكال ان هذه السلاسل المولدة تتبع التوزيعات المطلوبة النظرية الموضحة بخط مستمر. تم الحصول على توزيعات السلاسل عن طريق حساب ورسم المنحنيات التكرارية باستخدام 50 سلة مشاهدة(معاينة).



الشكل 2.3: توزيعات الأرقام العشوائية الناتجة عن طريقة التحويل.أ- توزيع بوسون ب- التوزيع المنتظم بين 2- و 1+.

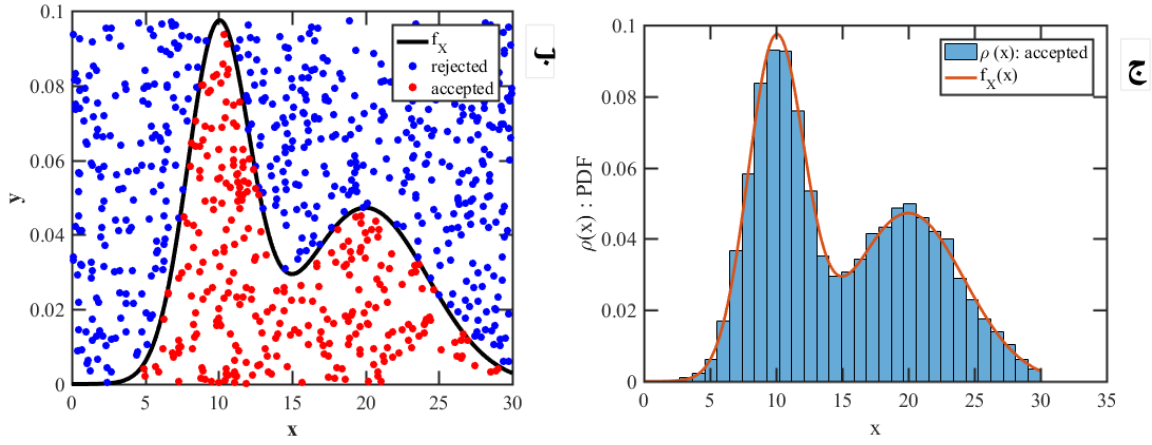
تكون طريقة التحويل مفيدة اذا ممكنا تقدير الدالة $\boldsymbol{\varphi(x)}$ بشكل صريح. قد يصادف في بعض الأحيان أن يكون التوزيع المرغوب فيه غير معرف بعلاقة رياضية صريحة او ان التوزيع جد معقد. نلجأ في هذه الحالة لاستخدام الطريقة الثانية المعروفة بطريقة القبول والرفض لنيومان.

في هذه الطريقة تولد مجموعة من الأرقام بتوزيع منتظم في المجال المرغوب بين y(min) و y(max) كما يبينه الشكل3.3 ونفرض اننا بصدد توليد مجموعة من الأرقام موزعة وفقا لتوزيع $\boldsymbol{f_Y(y)}$. في كل مرة نولد فيها عددا $\boldsymbol{y_i}$ نولد معه عددا عشوائيا $\boldsymbol{y_{test}}$ في المجال بين 0 و $\boldsymbol{f_Y{}^{max}(y)}$ (اعلى نقطة في التوزيع).ثم نقبل $\boldsymbol{y_i}$ اذا كانت $\boldsymbol{y_{test}}$ تحت المنحني $\boldsymbol{f_Y(y)}$ ونرفضها في الحالة العكسية .يعني نقبل $\boldsymbol{y_i}$ ضمن السلسلة الجديدة اذا كان $\boldsymbol{f_Y(y_i)}$ اكبر من $\boldsymbol{y_{test}}$خلاف ذلك نلغي $\boldsymbol{y_i}$ من السلسلة. . يعني نقبل النقاط المعاينة في المجال y(min) و y(max) باحتمال متناسب مع$\boldsymbol{f_Y(y_i)}$ويفضل ان يكون هذا الاحتمال مساوي الى $\frac{\boldsymbol{f_Y(y_i)}}{\boldsymbol{f_Y{}^{max}(y)}}$.



الشكل 3.3: أ-رسم تخطيطي يوضح استخدام طريقة الرفض. يتناسب احتمال الحصول على قيمة معينة لـ y_i مع $f_Y(y_i)$.

توضيحا لهذه الطريقة قمنا بمعاينة مجموعة اعداد وفقا للتوزيع الاحتمالي المعروض في الشكل 3.3-ب. حصلنا على هذا التوزيع من تركيب دالتين لغوص بمركزين مختلفين. النقاط الزرقاء هي النقاط المرفوضة من اصل 400 نقطة معاينة. يعرض الشكل 3.3-ج التوزيع الاحتمال للنقاط المقبولة من اصل 40000 نقطة معاينة.



الشكل 3.3 :-ب التوزيع الاحتمالي المرغوب والنقاط المقبولة والمرفوضة بطريقة الرفض. ج- التوزيع الاحتمالي للنقاط المقبولة من اصل 40000 نقطة معاينة بطريقة الرفض.

3.3 المشي العشوائي :

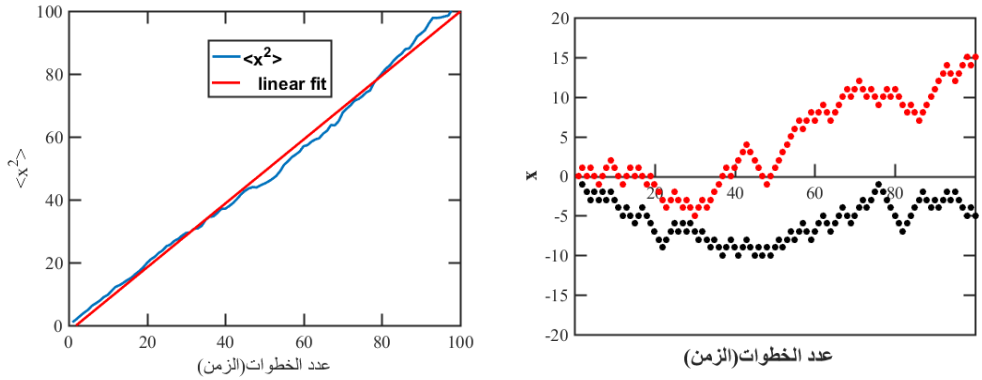
نعتبر مشاءا عشوائيا عند مركز الاحداثيات على طول المحور x . نقوم بتنفيذ مسيرة عشوائية في بعد واحد، هنا نولد رقما عشوائيا في المجال بين 0 و 1 باستخدام الدالة rand ونقارن قيمته بـ 1/2 وإذا كان أقل من 1/2 فإن جهاز المشي الخاص بنا يتحرك الى اليمين، وعكس ذلك فإنه يتجه نحو اليسار. تتكرر هذه العملية بعد ذلك لتوليد x_n كدالة لـ n.

يعرض الشكل 4.3 بعض النتائج النموذجية لمسيرين مختلفين لمشائين ، تم الحصول عليهما بعد تنفيذ البرنامج مرتين. يتحرك المشائين بشكل غير منتظم لذلك احيانا تشبه هذه الحركة بمشي السكير. يمكن الحصول على العديد من النتائج الكمية من هذه المحاكاة. ولعل أبسطها هي المسافة التي يقطعها المشاة بعد عدد n من الخطوات. نظرا لأنه من الواضح أن يتقدم المشاء باحتمال متساو إلى اليسار مثل اليمين فإن هذا المتوسط $<x_n>$ يجب أن يكون صفرا لان الاحتمال متساوي. كما

أن الكمية الأكثر اهتمام هي $<x_n^2>$ متوسط مربع الموضع بعد عدد n من الخطوات. تظهر بعض نتائج على اليمين في الشكل 4.3 بخط مستقيم أي:

$$< x^2 >= Dt. \qquad (4.3)$$

حيث t هو الزمن هنا يساوي رقم الخطوة، يعرف D بمعامل الانتشار. من المفيد مقارنة هذه النتيجة بسلوك الجسيم الحر، أي الجسيم الذي يتحرك بسرعة ثابتة ولا تعوقه الاصطدامات مع الجسيمات الأخرى. بالنسبة لمثل هذا الجسيم نعلم أن x = vt وبالتالي فإن المسافة بينه وبين المركز تتزايد خطيا مع مرور الزمن. بالنسبة للمشاء العشوائي الامر مختلف، فتجذير المعادلة 4.3 يشير الى ان متوسط البعد من الركز يتناسب مع $t^{1/2}$ ومن ثم فإن المشاء العشوائي يبتعد عن المركز بشكل أبطأ بكثير من الجسيم الحر.



الشكل 4.3: على اليسار-أ : موضع الجسيم بدلالة رقم الخطوة أي الزمن لمسيرتين عشوائيتين في بعد واحد. على اليمين-ب: $\langle x^2 \rangle$ كدالة لرقم الخطوة لمجموعة من مسارات المشي العشوائي أحادية البعد بخطوة ثابتة الطول.

تعرف الحركة الموصوفة بالمعادلة 4.3 بالانتشار وسنصف فيما يلي من الاقسام المزيد عن هذه الحركة وعلاقتها بالمشي العشوائي. مع ذلك يمكن ان نستبق استخراج بعض النتائج من المعادلة 4.3 لمتابعة المناقشة التي بدأنا فيها في هذا القسم بخصوص انتشار الكريمة في القهوة. اولا يتضح أن هذه النتيجة تخبرنا كثيرا عن مدى سرعة اختلاط قطرة من الكريم بالقهوة. يكتمل الخلط تقريبا عندما يكون $\langle x^2 \rangle$ مساويا لقطر الكوب. إذا ضاعفنا هذا القطر فإننا نرى أن الأمر سيستغرق أربع مرات حتى تمتزج الكريمة مع القهوة.

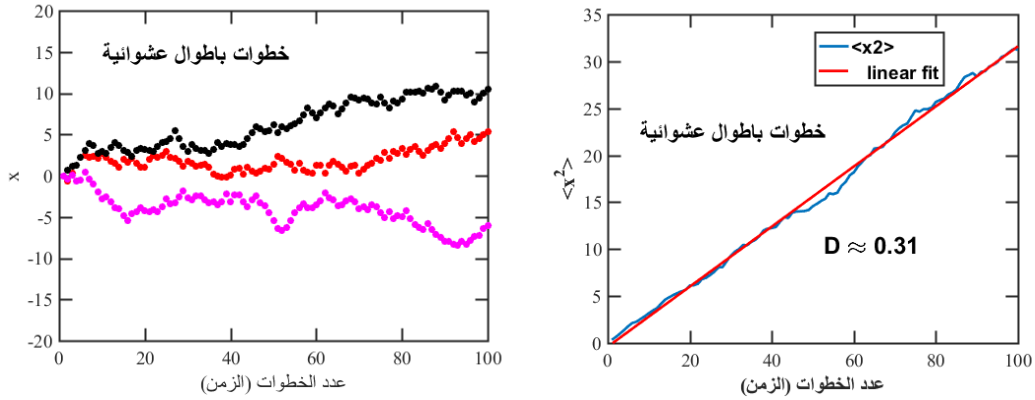
ثانيا، النقطة المثيرة للاهتمام تتعلق بقيمة ثابت الانتشار D وهو يمثل ميل المستقيم $\langle x^2 \rangle$ مقابل t في الشكل 4.3 - ب والذي يبدو من الشكل انه مساو للوحدة. في الواقع يمكن حساب قيمة الثابت D بشكل تحليلي كما يلي:

نعبر اولا عن الموضع x بعد عدد n من الخطوات x_n كمجموع لـ n خطوة منفصلة:

$$x_n = \sum_{i=1}^{n} s_i . \qquad (5.3)$$

حيث s_i تمثل الإزاحة الناتجة عن الخطوة رقم i بمقدار $s_i = \pm 1$ باحتمالات متساوية، يمكننا بعد ذلك كتابة:

$$x_n^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{n} s_i s_j \right) \qquad (6.3)$$



الشكل5.3: على اليسار: x مقابل رقم الخطوة لثلاث مسيرات عشوائية في بعد واحد، الخطوات ذات أطوال عشوائية في المجال من 1 - إلى 1. على اليمين: متوسط x^2 بدلالة الزمن على عدد كبير من المسارات العشوائية أحادية البعد المختلفة بخطوات عشوائية الطوال.

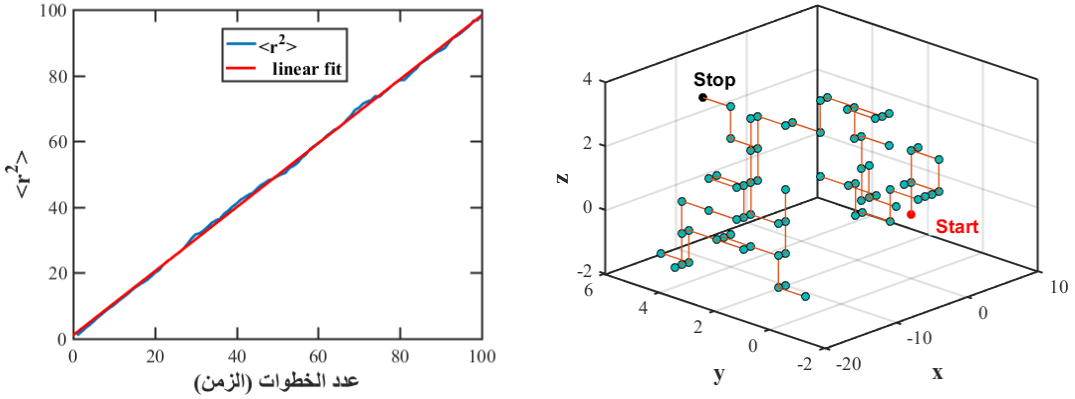
نظرا لأن الخطوات مستقلة عن بعضها البعض فإن الحدود من الشكل $s_i s_j$ من اجل $i \neq j$ تأخذ القيم ± 1 بحتمالات متساوية. بأخذ متوسط x^2 على عدد كبير من المسارات المختلفة، فلن يساهم في الجمع سوى الحدود s_i^2 أي:

$$< x_n^2 >= \sum_{i=1}^{n} s_i^2 = n \qquad (7.3)$$

حيث استخدمنا حقيقة ان $s_i^2 = 1$. بما أن n تمثل الزمن، فإن العبارة الاخيرة تكافئ المعادلة 2.3 بثابت تناسب D=1.

حتى الان نظرنا في أبسط نموذج للمشي العشوائي. لكن هناك العديد من الطرق لتعميم النموذج لجعله أكثر واقعية. إحدى هذه الطرق هي السماح للخطوات بأن تأخذ اطوالا عشوائية. بعض النتائج لهذه الحالة موضحة في الشكل 5.3، لنجد معها مرة أخرى سلوكًا انتشاريًا ، أي أن متوسط مربع البعد عن المركز $\langle x^2 \rangle$ موصوف بالمعادلة 4.3 ، ولكن بقيمة مختلفة لثابت الانتشار $D = 0.31$. يمكن كذلك هنا حساب قيمة D بشكل تحليلي.

التعميم الواضح الآخر هو السماح للمشاء بالتحرك في ثلاثة أبعاد ، ويعرض الشكل 6.3 نتائج هذه الحالة . بالنسبة لهذه المحاكاة، قمنا بتقييد الخطوات لتكون بطول ثابت مساو للوحدة على كامل الاتجاهات $\pm z$ $\pm$. $\pm x$ $\pm y$ وباحتمال مساوي 1/6 لكل اتجاه منها. تم العثور على السلوك الانتشاري مرة أخرى. هناك العديد من التعميمات الأخرى المثيرة للاهتمام لنموذج المشي العشوائي منها على سبيل المثال المشي العشوائي المقيد باحتمالات غير متساوية لكل اتجاه. مثل هذه الحالات تخرج عن نطاق المذكرة ونتركها لدراسات مستقبلية.



الشكل 6.3: الى اليمين: متوسط مربع الموضع بدلالة رقم الخطوة (أي الزمن) لمجموعة من المسارات العشوائية ثلاثية الأبعاد ($r^2 = x^2 + y^2 + z^2$). تم تقييد طول الخطوة بالوحدة وتم حساب متوسط نتائج 500 مشي. الى اليسار: مسار مشاء عشوائي واحد بدلالة الزمن.

4.3 محاكاة الانتشار والمشي العشوائي:

لقد ذكرنا في مواضع عديدة أن للمشي العشوائي علاقة وطيدة بالانتشار. في هذا القسم سنخوص في تفاصيل على هذه العلاقة بمزيد من الامثلة. لهذه الغاية سنعمد لمحاكاة مثالا من حياتنا اليومية وهو انتشار جزيئات الكريمة او الحليب من لحظة وضعها في منتصف كأس قهوة الصباح ذات اللون القريب من الاسود. الهدف هو حساب كيفية توزيع هذه الجزيئات (الكريمة) ذات العدد كبير، مكانيًا بدلالة الزمن في المحلول (القهوة) . في مناقشتنا للمشي العشوائي، ركزنا على حركة المشاة الفردية. يمكن بطريقة بديلة وصف نفس هذه المسألة الفيزيائية باستخدام مصطلح كثافة الجزيئات $\boldsymbol{\rho(x, y, z, t)}$، والتي يمكن تحديدها بشكل ملائم إذا كان النظام يحتوي على عدد كبير من الجزيئات (المشاة). تعرف هذه المقاربة في المحاكات بمقاربة الحبيبات الخشنة Coarse-grained approche ، وتهدف إلى محاكاة سلوك الأنظمة المعقدة باستخدام تمثيلها الخشن (المبسط). تُستخدم النماذج الحبيبية الخشنة على نطاق واسع لنمذجة الجزيئات الحيوية. في مثل هذه الانظمة ونظرا للعدد الكبير للجزيئات يمكن تعريف وحساب الكثافة = (الكتلة / الحجم) بشكل مفيد وذو معنى. تخضع هذه الكثافة لما يعرف بمعادلة الانتشار:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D}\nabla^2\rho. \qquad (8.3)$$

حيث $\mathcal{D}$ هو ثابت والذي سيتبن أن له علاقة وثيقةً بثابت الانتشار الذي تعلمناه في دراستنا للمشي العشوائي.

لحل هذه المعادلة نلجأ لاستخدام طريقة الفروق المنتهية المشهورة والتي تتضمن تقريبات للمشتقات الجزئية الظاهرة في المعادلة 6.3 بصيغ ملائمة حسب رتبة المشتق. بداية سنقتصر الدراسة على حالة البعد الواحد ثم ليسهل بعدها تمديدها لحالة البعدين أو ثلاثة أبعاد. في حالة البعد الواحد تؤول المعادلة 8.3 الى الشكل:

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = \mathcal{D}\frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} \qquad (9.3)$$

قبل استخدام صيغ الفروق المنتهية للمشتقات الجزية نقسم اولا كلا المجالين المكاني والزمني المستمرين تقسيمات معينة ولتكن منتظمة وبالتالي يصبح الفضاء المستمر x متقطعا وممثلا بالنقاط $xi = i\,\Delta x$. بشكل مماثل يصبح الفضاء المستمر t متقطعا وممثلا بالنقاط $tn = n\,\Delta t$. عندئذ نستطيع كتابة $\rho(x,t) = \rho(i\,\Delta x, n\,\Delta t) = \rho(i,n)$ وتأخذ صيغ الفروق المنتهية للمشتقات الجزية العبارات المشهورة التالية:

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \approx \frac{\rho(i+1,n) + \rho(i-1,n) - 2\rho(i,n)}{(\Delta x)^2} \qquad (10.3)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \approx \frac{\rho(i,n+1) - \rho(i,n)}{\Delta t} \qquad (11.3)$$

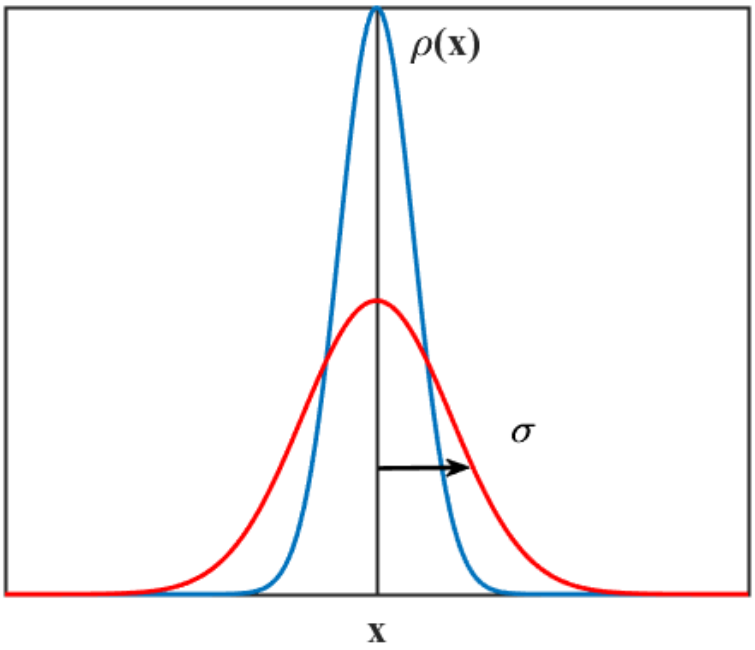
بتعويض هذه العبارات في معادلة الانتشار أحادية البعد ثم نستخرج عبارة الكثافة $\rho(i,n+1)$ عند اللحظة الزمنية $n+1$ بدلالة عبارة الكثافة عند اللحظة الزمنية $\rho(i,n)$ لنجد:

$$\rho\,(i,n+1) = \rho(i,n) + \frac{\mathcal{D}\Delta t}{(\Delta x)^2}[\rho(i+1,n) + \rho(i-1,n) - 2\rho(i,n)] \qquad (12.3)$$

تشير هذه المعادلة أنه إذا حصلنا على التوزيع الابتدائي لجزيئات الكريمة $\rho(x,t=0)$ ، فيمكننا استخدام المعادلة (12.3) لإيجاد قيمة ρ في أزمنة مقبلة. لأجل هذه الغاية قمنا بتطوير برنامج لحل معادلة الانتشار في بعد وبعدين باستخدام طرقة الفروق المنتهية. تتوفر المعادلة التفاضلية على حلول تحليلية بسيطة من اجل حالات خاصة جدا يمكن الاستفادة منها للتحقق من البرنامج المطور. من بين هذه الحلول الخاصة المعادلة التالية:

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sigma}\exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right]. \qquad (13.3)$$

حيث σ تعتمد على الزمن وفقا لـ $\sigma = \sqrt{2\mathcal{D}t}$. يعرض الشكل7.3، مظهر الكثافة في زمنين مختلفين على شكل توزيع غوص نصف عرضه σ والذي يقيس الحجم الذي تشغله كتلة الجسيمات. بانسياب الزمن تحافظ الكثافة على شكلها الغوصي و يزداد عرضها فقط مع الزمن وفقا $\sigma \sim \sqrt{t}$. يمكن النظر لهذا العرض كجذر متوسط مربع مسافة يقطعها جسيم ممثل في المتوسط كما يلي. عند الزمن t=0 تكون الجسيمات متجمعة عند المركز وعرض المتوسط يكون صغير جدا $\sigma \sim 0$ ويحدده شكل القطرة الابتدائي. عند ازمنة لاحقة يكون عرض كتلة الكريمة متناسب مع σ والذي يجب ان يقيس كذلك المسافة المقطوعة من احد جسيمات الكريمة في المتوسط. ومنه يتضح أن المسافة المقطوعة من طرف جسيم في المتوسط تتناسب مع $t^{1/2}$. هذا التصرف هو بالضبط ما توصلنا اليه في دراسة المشي العشوائي.

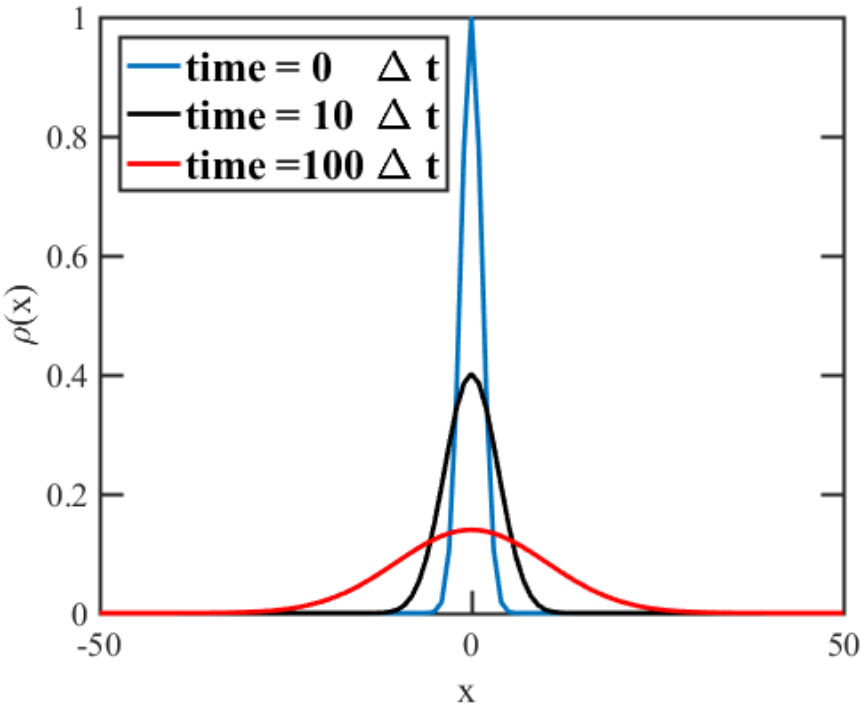


الشكل7.3: منحنيي الحلول التخطيطية لمعادلة الانتشار في زمنين مختلفين. حيث يوضح المنحنى بالون الازرق الكثافة في وقت مبكر، بينما يوضح المنحنى بالون الاحمر الكثافة في وقت لاحق. يتسع التوزيع الغوصي بمرور الوقت ، لكن المنطقة الواقعة أسفل المنحنى ، التي تساوي العدد الإجمالي للجسيمات لا تتغير تبقى ثابتة .

نعود الان لمناقشة الحل العددي. لضمان الحصول على حلول عددية مستقرة يجب مراعاة اختيار قيم الخطوة الزمنية والموضعية بعناية وفقا للمتراجحة التالية:

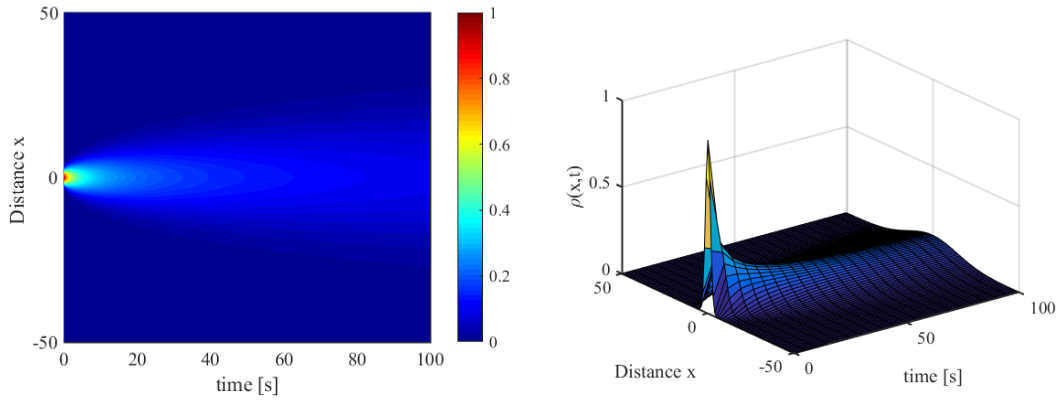
$$\Delta x \geq \sqrt{2\mathcal{D}\Delta t}.$$

يعرض الشكل8.3 حلول معادلة الانتشار في بعد واحد عن طريق الخوارزمية 12.3 وقد افترضنا توزيعا ابتدائيا عل شكل دالة غوص درجة محليته عالية بجوار المركز.



الشكل8.3: الحلول العددية لمعادلة الانتشار في بعد واحد، عند اللحظات الزمنية $t = 0$ و $t = 10\ \Delta t$ و $t = 100\ \Delta t$. تم تثبيت الخطوة المكانية عند $\Delta x = 1$ و الزمنية عند $\Delta t = 0.5$ وهذا من اجل ثابت انتشار $D = 1$.

ملامح الكثافة عند $t = 10\ \Delta t$ و $t = 100\ \Delta t$ لها الآن الأشكال الغوصية المتوقعة. ينخفض اتساع التوزيع الغوصي ويزداد عرضه كلما استمرت الحركة لأوقات أطول. يعرض الشكل 9.3 بشكل اوضح تغيرات الكثافة بدلالة الموضع عند جميع اللحظات.



الشكل9.3: تصوير للكثافة في بعد واحد بدلالة الموضع عند جميع اللحظات الزمنية.

تعد خوارزمية الفروق المنتهية التي تناولناها لحل معادلة الانتشار في بعد واحد احدى الخوارزميات المشهورة في ايجاد حلول مرضية للمعادلات التفاضلية ذات المشتقات الجزئية ويمكن تعميمها لجميع الابعاد والمتغيرات الظاهرة في هذه المعادلات.

تأخذ خوارزمية الفروق المنتهية في بعدين مع معادلة الانتشار الشكل التالي:

$$\rho_{i,j}^{n+1} = \rho_{i,j}^{n} + \frac{\mathcal{D}\Delta t}{(\Delta x)^2}\left[\rho_{i+1,j}^{n} + \rho_{i-1,j}^{n} - 2\rho_{i,j}^{n}\right] + \frac{\mathcal{D}\Delta t}{(\Delta y)^2}\left[\rho_{i,j+1}^{n} + \rho_{i,j-1}^{n} - 2\rho_{i,j}^{n}\right] \qquad (14.3)$$

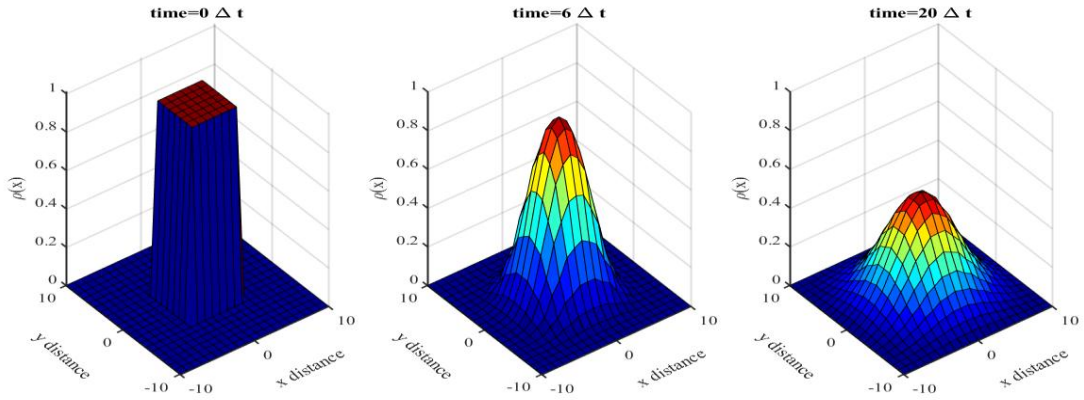
في الحالة غير متماثلة المناحي يصبح معامل الانتشار دالة للموضع، عندها تأخذ الخوارزمية الشكل التالي:

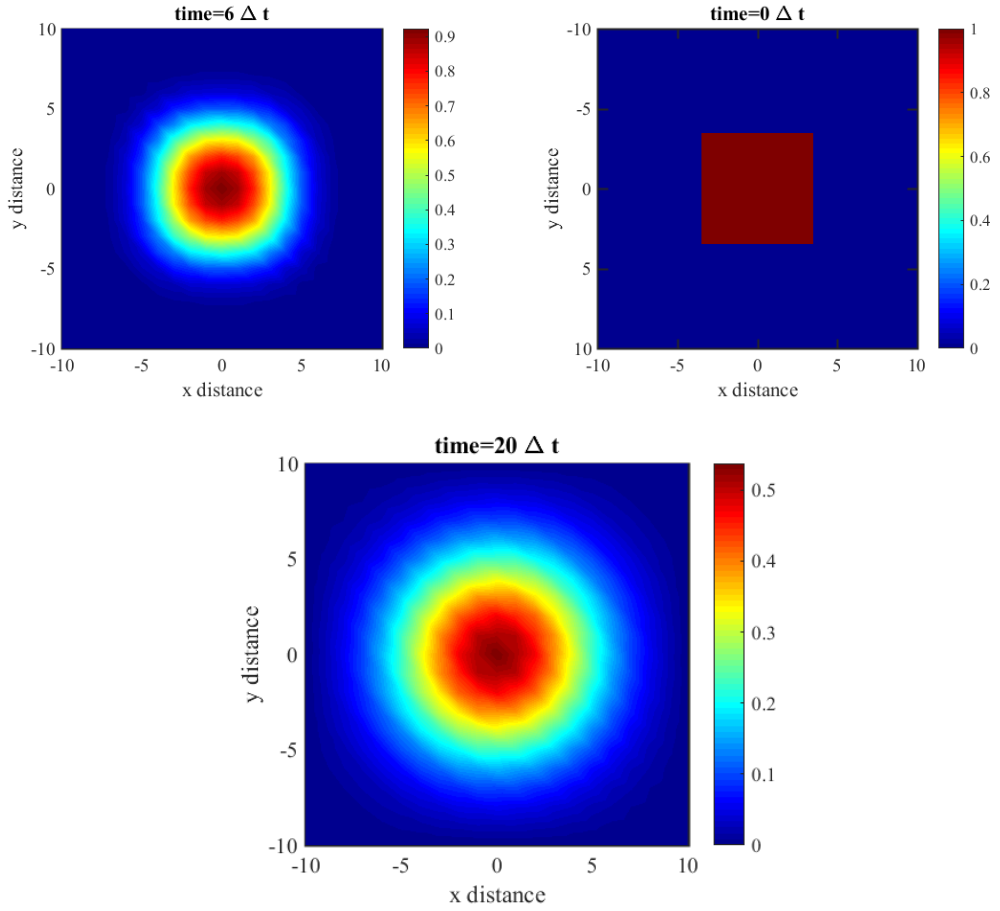
$$\frac{\rho_{i,j}^{t+1} - \rho_{i,j}^{t}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta x^2}\left(\mathcal{D}_{i+\frac{1}{2},j}\left(\rho_{i+1,j}^{t} - \rho_{i,j}^{t}\right) - \mathcal{D}_{i-\frac{1}{2},j}\left(\rho_{i,j}^{t} - \rho_{i-1,j}^{t}\right)\right) + \frac{1}{\Delta y^2}\left(\mathcal{D}_{i,j+\frac{1}{2}}\left(\rho_{i,j+1}^{t} - \rho_{i,j}\right) - \mathcal{D}_{i,j-\frac{1}{2}}\left(\rho_{i,j}^{t} - \rho_{i,j-1}^{t}\right)\right)$$

ضريبة هذا الاختيار تتمثل في تعقد البرمجة. مع ذلك هذه الحالة تعد خارج اطار المذكرة.

في طريق البحث عن تصور اكثر وضوحا لظاهرة الانتشار قمنا بتطوير برنامج لحل معادلة الانتشار في بعدين. يعرض الشكل 10.3 بعض نتائج هذا البرنامج حيث افترضنا أن التوزيع الابتدائي للكثافة مشابه الى حد قريب الى توزع جزيئات الكريمة في قهوة. في اطار هذا التشبيه تم حصر جميع الجزيئات في منطقة مربعة تحيط بالمركز. مع انسياب الزمن ينتشر مظهر الكثافة بطريقة متماثلة المناحي تقريبا. لضمان الاستقرار العددي تم اختيار خطوات مكانية وزمانية ملائمة لحالة المحاكات في بعدين تحقق:

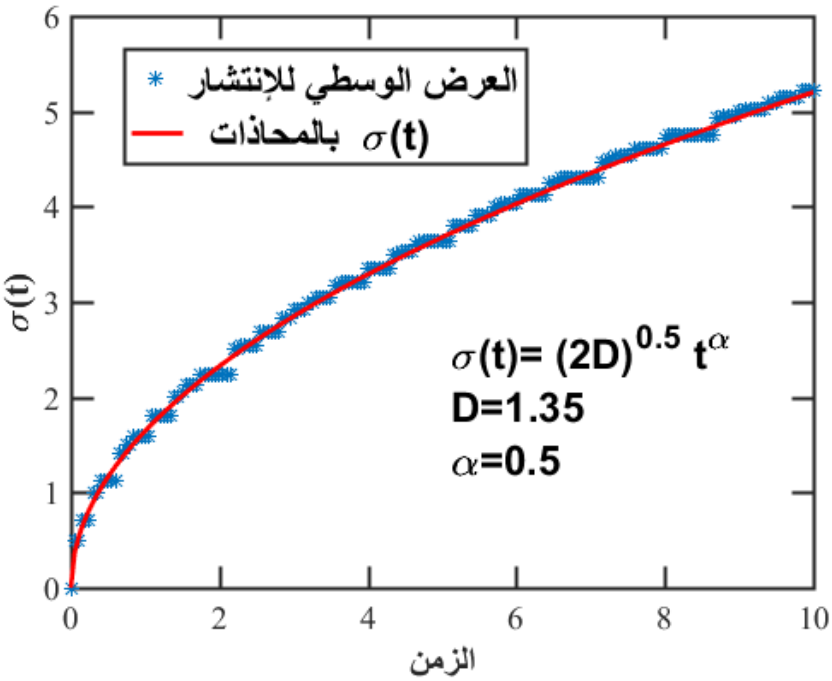
$$D\Delta t\left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}\right) \leq \frac{1}{2}. \qquad (15.3)$$





الشكل 10.3: التطور الزمني لحلول معادلة الانتشار في بعدين. عند اللحظات الزمنية $t = 0$ و $t = 6\Delta t$ و $t = 20\ \Delta t$. تم تثبيت الخطوات المكانية عند $\Delta x = \Delta y = 1$ و الزمنية عند $\Delta t = 0.25$ وهذا من اجل ثابت انتشار $D = 1$.

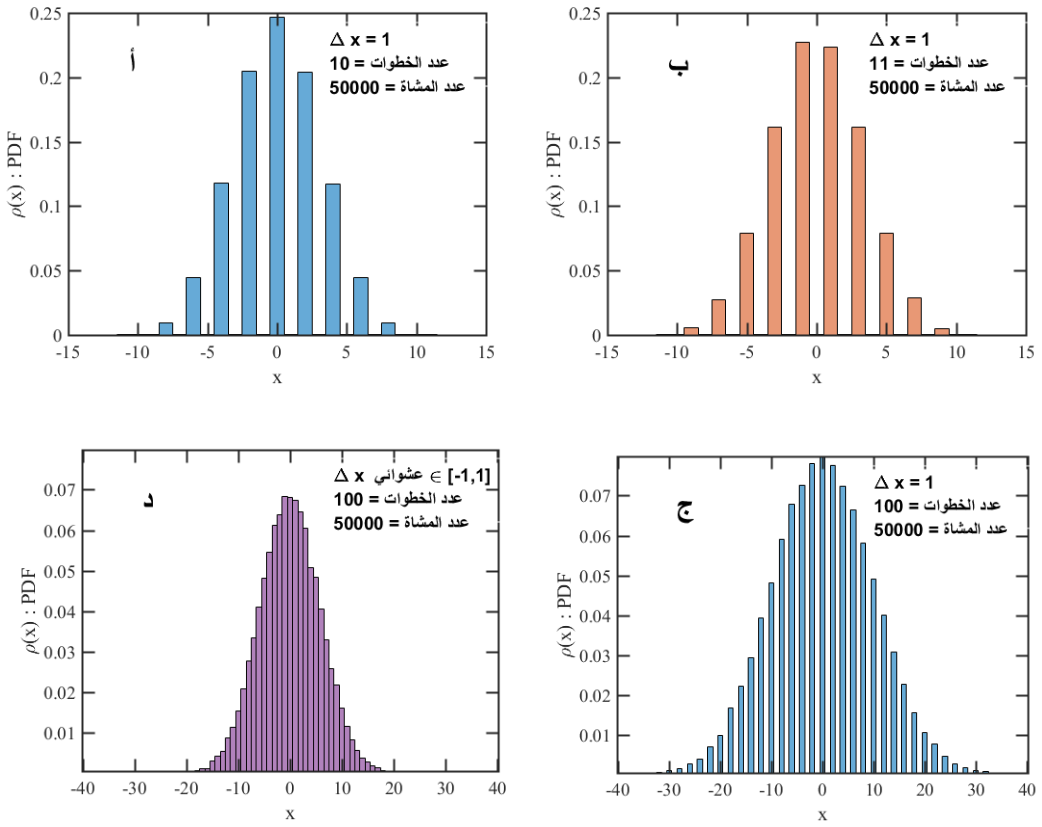
عن طريق حساب العرض المتوسط عند منتصف الارتفاع بدلالة الزمن كما هو موضح في الشكل 12، تمكنا مرة اخرى من اثبات أن هذا العرض يزداد مع الزمن بمعدل متناسب مع $t^{\propto}$ حيث $\propto = 1/2$ وبمعامل انتشار مساو الى $D = 1.35$ تم حساب هذه الوسائط عن طريق محاذاة المنحني المقاس (العرض الوسطي للإنتشار) بطريقة التربيعات الدنيا بمعادلة غير خطية من الشكل: $\sigma(t) = \sqrt{2D}\ t^{\propto}$ حيث $\propto$ و D هي الوسائط المطلوب تقديرها.



الشكل11.3: تطور العرض الوسطي الانتشار بدلالة الزمن محسوب من حلول معادلة الانتشار في بعدين عند منتصف الارتفاع. يمثل البيان المستمر بلون احمر المنحني المحاذي وفقا للمعادلة الظاهرة في الشكل.

لتوضيح العلاقة بين معادلة الانتشار والمشي العشوائي لنعتبر من جديد مسألة الكريمة في القهوة باستخدام مقاربة المشي العشوائي. الغرض هو تقدير كثافة الجزيئات عن طريق حساب التوزيع الاحتمالي لعدد زيارات المواضع المختلفة من طرف عدد كبير من المشاة العشوائيين. سنعتبر حالة البعد الواحد ونأجل حالة البعدين للقسم اللاحق. لهذه الغاية، نعتبر بداية عددا كبيرا من المشاة تموضعين جميعا عند مركز الاحداثيات. يتشابه هذا مع وضع جزيئات الكريمة بعد ترسيبها في مركز كاس القهوة مباشرة. للحصول على مظهر الكثافة عند اللحظة الزمنية $t = n\,\Delta t$، نحسب التوزيع الاحتمالي لمواضع المشاة بعد عدد n من الخطوات. أي أننا نسمح لكل مشاء بأخذ عدد n من الخطوات بطول خطوة مساو للوحدة ثم نسجل مواقعها عن هذه اللحظة. ثم نقوم برسم بياني لعدد المشاة الذين ينتهي بهم الأمر في الموقع x كدالة في x. بمعنى رسم منحني تكراري لمواضع المشاة عند اللحظة الزمنية $t = n\,\Delta t$. بتنظيم هذا المنحني بعدد المشاة نحصل على التوزيع الاحتمالي المطلوب أو ما يعرف بالكثافة.

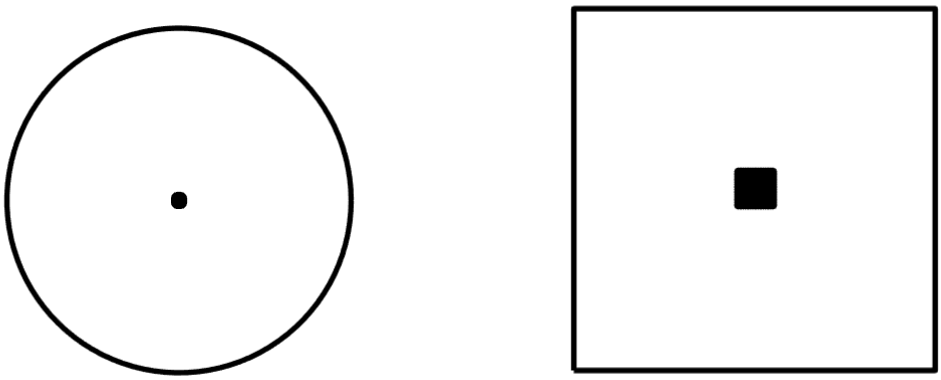
يعرض الشكل 12.3 بعض نتائج هذه الحسابات وقد يبدو للوهلة الاولى أن النتائج غريبة بعض الشيء بسبب أن لبعض المواضع احتمال معدوم توافق هذه المواضع ذات الأحتمال المعدوم المواضع الفردية وهي تعكس حقيقة أن كل مشاء انطلق من الصفر وأخذ عددا فرديا من الخطوات لامحالة سينتهي به المسير عند موضع فردي. لتجاوز هذه الحالة نختار خطوات بطول عشوائي، عندها نجد التوزيع المتوقع في الشكل 13-د. في جميع الحالات تظهر نتائج السير العشوائي التوزيع الغوصي المنتشر للجسيمات المتوقع. فعلا يوجد تشابه دقيق بين هذه النتائج ونتائج حلول معادلة الانتشار.



الشكل 12.3: أ- التوزيعات العشوائية في بعد واحد لعدد عدد كبير من المشاة بوضع ابتدائي معدوم: أ- 10 خطوات زوجية. ب- ب10 خطوات فردية. ج-100 خطوة. د- 100 خطوة بطول عشوائي لكل خطوة.

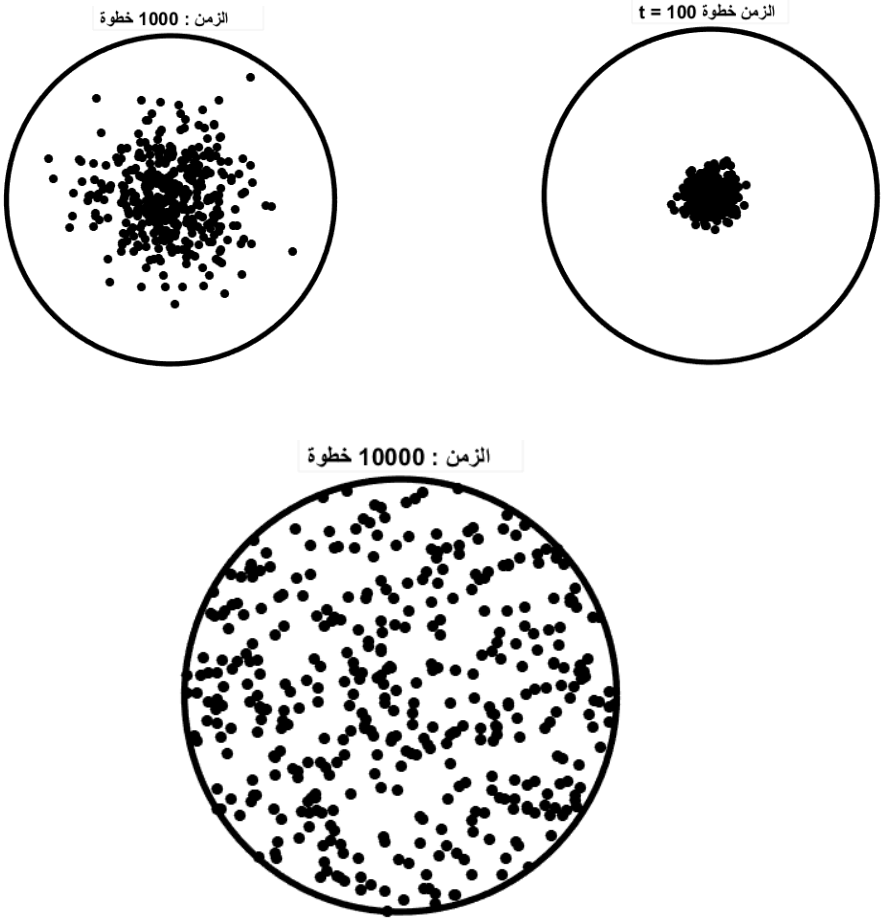
5.3 الانتشار والانتروبي وعلاقتها بالزمن:

قدمنا مشكلة الكريمة في القهوة في بداية هذا الفصل عندما كنا نحاول لفت الانتباه لأهمية الاليات العشوائية. الآن نريد إعادة النظر فيها من وجهة نظر ميكانيكا الإحصاء للأنظمة خارج التوازن واستخدامها لتوضيح نمط تقارب النظام من التوازن. لهذه الغاية، نعتبر نظاما احصائيا بشروط ابتدائية ممثلة في فنجان من القهوة السوداء يحتوي في وسطه على قطرة من الكريمة. للتسهيل معالجة المسالة يمكن اعتبار فنجان القهوة دائري الشكل او مربع بتوزيع ابتدائي لجسيمات الكريمة في فضاء ثنائي البعد كما في الشكل 14. النقاط السوداء الموزعة في حيز مربع صغير تمثل التوزيع الابتدائي لـ 400 جزيء من الكريمة عند اللحظة $\boldsymbol{t = 0}$.



الشكل 13.3 : محاكاة المشي العشوائي لانتشار الكريمة في القهوة:(على اليسار) توزيع الكريمة الابتدائية (t = 0) في فنجان مربع طول ضلعه 200 .(على اليمين) فنجان مربع نصف قطره 100. عدد الجزيئات في كلتا الحالتين 400.

في اطار للمحاكاة نفترض أن كل جزيء من هذه الجزيئات ينفذ مسيرا عشوائيا بشكل مستقل في بعدين دون اي قيد على امكانية ان يشغل المشاة نفس المواضع العشوائية لبعضهم البعض في نفس اللحظة. على رغم من ان هذا الافتراض غير صحيح فيزيائيا الا انه لن يؤثر نوعيا على النتائج المرجوة. عند كل خطوة زمنية نختار جزيئا عشوائيا ونتركه يأخذ خطوة واحدة في سيره العشوائي عند وصول احد الجزيئات الى جدار الفنجان يمكن استعمال شروط دورية حدودية او شروط حدية انعكاسية تضمن حجر الجزئيات داخ الفنجان. مثل هذه الشروط تعكس ثبوت عدد الجزيئات و كذلك تقلل من تأثير الشروط الحدية في نتائج محاكات عدد قليل من الجزيئات والذي هو عدد رهيب في الواقع الحي . يعرض الشكل 15 مواضع الجزيئات عند اللحظات الزمنية: $\mathbf{10^4, 10^3, 10^2}$. كما هو متوقع، بالنظر بالعين المجردة لهذه الاشكال نجد أن الكريمة تنتشر الكريمة بمظهر مشابه لمظهر الانتشار.



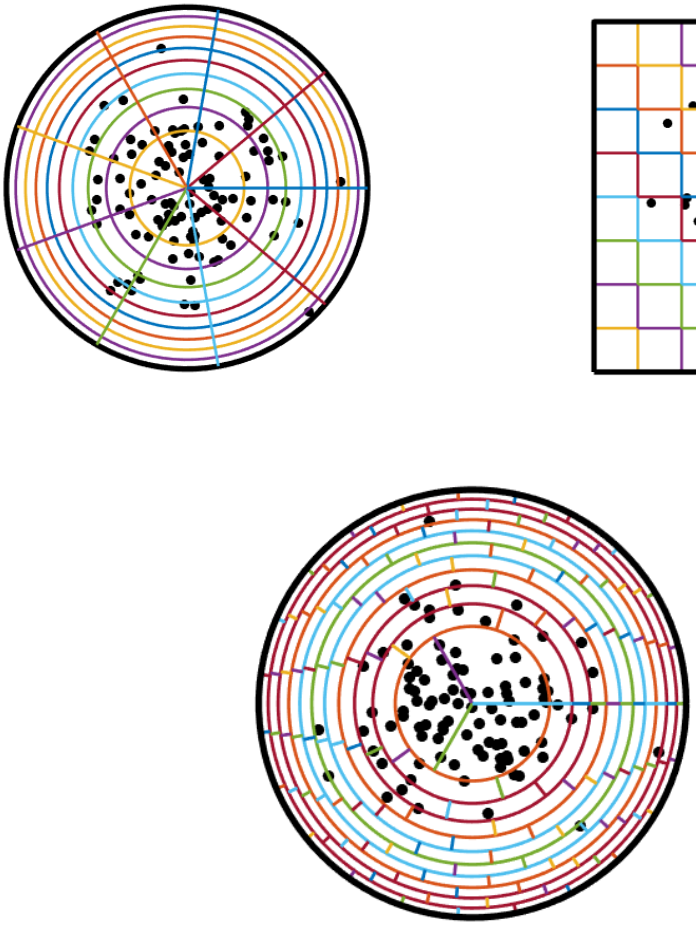
الشكل 14.3: انتشار الكريمة في القهوة. استمرار محاكاة السير العشوائي في الشكل 14.(اليمين): بعد 10^2 خطوة زمنية (اليسار) : بعد 10^3 خطوة زمنية (الاسفل) 10^4 خطوة زمنية .

هذه النتائج تعادل حل لمعادلة الانتشار في بعدين التي تناولناها انفا. فيما يلي نريد أن نستطرد في تحليل هذا المثال ونناقش كيفية ارتباطه بالقانون الثاني للديناميك الحرارية والطريقة التي تسعى بها الأنظمة الى التوازن. الانتروبي مقدار مهم جدا في فيزياء الاحصاء ومن الملائم جدا مناقشته مع هذا النظام. يقيس الأنتروبي مقدار عدم الانتظام او الفوضى في النظام. تتميز الانظمة المنظمة تماما بانعدام الأنتروبي ، بينما تتميز الانظمة الفوضوية غير المرتبة بأنتروبي عالي جدا. تخبرنا كذلك الفيزياء الإحصائية أن الانظمة المغلقة تتميز إما بثبوت الأنتروبي أو بزيادتها مع مرور الزمن.
يوضح مثالنا عن محاكات انتشار الكريمة في القهوة هذه الأفكار بشكل رائع للغاية: بداية جميع جزيئات الكريمة كانت محصورة في منطقة صغيرة جدا بجوار الفنجان وعليه يمكن القول أن النظام مرتب بدرجة عالية وعندها تأخذ الانتروبي قيمة صغيرة. مع مرور الزمن تنتشر الجزيئات لملأ الفنجان وتفقد ترتيبها تدريجا وبالتالي ترتفع الانتروبي. يمكن تقدير هذا الوصف بشكل كمي عن طريق حساب الانتروبي بشكل صريح انطلاقا من تعريفها الاحصائي:

$$S = -\sum_i P_i \ln P_i = \sum_i S_i \qquad (16.3)$$

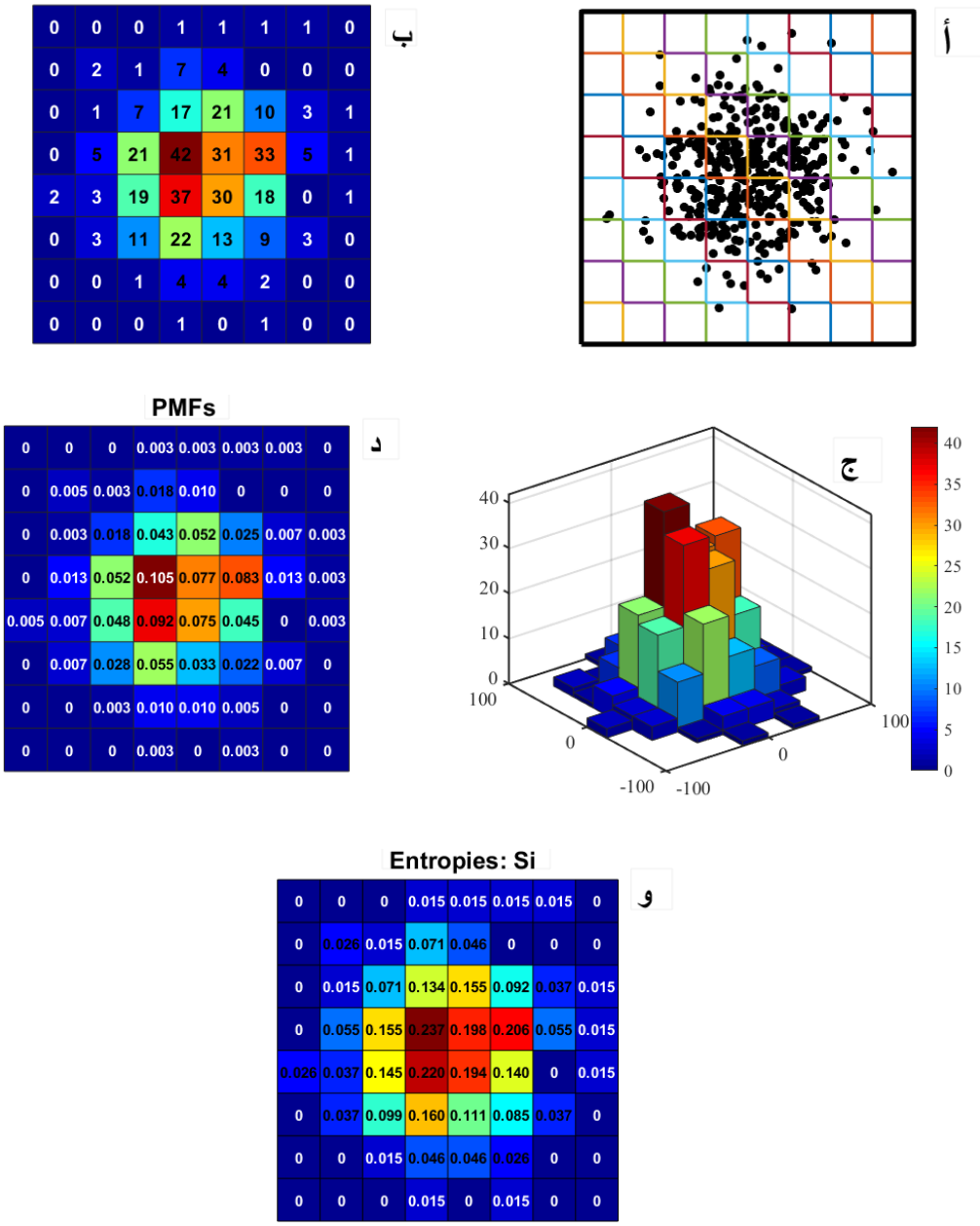
حيث يجري الجمع على جميع الحالات الممكنة للنظام و P_i يرمز لاحتمال العثور على النظام في الحالة i.
لتطبيق هذا التعريف نتخيل أن النظام مقسم إلى شبكة من الخلايا العنصرية متساوية المساحة كما هو موضح

في الشكل 15.3. الجدير بالملاحظة أنه ليس لهذه الشبكة من الخلايا علاقة بالمواضع التي يشغلها المشاة بل هي مجرد طريقة ملائمة لتقسيم الفضاء المشغول بالجزيئات. كل خلية من هذه الخلايا تميز حالة للنظام يمكن أن يشغلها جزيء من الجزيئات. يمكن تخيل تقسيمات مختلفة ويفضل أن تكون نسبة طول الخلية الى عرضها مقاربة للواحد للحصول على نتائج دقيقة.

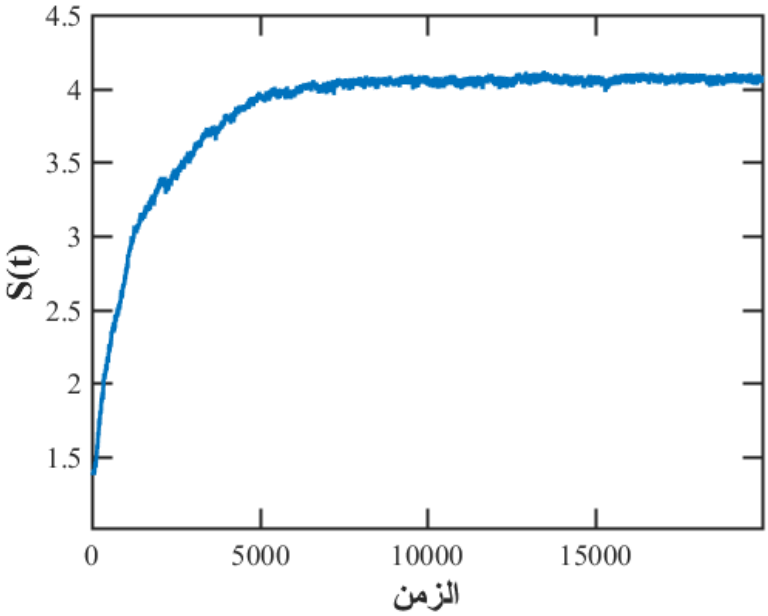


الشكل 15.3: تقسيم تخطيطي لفنجان القهوة إلى خلايا شبكية بأشكال مختلفة، مع مثال عن عدد قليل من الجزيئات الموزعة في جميع أنحاء الفنجان. في الحالة الدائرية يكون التقسيم معقدا نوعا ما عن الحالة المربعة. القسم السفلي يوضح التقسيم الامثل في الحالة الدائرية الا أن برمجته والتعامل معه في احصاء الجزيئات داخل كل خلية يعد جد معقد.

يوضح الشكل 16.3 معنى العلاقة 16.3 وكيفية حسابها من أجل اللحظة الزمنية الممثلة في الشكل 16.3-أ للشبكة المربعة. قمنا أولا بإحصاء عدد الجزيئات في كل خلية كما يبين الشكل 16.3-ب و الشكل 16.3- ج ثم نحسب الاحتمال P_i لتواجد الجزيئات في كل خلية كما يبين الشكل 16.3-د ومنه يمكن حساب مساهمة كل خلية عنصرية في قيمة الانتروبي كما يبين الشكل 16.3-و. ومنه تـأخذ قيمة الانتروبي لهذه اللحظة مجموع هذه القيم العنصرية للانتروبي S_i في كل خلية.



الشكل 16.3 : طريقة و مراحل حساب الانتروبي في حالة فنجان قهوة مربع الشكل. أ- توزيع للجزيئات عند لحظة معينة. ب- احصاء عدد الجزيئات عند كل خلية شبكية. ج-عرض ثلاثي الابعاد لعدد الجزيئات عند كل خلية شبكية. د- حساب الاحتمالات P_i عند كل خلية. و- حساب المساهمة S_i لكل خلية في الانتروبي.



الشكل 17.3: الانتروبي بدلالة الزمن لامتزاج الكريمة في القهوة مقدرة بعدد مشاة كبير وعدد خطوات عالي يضاهي **20000** وهذا مع شبكة مربعة بأبعادها 8 × 8 = 64 خلية.

يعرض الشكل 17.3 نتائج حسابات الانتروبي بالطريقة التي شرحناها والتي تستخدم مواضع الجزيئات من محاكاة السير العشوائي لحساب هذه الاحتمالات ثم تقييم الانتروبي S. من الواضح من الشكل ان تطور المنحني مع الزمن يتوافق تماما مع تعريف للإنتروبي وتخميناتنا الابتدائية لها مع انتشار الكريمة. النظام في البداية كان في حالة عالية الترتيب مع قيمة منخفضة للانتروبي. بمرور الزمن يزداد الإنتروبي ويستقر في ازمنة طويلة بجوار قيمة ثابتة ، الامر الذي يشير إلى أن النظام قد وصل إلى حالة التوازن.

خلال هذه الرحلة نحو التوازن لهذا النظام المغلق تنتشر الجزيئات لشغل الحالات الشاغرة المتاحة بشكل متماثل، وبالتالي رفع مستوى الانتروبي. هذا التصرف ليس ميزة مصاغة في معادلات الحركة المجهرية بل يظهر نتيجة أن النظام يستكشف (يقضي الزمن في) جميع الحالات المتاحة باحتمالات متساوية. وهذا ما يؤدي في النهاية إلى جعل احتمال العثور على جزيئات الكريمة هو نفسه في جميع الخلايا الشبكية. حالة التوازن هي الحالة التي يكون فيها لجميع الحالات المتاحة نفس الاحتمال.

وفقا لفرضية التوازن والمعروفة باسم ergodic hypothesis والتي تنص على أن جميع الحالات المتاحة سيزورها النظام ولو بعد زمن طويل حينها يكون النظام في حالة توازن باحتمالات متساوية لجميع الحلات. هذه ليست نتيجة لقوانين نيوتن او اي معادلات اخرى للحركة المجهرية، بل هي فرضية تلعب دورا رئيسيا في الفيزياء الإحصائية. على الرغم من أنه ليس ممكنا اشتقاقها من قوانين مجهرية او مبادئ اولية، فقد ثبت أنها تصح بشكل دقيق مع بعض الأنظمة. يمكن تقدير الصعوبة في عدم القدرة على استنباط فرضية ergodic بطريقة عامة تماما من شكل توزع جزيئات الكريمة في الشكلين3. 13 و14.3. تبدي الجزيئات عند زمن طويل توزعا عشوائيا كبيرا إلى حد معين، والذي يتناقص بشكل كبير مع صورتها عند الحظة t = 0. إذا تتبعنا النظام بعد زمن اطول من زمن اللحظة الاخيرة في الشكل14.3 فإننا نتوقع أن تزداد عشوائية هذا التوزع اوتظل كما هي وطبعا لا نتوقع أن نخفض بشكل واضح. وحتى ان انخفضت العشوائية فإن مثل هذا الانخفاض لن يخرق أي قوانين مجهرية للكون.

تترك هذه القوانين الباب مفتوحا أمام احتمال أن يتطور توزيع الكريمة في الشكل 14.3 بعد اللحظة الاخيرة بمرور الزمن إلى ترتيب منظم كما في اللحظة الابتدائية. يعني كأن تنفصل جزيئات الكريمة عن القهوة وتعود لتنتظم في مركز الفنجان. مع ذلك نعلم ان مثل هذا الأمر غير وارد للغاية ولم تتم ملاحظته مطلقا في حياتنا اليومية. في الامثلة التي درسناها نجد ان السلوك الإرغودي هو نتيجة لقواعد المشي العشوائي. في الحقيقة إن افتراض ان كل خطوة من خطوات المشي العشوائي مستقلة عن الخطوات السابقة يقود الجزيئات إلى استكشاف او زيارة جميع أجزاء الفنجان باحتمالات متساوية. مع ذلك فإن افتراض الاستقلال هذا هو مجرد افتراض. كما نعلم انه على المستوى المجهري ان المسار الذي يتبعه الجزيء ليس مستقلا عن تاريخه السابق، بل يمكن حسابه من حيث المبدأ باستخدام قوانين نيوتن للحركة. اذا كيف لنا ان نفسر مدى مطابقة الافتراض الارغودي للكثير من الوقائع. لا يمكن الاجابة عن هذا التساؤل بشكل تام. لكن يمكن رصد بعض مظاهر الاجابة من سلوك الأنظمة الحتمية. يمكن الأنظمة الحتمية أن تتصرف بطريقة فوضوية وتظهر حساسية شديدة للظروف الابتدائية قد تؤدي هذه الحساسية إلى سلوك عشوائي لأنظمة مثل النواس والكويكبات..... الخ، المحكومة بقوانين مضبوطة ومعروفة. قد يكون هذا السلوك العشوائي هو المسؤول عن السلوك الإرغودي الملاحظ في الكون. بالتالي إذا أعدنا دراستنا لجزيئات الكريمة باستخدام قوانين الحركة الحتمية كأنها كرات بلياردو نتوقع أنه من غير المفاجئ ان نجد كذلك ان حركات جزيئات الكريمة فوضوية الامر الذي يجعل النظام يتصرف ارغوديا.

الخـــــاتـمـــــة

تعتبر المحاكاة العددية وسيلة مهمة جدا لحل المسائل الفيزيائية التي لا تتوفر على حلول تحليلية تصريحية. تضمن هذا العمل محاكاة لظاهرة الانتشار باستخدام مقاربة المشي العشوائي واستخلاص الكثير من الأفكار الفيزيائية الدفينة في هذه الظاهرة. على سبيل المثال حساب الانتروبي وعلاقته بفرضية الأرغودي.

لهذه الغاية تعرضنا في الفصل الأول لمفهوم الأرقام العشوائية واستخداماتها، وطرق توليدها ذكرت طريقتين هما طريقة الأوسط وطريقة التطابق الخطي كما كانت هذه الأخيرة هي اكثر شيوعا، حيث تعرفنا على دوال التوزيع الاحتمالية وحساب قيم المتوسط والتباين لبعض أنواعها. وتم التطرق الى المتغيرات العشوائية حيث ميزنا حالتين هما أولا عندما يكون المتغير عددا محدودا يمكن حسابه من القيم يسمى بالمتغير العشوائي المنفصل، ثانيا عندما يأخذ المتغير عددا لا نهائيا لا يمكن حسابه يسمى بالمتغير العشوائي المستمر، وتم حساب كل من المتوسط والتباين للحالتين، كما يمكن دراسة مجموعة من المتغيرات او ما تسمى بالمجتمع فنقوم بفحص جزء صغير من المجتمع نطلق عليها بالعينة ويمكن حساب كل من المتوسط والتباين لهذه العينة.

وتمت بعدها إحاطة نظرية للانتشار والمشي العشوائي من خلال إعطاء تاريخ الانتشار وأنواعه وقانوني فيك. كما تمت دراسة حركة المشي العشوائي لجسيم في بعد واحد وحساب متوسط الازاحة MSD والتباين والانحراف المعياري له وقد عممت هذه الدراسة في حالة بعدين وثلاثة أبعاد. بالإضافة الى ذلك تطرقنا الى العلاقة بين الانتشار والمشي العشوائي ألا وهي $< \boldsymbol{x^2} >= \boldsymbol{2\mathcal{D}t}$.

وفي الفصل الثالث تم تطبيق تقنية المحاكاة لتوليد ارقام شبه عشوائية واستخداماتها لمحاكاة ظاهرة الانتشار مع ذكر الشروط اللازمة من القيم الإبتدائية والشروط الدورية والحدودية. حيث تم التوصل في نهاية هذا العمل المتعلق بمحاكاة الانتشار والمشي العشوائي الى أهم النتائج التالية :

- ✓ الوصول الى أن اختيار البذرة تلقائيا من البرنامج يؤدي الى توليد نفس السلسلة في كل مرة هذا يعني أن البذرة يختارها المستخدم.
- ✓ تمكين من توليد سلسلة من الأرقام العشوائية باستخدام طريقة التطابق الخطي حيث كان الترابط بين عناصر السلسلة يعكس مدى جودة السلسلة العشوائية.
- ✓ الوصول الى معرفة توزيع الأرقام العشوائية إما عن طريق التحويل أوعن طريق الرفض والقبول لنيومان.
- ✓ لتوكيد معلومات التي تحصلنا عليها من المشي العشوائي قمنا بحل المعادلة التفاضلية للانتشار في بعد واحد وبعدين باستخدام طريقة الفروق المنتهية.
- ✓ تطابق النتائج المشي العشوائي مع حلول معادلة الانتشار وتأكد من صحة $< r >$ بدلالة الزمن $< r >= \sqrt{2\mathcal{D}}t^{\frac{1}{2}}$

- ✓ تم التحقيق من فرضية أرغودي باستخدام النموذج الشبكي لحالات النظام في كأس من القهوة .

وتم توكيد ذلك عن طريق حساب الانتروبي في النموذج الشبكي حيث وجدناها تستقر في أزمة طويلة عندها يزور النظام جميع حالاته المتاحة باحتمال متساوي.

كل هذه النتائج المتحصل عليها تثبت أنه من الممكن استخدام محاكاة المشي العشوائي لدراسة ظاهرة الانتشار دون لجوء الى الحساب التحليلي أو الاحصائي.

[1] B.Ydri,"Computational Physics", World Scientific, singapore D (2017).

[2]أ.القاضي ،" محاكاة حركية الجزيئات وحقل القوى الضبابية، مذكرة ماجستير، جامعة الملك عبد العزيز جدة -المملكة العربي السعودية (2011).

[3] F.Betaouaf, "Simullation de Dynamique Moléculaire des fluides denses, méthane-azote, méthane-méon: Approche de Feynman-HOBBS", Thése de doctorat Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen-Algérie (2015).

[4] Chris H. Rycroft and Martin Z. Bazant," Introduction to Random Walks and Diff usion", Department of Mathematics, MIT, 2005.

[5] Nicholas J. Giordano, "COMPUTATIONAL PHYSICS", Department of Purdue University Physics.

[6] Morten Hjorth-Jensen, " Computational Physics", University of Oslo D 336-341, (October 14, 2011) .

[7] ع.ك.إ.شيت " مدخل إلى المولدات الأعداد العشوائية وأسلوب المحاكاة " ، قسم الرياضيات كلية التربية الأساسية ، جامعة الموصل العراق 2009/04/13.

[8] Morten Hjorth-Jensen, " COMPUTATIONAL PHYSICS ", University of Oslo,Fall 2009.

[9] م. شبيجل. ج. شيلر. أ. سرينيقاسان، " الاحتمالات الاحصاء " ، دار الدولية للاستثمارات الثقافية، 2004.

[10] T. Graham, Quaterly Journal of Science, Literature and Art 27, 74 (1829).

[11] T. Graham, Philos. Mag. 2, 175, 222, 351 (1833)

[12] T. Graham, Philos. Trans. Royal Soc. London 140, 1 (1950).

[13] A. E. Fick, Philos. Mag. 10, 30 (1855).

[14] A. E. Fick, Gesammelte Abhandlungen, Würzburg (1903).

[15] Yan Liang," Department of Earth, Environmental and Planetary Sciences, Brown University, Providence, RI, USA

[16] W. Smith and M. J . Gillan," The Random Walk and the Mean Squared Displacement D 61-71 (May 1996).

[17] Matthew Schwartz ,Statistical Mechanics, Spring 2019

الملخص

محاكاة المشي العشوائي هي محاكاة حاسوبية تعتمد على عدة طرق لدراسة حركة الجسيمات في مسيرة عشوائية فهي بهذا تحاكي الانتشار توزيع الجسيمات ذات العدد الكبير في حيز معين، وتوجد علاقة وطيدة بين الانتشار والمشي العشوائي تجعل معادلات الحركة معقدة نوعا ما ولحلها نلجأ الى استخدام طريقة الفروق المنتهية.

في هذه المذكرة تم التطرق الى موضوع المحاكاة كأسلوب رياضي حديث بديلا عن الأساليب الكلاسيكية، حيث تم إعطاء مجموعة من الشروط الأولية الإبتدائية والدورية والحدودية من أجل ان تكون المحاكاة جد دقيقة. أنجزت محاكاة المشي العشوائي لوصف تصرف لكريمة في القهوة عن طريق دراسة حركة جسيماتها لمشاهدة وصولها الى حالة التوازن. الفكرة المهمة التي تم عرضها هي فهم مدى صلاحية التقريب الاحصائي في استيفاء معلومات أولية عن الأنظمة المدروسة مثل الانتروبي دون الحاجة لحل معادلات الحركة المعقدة لجميع الجسيمات.

الكلمات المفتاحية: محاكاة المشي العشوائي، الانتشار، الأرقام العشوائية، طريقة التطابق الخطي، توزيع ذي الحدين، طريقة الفروق المنتهية.

Abstract

The random walk simulation is a computer simulation that relies on several methods to study the movement of particles in a random path. In this way, the diffusion simulates the distribution of particles with a large number in a given space, and there is a strong relationship between diffusion and random walking that makes the motion equations somewhat complicated, and to solve it we resort to using the finite differences method.

In this dissertation, the subject of simulation was addressed as a modern mathematical method instead of the classical methods, where a set of initial, periodic and boundary preconditions were given in order for the simulation to be very accurate. A random walk simulation was performed to describe the behavior of a coffee creamer by studying the motion of its particles to watch it reach an equilibrium state. The important idea that was presented is to understand the validity of the statistical approximation in satisfying basic information about the studied systems such as entropy without having to solve the complex kinetic equations for all particles.

Keywords: random walk simulation, spread, random numbers, linear congruence method, binomial distribution, finite differences method.