عالَم الذرّة

مجلة هيئة الطاقة الذرية السورية

المدير المسؤول

الدكتور ابراهيم عثمان

المدير العام لهيئة الطاقة الذرية

هيئة التحرير

الدكتور توفيق قسام

رئيس هيئة التحرير

الدكتور محمد قعقع

الدكتور فؤاد العجل

الدكتور أحمد الحاج سعيد

الدكتور محمد فؤاد الرباط

الدكتور إلياس أبو شاهين

الأستاذ انطوان مارين

الدكتور زياد قطب

90-89

السنة التاسعة عشرة / كانون ثاني - شباط - آذار - نيسان

2004

مجلة دورية تصدر ستّ مرّات في السنة عن هيئة الطاقة الذرّية في الجمهورية العربية السورية وتهدف إلى الإسهام في نشر المعرفة العلمية باللغة العربية في الميدانين الذرّي والنووي وفي كل ما يتعلق بهما من تطبيقات.

هيئة الطاقة الذرية السورية مكتب نظم المعلومات http://serversmiso.aecs.sy

شروط الترجمة والتأليف للنشر في مجلة عالم الذرة

1 ـ تُرسل نسختان من مادة النشر باللغة العربية مطبوعتان بالآلة أو مكتوبتان بالحبر بخط واضح، على وجه واحد من الورقة، وبفراغ مضاعف بين السطور.

2 ـ يُكتب على ورقة مستقلة عنوان مادة النشر واسم الكاتب وصفته العلمية وعنوانه مع ملخصين لها أحدهما بالعربية والآخر باللغة الإنكليزية حصراً، في حدود عشرة أسطر لكل منهما، ويُطلب من كل من المؤلف والمترجم كتابة اسمه كاملاً، باللغتين العربية والأجنبية، ولقبه العلمي، وعنوان مراسلته.

3 ـ يُقدم المؤلف أو المترجم في ورقة مستقلة قائمة بالعبارات التي تشكل الكلمات المفتاحية Key Words (والتي توضح أهم ما تضمنته المادة من حيث موضوعاتها وغايتها ونتائجها والطرق المستخدمة فيها) وبما لايتجاوز عشر عبارات باللغتين العربية والإنكليزية.

4 ـ إذا سبق نشر هذا المقال أو البحث في مجلة أجنبية، تُرسل الترجمة مع صورة واضحة عن هذه المادة المنشورة. ويُستحسن إرسال نسخة الأصل المطبوع والأشكال (الرسوم) الأصلية، إن وجدت، ولو على سبيل الإعارة.

5 ـ إذا كانت المادة مؤلفة أو مجمّعة من مصادر عدّة، يذكر الكاتب ذلك تحت العنوان مباشرة كأن يقول «تأليف، جمع، إعداد، مراجعة...»، ويرفق المادة بقائمة مرقمة للمراجع التي استقاها منها.

6 ـ إذا تضمنت المادة صوراً وأشكالاً، تُرسل الصورة الأصلية وكذلك الأشكال مخططة بالحبر الأسود على أوراق مستقلة، إلا إذا كانت موجودة في المادة المطبوعة بلغة أجنبية (كما جاء في الفقرة «4»، مرقمة حسب أماكن ورودها.

7- يُرسل مع المادة قائمة بالمصطلحات العلمية العربية المستخدمة فيها مع مقابلاتها الأجنبية إذا لم تكن واردة في معجم الهيئة للمصطلحات العلمية والتقنية في الطاقة الذرّية، الذي تمّ نشره في أعداد المجلة (2 ـ 18).

8- تُكتب المصطلحات وكذلك أسماء الأعلام باللغتين العربية والأجنبية عند ورودها في النص أول مرة ومن ثم يُكتفى بإيراد المقابل العربي وحده سواء أكان هذا المقابل كاملاً أم مختزلاً. وتُستعمل في النص المؤلّف أو المترجَم الأرقام العربية 1،2،3 أينما وردت مع مراعاة كتابتها بالترتيب العربي من اليمين إلى اليسار. وإذا ورد في نص معادلةٍ أو قانون أحرف أجنبية وأرقام فتكتب المعادلة أو القانون كما في الأصل الأجنبي.

9- يُشار إلى الحواشي، إن وجدت، بإشارات دالّة (★ , + , X, O) في الصفحة ذاتها، كما يُشار في المتن إلى أرقام المصادر والمراجع المدرجة في الصفحة الأخيرة، وذلك بوضعها ضمن قوسين متوسطين [ ].

10 ـ تُرقم مقاطع النص الأجنبي والنص العربي بترتيب واحد في حالة الترجمة.

11 ـ يُرجى من السادة المترجمين مراعاة الأمانة التامة في الترجمة.

12 ـ تخضع مادة النشر للتقييم ولا تُرد إلى أصحابها نشرت أم لم تنشر.

13 ـ يُمنح كل من الكاتب أو المترجم أو المراجع مكافأة مالية وفق القواعد المقررة في الهيئة.

14 ـ تُوجه المراسلات باسم رئيس هيئة التحرير إلى العنوان التالي:

الجمهورية العربية السورية ـ هيئة الطاقة الذرّية ـ مكتب الترجمة والتأليف والنشر ـ مجلة عالم الذرّة ـ دمشق ـ ص.ب: 6091

E-mail: aalam_al_zarra@aec.org.sy

رسوم الاشتراك

الاشتراك السنوي للطلاب (200) ل.س ـ الاشتراك السنوي للأفراد (300) ل.س ـ الاشتراك السنوي للمؤسسات (1000) ل.س

الاشتراك السنوي للأفراد من خارج القطر العربي السوري (30) دولاراً أمريكياً. وللمؤسسات (60) دولاراً أمريكياً. تتضمن الاشتراكات أجور البريد.

بالنسبة للمشتركين من خارج القطر يُرسل رسم الاشتراك إلى العنوان التالي:

المصرف التجاري السوري فرع رقم 13

مزة ـ جبل ـ ص.ب 16005

رقم الحساب 2/3012

أو بشيك باسم هيئة الطاقة الذرّية السورية

يمكن للمقيمين داخل القطر دفع قيمة الاشتراك بحوالة بريدية على العنوان التالي:

مجلة عالم الذرّة ـ مكتب الترجمة والتأليف والنشر ـ هيئة الطاقة الذرّية السورية ـ دمشق ـ ص.ب: 6091

مع بيان يوضح عنوان المراسلة المفضل

أو تدفع مباشرة إلى مكتب الترجمة والتأليف والنشر في الهيئة ـ دمشق ـ شارع 17 نيسان

سعر العدد الواحد

سورية 50 ل.س /لبنان 3000 ل.ل/ الأردن 2 دينار/ مصر 3 جنيه / الجزائر 100 دينار / السعودية 10 ريالات و6 دولارات في البلدان الأخرى.

تود مجلة عالم الذرّة إعلام الشركات والمؤسسات العاملة في قطاع التجهيزات العلمية والمخبرية كافة والصناعات المتعلقة بها عن فتح باب الإعلان التجاري فيها.

للمزيد من الاستفسار حول رغبتكم بنشر إعلاناتكم التجارية الكتابة إلينا على العنوان التالي:

هيئة الطاقة الذرّية السورية ـ مكتب الترجمة والتأليف والنشر

دمشق ص.ب 6091 ـ الجمهورية العربية السورية

أو الاتصال على رقم الهاتف 6111926/7 . فاكس 6112289

ISSN 1607-985X

تقديم

دأبت مجلة عالم الذرّة منذ انطلاقتها في أيار عام 1986 على متابعة التطور الهائل الذي يعمُّ مختلف ميادين العلم والثقافة في عالمنا المعاصر، ساعيةً دائماً أن تكون منبراً يُعرض من خلاله أهم ما تميّزه الحركة التاريخية العلمية من نقلة نوعية في أسلوب النشاط العلمي العالمي الذي يُمارس في عمليات البحث والتطوير. وقد عمدنا منذ صدور المجلة على مدى السنوات الماضية أن يكون هنالك، بين فينة وأخرى، عدد خاص منها يتناول موضوعاً معيّناً نراه ذا أهمية بالغة ينبغي التركيز عليه وأن يأخذه العلميون والباحثون والتقنيون العرب بالحسبان في أعمالهم وابتكاراتهم. ولقد ارتأينا أن يكون العدد الخاص الحالي مكرّساً لموضوع تتطلّبه بإلحاح الأهداف العلمية والصناعية وحتى الاجتماعية في حاضرنا ومستقبلنا اختصاراً للوقت والمال؛ ونعني به "المحاكاة" التي أخذت توطد مكانها اللائق في البحث والتطوير بين النظرية والتجريب لتشكل معهما ثلاثية تقوم بدور العمود الفقري للأنشطة العلمية كافة وتُسرِّع من دينامياتها. إذ إن تطبيق أسلوب المحاكاة في البحث والتطوير يدعم التجربة ويوسِّعها ويقصرِّ الطريق بين النظرية والتجريب ويسهله، خاصة مع ما نشاهده في وقتنا الحاضر من تطور هائل، في مجال الحواسيب والبرمجيات، يسمح بتصميم مقاربات رقمية تتيح فهم العديد من الظواهر المعقّدة التي تفوق شروطها الشروط العادية للتجربة، كتطور المناخ مثلاً والتنبؤ به، أو حدوث الزلازل وتوقّع آثارها المدمِّرة، أو تطوير الأسلحة النووية وتتبُّع انفجاراتها وتأثيراتها على الحياة، أو تحرّر النظائر المشعّة من مواقع تخزين النفايات النووية على مدى آلاف السنين، أو حتى فهم سلوك المذنّبات والأجرام السماوية والمجرّات، حيث توضع لكل هذه الأمور صور افتراضية يجري اختبارها في شتّى الظروف على شاشة الحاسوب.

سنعرض المحاكاة في هذا العدد المزدوج (89-90) لضخامته وفق ثلاثة أقسام حسب تسلسلها المنهجي: المحاكاة من أجل الفهم، المحاكاة من أجل التصميم، المحاكاة من أجل التنفيذ.

وسيُدعم عرض المحاكاة هذا بأمثلة منتقاة من شتى فروع المعرفة.

نأمل أخيراً أن يستفيد القارىء بإغناء معرفته حول هذا الموضوع، وأن يبادر الباحثون إلى ممارسة هذا الأسلوب في البحث العلمي كي يطوّروا أنشطتهم المختلفة بأقل كلفة وأقصر وقت.

الدكتور إبراهيم عثمان

المدير العام لهيئة الطاقة الذرّية

في هذا العدد

■ الافتتاحية ..... ب. بوكان 7

■ المحاكاة، تقنية جديدة وتقليد قديم ..... م. سير 8

■ الفهم والتصميم والتنفيذ هي الغايات الثلاث للمحاكاة ..... إ. كلايـــن 13

■ المحاكاة كمنهجية للبحث والتطوير ..... د. بسنار 17

I المحاكاة من أجل الفهم 23

■ نمذجة المناخ ..... ب. براكونو، أ. مارتي 24

■ مُحاكاة تخزين النُّفايات النووية وإيداعها ..... ع. طومي، إ. موش، أ. بنغاور 31

■ محاكاة المواد ..... ج. مارتان، ج. زيرا 35

■ نمذجة الجزيئات الكِبْروية البيولوجية ..... م. ج. فيلد، ج. بيار إبل 44

■ التغييرات المصيرية في النظريّة من أجل فيزياء تنبئية ..... ج. زين، جوستان 50

■ المحاكيات في فيزياء الجسيمات ..... ب. منسوليبه 54

■ نمذجة السّطوح والسّطوح البينيّة والبنى النانويّة ..... ماري، وآخرون 57

■ النَمْذجة السلوكية ..... ن. لوكلير، وآخرون 63

II المحاكاة من أجل التصميم 67

■ البرنامج المحاكاة. ضمان الأسلحة بدون التجارب النووية ..... د. بسنار 68

■ الوقود النوويّ: نمذجة تجميع متطوّر للبلوتونيوم ..... ر. لونان 80

■ التنبؤ بالبنية الثلاثية الأبعاد للبروتينات ..... هـــ.أورلاند 87

■ محاكاة المنظومات البيولوجيّة..... ك. جـــيدرول 92

■ النمذجة الفوتونية لرقاقات الحمض الريبي النووي المنقوص الأوكسجين..... س. جيتان..... 96

■ اللّحام الافتراضي..... أ. فونـــت، وآخـــرون..... 99

■ استمثال المبادلات الحرارية المتراصّة بالمحاكاة الرقمية..... ب. باتريس توشون..... 104

III المحاكاة من أجل التنفيذ..... 110

■ المفاعلات النووية: من المحاكاة إلى المحاكيات..... ب. فـــايديد..... 111

■ محاكاة التدخل في الوسط المؤذي..... ل. شـــــودورج..... 118

■ أوجه التقدم في النمذجة الأولية الافتراضية..... ك. أندريـــــو..... 122

■ محاكاة طرائق الهدروكربونيات..... ج. دوفـــا، وآخـــرون..... 127

■ محاكاة المراقبات اللاإتلافية: البرمجية سيفا (CIVA)..... ب. كـــلمون..... 130

كشاف موضوعي لعام 2003 135

ملخصات باللغة الإنكليزية عن الموضوعات المنشورة في هذا العدد 145

يُسمح بالنسخ والنقل عن هذه المجلة للاستخدام الشخصي بشرط الإشارة إلى المرجع، أما النسخ والنقل لأهداف تجارية فغير مسموح به إلا بموافقة خطية مسبقة من الهيئة.

تُرجمت موضوعات هذا العدد عن مجلة

CLEFS CEA - NO 47-HIVER 2002-2003

من قبل هيئة التحرير في مكتب الترجمة والتأليف والنشر

الافتتاحية

برنارد بوكان

رئيـــس تحريـــر مجلة clefs - مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية

كان النشاط العلميّ يُمارس قديماً وفق أسلوبين اثنين: النظريّة والتجريب. ورأت العُقودُ الأخيرة أن المُحاكاةَ الرقمية تفرض نفسها كمُقاربة ثالثة في مُعظم فروع البحث والتطوير، من الأكثر أساسية إلى الأقرب من الأهداف الصناعية. وعلى التوازي، تَقَدم العلم التنبئيُّ جُزئياً بفضل المُحاكاة على حساب التجريب. وهذا لا يُعرِّض مُطلقاً التجريب للشك فيه، لأنه لا يوجد تنبؤ صالح بدون تحديد الظواهر ونمذجتها بتجارب تتنامى فيها أهميّة رهافة القياس ودقة اللواقط.

وهكذا توطّدت الثُّلاثية، نَمْذجة - مُحاكاة - تجريب، على اعتبارها العمود الفِقريّ لعمليّات البحث والتطوير، مدعومة بتطوُّر الحواسيب والبرمجيّات تطوراً سمح باستعمال قدراتها الهائلة على وجه أحسن. وتسمح إمكانات الحساب المتوفرة في الوقت الحاضر بمُقاربة رقمية، لم تخطر على البال للظواهر المُعقّدة.

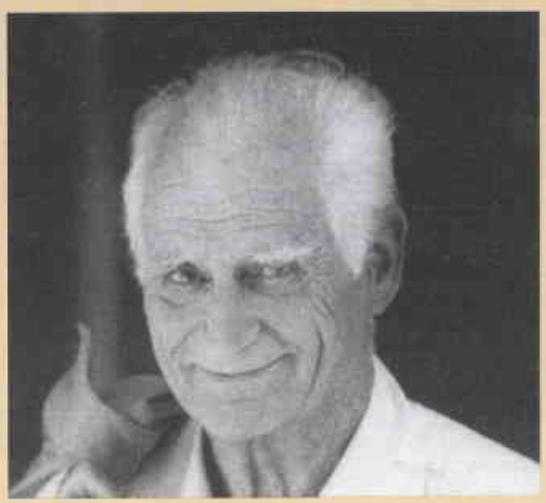
تؤدي مُفوضيّة الطاقة الذرّية الفرنسية CEA اليوم أكثر من أيّ وقت مضى دوراً في هذا التطوّر، وخاصة لتلبية حاجات تحقيق مركّبات القوّة الرادعة والمجمّع الفرنسي لتوليد الكهرباء النووية. إنّ أنشطة المفوضية في علوم الحياة والمادّة، كما في البحوث التقانية، قد تبعت أيضاً هذا المسعى وأحياناً سبقته. فكان من الطبيعي في الحالة هذه أن نُخصّص عدداً من مجلة Clefs CEA لمحاولةٍ غيّرت بعُمق عملَ الباحث، والمُهندس، وبشكل عام عمل الممارس.

وفي المجال الأعمّ، إن مُتابعة الأهداف الاجتماعية الكبيرة الحالية تتطلّب أكثر من أيّ وقت مضى اللجوء إلى المُحاكاة. سواء أكان المُراد فهم تطور المناخ أم التنبؤ به، أم تصميم مُعالَجات طبية جديدة، ووسائل تشخيص الأمراض، ومنظومات طاقيّة تأخذ بالحسبان مفهوم التطور المستديم، أو أيضاً التنفيذ واتخاذ القرار الصائب في الظُّروف الصعبة، وهكذا فإنّ المجموعة التي لا تنفصم: النظرية - النمذجة، والمُحاكاة الرقمية والتجريب موجودة في كل مكان.

وعلى التوازي، يمكن أن يكون التجريب محدوداً كميّاً بدون أن يُؤدّي إلى طريق مسدود بفضل النمذجة السلوكية المنوّه بها في هذا العدد. فالمُكلّف يجد في ذلك حسابه قبل المستخدم والمواطن، لأنّ "مردود" التجهيزات، وهي دوماً غالية الثّمن، ينقص نسبيّاً ببحث سريع وأكثر "ذكاءً"، كما يُوضّح ذلك مثال الوراثيات. وفيما يخصّ التجارب العالمية الماضية - وهذه هي حال التجارب النوويّة بعد الآن - فيُرجع إليها في ضوء آخر مكتسبات البحوث ونتائج الأدوات الجديدة في المحاكاة، مما يسمح بتقييم هذه الأخيرة.

المُحاكاة، تقنية جديدة وتقليد قديم

م. سـيـر
عضو الأكاديمية الفرنسية
أستاذ في جامعة ستانفورد (كاليفورنيا).



م. سـيـر

أن تدور الأشكال المطوية لبروتين معين وتنتشر ببطء على شاشة الحاسوب، لكي تسمح برؤية مواقع ما كان بإمكاننا ملاحظتها مباشرة وأن تقلّد النماذج على المدى الطويل تطوّر المناخ أو تقادم النفايات النووية وأن يعرض شكل آخر - بقدّ معكوس - التماس الذرّي لرأس زائد الحدّة مع سطح... تلك هي تطبيقات مألوفة، تُسمّى مُحاكاة، وقد يتطلبها واقع أن هذه الظواهر تفوق الشروط العاديّة للتجربة.

كيف نتناول، بالفعل، جزيئاً واحداً بل وذرّة واحدة فقط أو بالعكس كيف نتناول عدداً كبيراً من التقييدات عبر آلاف السنين، وكيف نتناول الكرة الأرضية بمجموعها، وبقاراتها وبحارها وغلافها الجوّي؟ الحق يقال، لا يقع أي شيء من كل ذلك في متناول اليد؛ فلا يمكن أن نتناول مقداراً بُعده أو مُدّته من رتبة الجيغا أو النانو مباشرة في المختبر. إنّ الأبعاد نفسها تحكم بضرورة هذه النمذجة في صور افتراضية. والتقانات الجديدة، بما لها من قدرة رقمية، هي وحدها، القادرة على تسريع الزمن، وتكبير الفضاءات، ومضاعفة الأبعاد، والتقييدات والتوصيلات، وباختصار إنّها تساهم في تمثيل ما لا يمكن تمثيله.

تحوّل في فلسفة العلوم

إن تقنيات المُحاكاة هذه، توسع حتّى مفهوم الظاهرة. فاستناداً إلى جملة المعادلات التفاضلية التي أوجدها لابلاس استطاع أن يبرهن مثلاً، على استقرار المنظومة الشمسية بتقريب جيد. وبعد قرن جعلنا بوانكاريه poincaré نشكّ في ذلك بدعاوٍ شهيرة، مع أنه قبل لابلاس كان لوشوفالييه داكري Le chevalier d' Acry، قد أشار منذ القرن الثامن عشر إلى أن مسألة الأجسام الثلاثة لا تقبل الاستكمال. ومع ذلك ما كنّا قطعاً نشكّ في الوضع الفلسفي لهذا الاستقرار أو عدمه إذ كان الأمر يتعلق بنتيجة رياضياتية، ميكانيكية، احتمالية... وما كنّا، بأي شكل من الأشكال، لنظن أنها "ظواهر"، ولا كُنّا لنتصور إمكانية إخضاعها "للتجربة"، لأن اختبارها أو مراقبتها يتطلب مئات الملايين من السنين.

تلك إحدى أفضل الحالات التي بها نفهم بوضوح ما بعده وضوح ما يعنيه الخروج من شروط التجربة الممكنة، فما من مختبر كان يمكنه تحضيرها أو تحقيقها. غير أنّ المحاكاة الرقمية تسمح تماماً بوصف سلوك الكواكب الصغيرة التي هي أكثر شواشيّة وبكثير من الكواكب الكبيرة، في هذه المدة الطويلة من الزمن. إنّ نتيجة "رياضياتية" صرفاً أو من الميكانيك السماوي تصبح عندئذ نوعاً من واقع،هو شبه ظاهرة، شبه قابلة للتجريب. فتتجاوز المحاكاة التصنيفات المألوفة في فلسفة العلوم وتجعلها مسامية.

احتراس: شروط كيفية

أليس من الأفضل أن يتدرب طبيب جرّاح على إجراء العملية الجراحية أولاً على صور افتراضية، قبل أن يقطع بالمبضع لحم المريض أو يكسر عظمه؛ أليس أولى كذلك أن ينفجر سلاح نووي على شاشة تلفاز من أن ينفجر في البيئة الواقعية؛ وأليس من الأفضل للمهندس المعماري أن يختبر بالمحاكاة مقاومة برج للهزّات الأرضية أو مقاومة قنطرة لها أو إحكام كتامة نفق ما، بدلاً من أن يجازف بالوقوع في خطأ، فيضطر إلى الهدم ثم إعادة البناء.

لذا سندع جانباً شروط التجربة من أجل أهدافها، أو نتائجها أو غايتها، ونتخلص من فلسفة العلوم من أجل الاقتصاد، ومن الجانب الكميّ الصرف من أجل اتقاء مجازفة محتملة أو خطر حقيقي... وباختصار إننّا ندخل علم الأخلاقيات.

تُجرى المُحاكاة للضرورة في حالة، وللاجتراس في حالة أخرى. وفي كلتا الحالتين يتوسع مفهوم التجربة نفسه.

أمحاولات هي أم صور؟

نعلم من مدّة طويلة التطبيق العملي للنماذج المصغّرة أو النماذج أو النماذج الأولية. وما كان مايكل أنج ينحت تمثالاً ولا يبني بناءً قبل أن يعرض على البابا جول الثاني، بالإضافة إلى خرائطه، مخططات إجمالية مصغّرة لمشاريعهما المشتركة. وهذا ما فعله كثيرون غيره وسيفعله آخرون تجاه أرباب عملهم. كذلك لا يتقرّر بناء سفينة بحرية أو صنع أشياء متماثلة إلا بعد أن يُجرَّب نموذج أولي، ذو الرقم صفر، ويختبر، ويُفحص... سواء أكان الأمر يعود إلى سفينة جديدة، أم إلى قلم كريّة (ناشف) أم إلى مسكن. إننا نجرّب دائماً على شاهد. وحقاً ثمة مجازفات: مثل مجازفة مفعول سلم القياس، لأن السفينة، يمكنها - بعد أن ينتهي بناؤها- أن تسلك في البحر بغير ما يسلك مصغّرها في حوض إصلاح السفن، أو مثل مجازفة الاستثنائي، لأن أي منتج فريد لا يماثل في النهاية منتجاً آخر مطلقاً. لكن هذا الشيء الشاهد موجود، فيمكن أن يلمسه الفنان ورب العمل والمهندس والعميل... وهكذا تُطَمْئن التجربة.

أما هنا فعلى العكس لاتوجد إلا صور. فمالا نستطيع فعله، نصوره، ومالا يمكننا تحقيقه - هذا الذي نخاف منه - نمثله. وهكذا يخرج الافتراضي من الواقع... فهل علينا أن نحكم هكذا على تقنيات المحاكاة؟ ألا تعترف هذه الكلمة بكتمان ما، تُفضي لعبته إلى الخيانة؟ وهل الانتقال إلى الصورة يُختصر إلى تراجع نحو الوهمي حيث العلوم المسماة تجريبية تفقد شيئاً من "الواقع"؟ ألمح أحياناً في أعين بعض القدامى هذا الشك المتعالي. يقولون، إنّ هذه الطرائق الجديدة، ستنقل عادات سيئة إلى الشبيبة؛ فتفقدها بذلك معنى المحسوس. فلن نرى يداً، ولا عجيناً، ولا يداً في العجين. ولكن ما الذي نفهمه من كلمات الممارسة العملية هذه ومن هذه الاستعارات الخبّازية؟

إنّ تاريخ العلوم يمكنه أن يجيب عن هذه الأسئلة، فهو يعتبر المعاصر قديماً جداً أحياناً ويكافىء القديم بالمقابل بأنه حديث نوعاً ما. كلا لا أظن أننا نمرّ هكذا فجأة واليوم فقط، من "الواقع" إلى "تمثيله". ليطمئن هؤلاء القدامى إذاً، وهم يفكرون بواقعهم الخاص، على المحسوس الذي مازالت أياديهم تعالجه، وليطمئنوا أخيراً على ما تعنيه التجربة.

إن تجربة الضغط الجوي لتوروشيللي يفترض أن يكون بيريه Périer قد أعادها على قمة بوي دو دوم بالحاح من باسكال. يمكن أن نتساءل هي الوقت الحاضر عمّا إذا لم تكن رواية هذه التجربة... محاكاة!

ما هذا الذي يُسمى التجربة؟

إلى أي تاريخ ترقى أول تجربة، حقيقية كانت أم مفترضة؟ فبحسب عدد من النصوص القديمة، يعود تاريخ أول تجربة إلى فيثاغورث نفسه. يقال إنه بعد أن سمع، مثل كل الناس، الأصوات التي تصدر عن حداد يطرق الحديد الحامي بالمطرقة على السندان، راح يبحث عن استعادة هذه الأصوات، فعلّق أثقالاً مختلفة إلى أوتار أخذت تهتز، وهكذا قاس لأول مرّة نسب مدروجات النغمات للفواصل الثلاثية، والرباعية، والخماسية... فكيف بدأت هذه التجربة، أليس بالمحاكاة؟ لقد استعاد فيثاغورث الأصوات بالانتقال من طرق الحديد على الفولاذ الرنان إلى الأوتار التي يهزها، أقول إذاً بالانتقال من المنفعل المدرَك إلى التوليد الفاعل للصوت، فهو إذ كان يحاول تقليدها، حاكاها. لقد استعان حقاً، بالأوتار والأثقال، وهي ملموسة ومقاومة؛ ويبقى أن نقول إن النسخ بهذه الوسائل "الجامدة" إنما يقلّد ويحاكي.

ما هذا الذي يسمى تجربة إذاً؟ عندما يدعوها الممارسون "المعالجة باليد"، يدركون أنّ هذه التسمية تفترض أنّ ثمة يداً وعجيناً قُبالتها. غير أن المعالجة اليدوية المذكورة لم تجر أبداً في الهواء الطلق أو في الطبيعة – كما يقال – أو على الأشياء بالذات، وإنما جرت مباشرة على عجينة قطعة الشمع التي ذكرها ديكارت مثلاً. أوقف فيثاغورث نزهته أو– كما يقال في الوقت الحاضر – ترك الساحة، متأملاً ودخل منزله، واسترجع الظاهرة التي يدرسها، ودقّق فيها، ثم أخلاها من الضجيج الطفيلي، فلم يجمعها كما هي أو كما استطاع معاينتها في بيئتها أو خارجها، بل أعاد توليدها وكررّ ذلك. ولكن تعني هذه الكلمات: مستعاد، ويقبل التكرار، إن لم تكن تعني أنّه يقبل التقليد وأنه يُحاكى.

لا أدري، في أي ذكرى سنوية حاولنا إعادة إجراء تجربة بليز باسكال الشهيرة حول الضغط الجوي، التي يزعم أنها أجريت على قمّة بوي دو دوم puy de Dome. طبعاً لقد فشلنا. إذ كيف يمكن أن ننقل في شروط معينة آنذاك، أي على ظهر حمار، عموداً سهل الكسر وغير متناه دون أن ينكسر، وفوق ذلك، مصنوعاً في السنوات الأولى من صناعة الزجاج اليدوية؟ لقد ارتبنا مباشرة في أن باسكال عكف على تجارب فكرية، مثل كثيرين غيره هنا وفي أمكنة أخرى. فكان يحاكي بالرواية كما نحاكي نحن بالحاسوب!

ومن الأفضل لإجراء هذا التجريب حقيقة كأي تجريب آخر، بناء حجيرات مستقلة، كما كانت تسمى قديماً، أي مختبرات غيرت فيها الأدوات المظهر والحجم شيئاً فشيئاً، عوضاً عن الانتقال إلى الميدان، حيث لا سيطرة على الشروط. ففي هذه البيئة الجديدة، عالية التجريد، والاصطناعية والتقنية والمشذبة وحتى المتقنة التعقيد، ماذا كان يفعل الفيزيائيون القدامى التقليديون، ومعهم أيضاً فيزيائيو القرن التاسع عشر والقرن العشرين، سوى أن ينسخوا، أي أن يقلدوا أو يحاكوا حوادث تجري في الهواء الطلق؟ فأين يوجد الحسي و"الواقعي"؟ في قمة بوي دو دوم أو على منضدة عمل؟ فعلى هذه المنضدة، ألم نبدأ بمحاكاة ما يجري هناك؟ أعيد القول، في المختبر يقلد الحدث بأدوات من الزجاج أو بأسلاك من الشبّه أو بقضبان من الحديد... وباختصار بوساطة أشياء قاسية وليس بإشارات أو بكودات، ممّا لا يمنع أبداً أن يتعلق الأمر دوماً بالنسخ، أي بالتقليد. أضف إلى ذلك، أنه يجب أن يتمكن أي فيزيائي من تكرار ذلك. هذا وأكرر بتأنٍ قراءة الجملة الشهيرة: "في الظروف ذاتها، تؤدي الأسباب ذاتها إلى الآثار ذاتها"؛ تتكرّر فيها ثلاث مرّات، الكلمة "ذاتها"، فتحمل حقاً موافقتنا على هذا المبدأ، لكن التمعن بمعناها يقضي من جديد التقليد. إن السيطرة القصوى على الشروط وعلى التنفيذ تضمن أمانة التكرار.

وأخيراً ماذا نعني بشروط التجربة؟ إنها مجموعة المتطلبات التي تجعل التجربة قابلة للتكرار، ومسيطراً عليها وأمينة لذاتها، أي لمتطلبات المحاكاة. فهل تفترض أي تجربة إذاً، على وجه ما، عدّة أنواع من المحاكاة؟ من يستطيع أن ينكر ذلك؟ إنّها تهجر "الواقع" كما هو منذ فجر الفيزياء التجريبية.

تغيرات الواقع

"راقب الإنسان دائماً الأحجار تسقط، وأدهشه صوت الرعد ورؤية قوس قزح، وتأمل روعة النجوم..." هذا هو النص المستهجن الأكثر تداولاً في تاريخ العلوم، والذي يمارس ببساطة: وبدون احتمال الوقوع في خطأ، فإنك تتعرف إلى الكتب السيئة من هذه الفاتحة. فكيف التخلص من هذه الحماقة؟ يتمّ ذلك بتكرار القول، في الوقت المناسب وغير المناسب، بأنه لم تكن توجد نجوم ولا سقوط أجسام ولا رعد بالنسبة إلى الكلدانيين ولا الصينيين ولا المصريين ولا أرسطو، على الرغم من أنّهم استعملوا أحياناً الكلمة ذاتها التي نستعملها، بالتقريب من حيث الترجمة، وإن السماء بحسب رؤيتهم لها ليست الواقع نفسه الذي هو عند الفيزيائيين الفلكيين في الوقت الحاضر، الذين لا تمتّ معطياتهم بأي صلة مع معطيات غاليله أو تيخو براها Tycho Brahé.. كان نيوتن يقدر عمر الكون بأربعة آلاف عام... هذا ولم يكن في اللغة اليونانية القديمة أي كلمة للتعبير عن "البركان"، علماً بأن إحدى أجمل الحضارات اليونانية اختفت بأجسامها وممتلكاتها في فوهة بركان جزيرة سانتورين...

إنّها محاكاة لتحرر اليود في الوسط الجيولوجي من موقع تخزين النفايات المشعّة، وفق سيناريو تلف العبوات. إنّ النمذجة لمدى بعيد وحدها هي القادرة على تقليد تقادم هذه النفايات على مدى آلاف السنين.

إن الواقع يتغير مع الممارسات والخوف، مع الأديان والأساطير، مع النظريات ووسائل المراقبة، مع الأدوات والأجهزة. وبالنتيجة فإن الإدراك المشترك والأشياء نفسها تغير من موضوعيتها. الألوهية، روح المتوفى، الثقب في درع من البرونز، منكب الجوزاء... والنجم يستغرق آلاف السنين ليصبح كما يبدو لنا في الوقت الحاضر: إنّه مجموعةٍ متطورة ومؤقتة من التفاعلات النوويّة. وهذا الذي يسمى "دائماً" لم يقع قط، وهذا "الإنسان" الثابت لم يعش في أي مكان، إن العالم والأشياء "الواقعية" تتغير مع الزمن المتغير في اتجاهات متغيرة.

هذا ولكل جيل، واقعه، أو تقريباً لكل جيل. تعرفت، في شبابي وهو غير بعيد كثيراً، إلى علماء، وليس أقل من علماء، كانوا في ذلك الوقت، ينكرون بعنف وجود الصفائح التكتونية أو جزيئات كيميائية حيوية كبيرة. فكانوا يتصورونها تخيّليّة، افتراضية... محاكاة! فلم يكونوا يُعبّرون بذلك إلا عن تخلّفهم وعن قرب تقاعدهم. فلم يكونوا يرون الواقع ينقلب. إن ما تسعى إليه تقنيات المحاكاة يبدو لي إذاً "واقعياً" أيضاً، أو قريباً من الواقعي، بالقدر الذي هو عليه واقع المتغطرسين القدامى الذين كانوا يعتقدون أنهم يتعاملون معه أكثر أو أفضل من خلفهم، لأنّهم كانوا يستعملون المساطر الحاسبة ولأنّ أولادهم اعتمدوا الحواسيب منذ نعومة أظفارهم. أجل يتعلق هذا الواقع هنا، بالقدرة على الحساب.

وهذا لا يعني أنه لا يوجد "واقع". فإن قلت ذلك، فأنا لا أتنازل للمذاهب النسبوية، وأنا لست غير واقعي، مثل أصحاب الآراء أو الأذواق، وأنا لست ثقافياً أو اجتماعياً، مثل أصحاب المذاهب الأيديولوجية، والقوانين، والمؤسسات والطبائع. فتغيُر الواقع لايعني تلاشيه. أعتقد أنه موجود وواعد كمهمّة لا نهاية لها، تتنازل دون توقف لمكتسباتنا مثل خط الأفق المُقارب، خلف الجانبيات المتتالية للنظريات والحقائق التي تكتشفها العلوم أثناء تاريخها. إن الواقع غائب في البدء، متغير مع الزمن، متقارب في النهاية، على الرغم من أن العلوم لا تعلم شيئاً عن قابلية النفاذ إليه. إنه موجود، فتنبؤاتنا الدقيقة وفعالية تطبيقاتنا تعطينا في كل يوم تأكيدات عليه لا تقهر.

تغيرات المختبرات

ينبغي إذاً تعريف أجيال من التجارب أو من المختبرات، مثلما يجري الحديث عن وجود أجيال من الحواسيب. إنها تتعلق كلها بحالة التقنيات، تتغير هذه التقنية مع الزمن الذي تتنامى معه دقة المحاكيات ومداها. فما الذي تشترك فيه حقاً الأجهزة الضخمة الموجودة في CERN وفي ما يسمى مختبر مدرستي الثانوية القديمة، حيث كانت آلة أتود Atwood تجاور جسر وطسطون؟ وما هو المشترك بين هذه الصالة وتلك الصالات التي يتصدرها المستوى المائل لغاليله، وميزان روبرفال ونصف كرة ماغدبورغ؟

كل حالة من حالات المختبر باعتبارها مكاناً للمحاكيات، أو نموذجاً مصغّراً لمجموعة فرعية، قُدّت جيداً من الطبيعة، تشير إلى عالم مختلف، عالم الميكانيك التقليدي، وعالم الكهرطيسية،

وعالم الفيزياء الكمومية... بينما كانت الأجيال السابقة تتوالى غالباً على حالة وحيدة من هذه الحالات، وإذاً أكون أنا قد عشت عدّة حالات من المختبر، حيث تكاثرت الحواسيب في الأخيرة منها. ومن جديد، هل يدخل الافتراضي في الواقعي أم هو الذي يخرجنا منه؟

ما هذا الذي يسمى الافتراضي؟

حسبما أعرف، إن استعمال هذا التعبير "أي الافتراضي" لم يظهر مع عصر الحواسيب. وإنّ الخيال الوهمي (الافتراضي) اعتُمد في علم الضوء منذ العصر التقليدي على الأقل؛ وإن الأعمال الافتراضية شغلت علماء الميكانيك منذ لاغرانج Lagrange؛ وإنّ الفيزياء الذريّة تعتمد هذا التعبير نفسه للنوى كما لإصدار جسيم ما. وقبل أن تولد الفيزياء بمعناها الدقيق، كان الافتراضي متوغلاً في علم الضوء وعلم الميكانيك، وأيضاً في علم الرياضيات المقطوع الصلة تقريباً بالتجربة. تدرس هذه الفروع الاختصاصية الثلاثة، "الواقع" حقاً لكنها تضمنه أيضاً "الممكن" منذ زمن طويل، فلا جديد تحت الشمس.

وأن تتعزز انطلاقة الممكن في الوقت الحاضر، وأن يتجاور مع ما يسمى "الواقع" ويحيط به أكثر فأكثر، ذاك هو فتح يعبّر عن واقعية العالم أكثر من نزعها عنه. ندرس دوماً هذه المسائل بمنطق تقليدي، حيث قاعدة الأساس تقابل الخاص بالعام والإيجاب بالسلب. أما أنا فأؤمن، بالمنطق المشروط: نتصور عالماً كائناً موجوداً ونجرب عليه، بتناول الممكن حتى حدود غير الممكن، وباكتشاف القوانين اللازمة. فقاعدة الأساليب – وهي أكثر مرونة من القديمة – تعبر عن منجزاتنا بشكل أفضل. وإذ تتابع المحاكيات بصبر ملامح مختلف المواقع وتنحت بعض الجزيئات الكبيرة المسببة لأمراض معيّنة، فإنها تسمح باكتشاف بل باختراع أدوية إن توضعت تماماً في الموقع المذكور تثبط الوظائف المهلكة. وحتى عندما يحصل الشفاء عن طريق صور محتملة، فما الذي يكون أكثر "واقعية" من هذا الشفاء، وإن كان غير أكيد؟ وما هو أكثر "واقعية" من تحاشي الحوادث الطارئة المحتمل وقوعها في المصانع النووية أو أمام طواقم تعمل تحت ضغوط عالية؟

ما هذا الذي يسمى المجرد؟

بمجرد أن يصبح الافتراضي كائناً في فلسفة العلوم (يأخذ حق المواطنة)، يحتل مباشرة مجالاً واسعاً يتوسط بين المجرّد من جهة، والمحسوس من جهة أخرى، بين النظرية والتطبيقات، بين الرياضيات والتقنيات بمعناها الدقيق. فكأنه رباط يربط بين ما لا يمكنني أن أضعه تحت نظري أبداً وبين ما يمكنني أن أتصوره. ويضطلع الافتراضي بهذه الوظيفة، كما في الصور الوهمية أو الأعمال الافتراضية التي قام بها أسلافنا، كذلك في محاكيات تطور المناخ أو في نمذجة الجزيئات الضخمة.

ولننظر إلى العكس، فما هو المجرّد أو النظري، إن لم يكن جملة الافتراضي الممكن؟ تعبّر الرياضيات عن الواقع، أي مجموع الممكن كلّه، بينما تقدم التجارب جانبيات للعالم المحتمل، وهكذا تخرج المحاكاة بالصور الوهمية المجرّدة من مملكته، لتعطينا هي الأخرى جانبيات عنه، ولكن، ومن جديد، ما هي التجربة، إن لم تكن تشويهاً للمجرّد، بحسب معنى بوبر Popper؟ إذاً للمحاكاة وضع يشبه وضع التجربة. وهذا ما أردت البرهان عليه.

إن المحاكاة توسع التجربة، وتغيّر في شروطها وأهدافها، وتقصّر الطريق بينها وبين النظرية، فتعطيها وجهاً آخر. يجب أن نفهمها على أنها امتداد أو تعميم للتجربة، ولكن هذا الوجه التجريبي تغيّر عدّة مرات على مر الأجيال. لاشك أننا تخطينا الآن مرحلة جديدة، ولكن على طريق يعترف تاريخ العلوم بأنها نظامية قويمة.

الأشباه

وفي الختام، لن أقاوم التمتع دوماً وأبداً بذكر الشاعر القديم لوقراسيوس lucréce الذي لم يعد الفيزيائيون يقرؤونه أبداً (وكان جان بيران يحفظه عن ظهر قلب) لأنه يكتب باللاتينية ولا يفهمه علماء اللغة اللاتينية أبداً لأنه انصرف إلى الاهتمام بالفيزياء الحقّة. فمنذ ألفي سنة، كان يدّعي أن إدراكنا يقتصر على أشباه الأشياء وكان يعني بها أغشية شافّة تنفصل عن الأشياء وتطير في الهواء، من الشيء المُدْرك إلى الشخص المُدْرك. وبفعل التحاكي تحتفظ بشكل هذه الأشياء وتأتي لتصدم العين بها. وعلى الرغم من غرابة هذا التفسير للإدراك، إلا أنه مع ذلك يلامس الحقيقة بعض الشيء: فالأشباه تحاكي الأشياء بالتشابه. إننا لا نعرف أبداً إلا بالتقليد. وبرؤيتي المواقع والثنيات في الجزيئات تتحرك أمام عيني المفتونتين، لا يسعني إلا أن أحلم، مع الشاعر القديم اللاتيني، وأردّد لترسل لي أشباهها.

* * *

الفهم والتصميم والتنفيذ هي الغايات الثلاث للمحاكاة

إ. كلاين
مديرية علوم المادّة - مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية (CEA) - مركز ساكلي

ملخص

المحاكاة بصفتها نشاطاً علمياً يمكن أن يظهر عليها سلفاً أنها تطرح وعوداً بقدر ما تطرح من مجازفات. فإن كان على الباحثين والمهندسين أن يظلّوا واعين لحدودها، فإنّهم بها يتجهزون بأداة لا يستعاض عنها لتخطّي نواقص التجريب أو استحالات تحقيقه.

الكلمات المفتاحية: محاكاة، تجريب، نمذجة، نظرية.

المُحاكاة الرقمية للأعاصير التي تخلفها طائرة نقل وراءها. في علم التحريك الهوائي، يدرس صانعو الطائرات، منذ زمن بعيد، في النفق الهوائي، الجريانات حول نماذج مصغّرة.

في المُعجم الفرنسي، حاكاه[1]، "أظهر غير الواقعي على أنه واقعي، بتقليد مظهر الشيء الواقعي المراد الإقناع به" وفي اللغة الدارجة تحمل المحاكاة غالباً معنىً سلبياً، فلها علاقة بالتصنّع والتنكّر، والمكر والهزل. وتتميّز عن العمل الإيمائي بأنها ليست مجرد نسخة ولا مجرد استنساخ. فهي تعتمد عموماً، على تقليد الأصل مع إدخال بعض التغييرات عليه. من هُنا تأتي ازدواجية المُحاكاة، فهي في الوقت نفسه لعب وممارسة، وخداع ومُروءة، وتظاهر وفنّ وإخفاء وتعلّم. فتبدو مولدة أوهام من جهة، وضمانة إتقان واكتشاف من جهة أخرى.

(1) ورد في المعجم الوسيط حاكاه: شابهه في القول أو الفعل أو غيرهما.

زيادة على الواقع أم إنقاص منه؟؟

تصادف بعض هذه الجوانب في استخدام العلوم للمحاكاة. وتُحيل المُحاكاة هنا أيضاً إلى فكرة التقليد. فهي بالفعل تقليد "مُربَّع" للطبيعة بمعنى أن الذي يُستَنْسَخ ليس الطبيعة نفسها، بل النموذج الذي اخترناه مسبقاً ليمثلها. فهي تعرض "زيادة على الواقع"، بأن تجعل صريحاً واضحاً ما هو ضمني أو ممّوه في إحدى النظريات أو أحد النماذج. إن المحاكاة الجيدة تقوم بعملية كشف وإبانة.

لكن قد يحدث بالعكس أيضاً، لسوء تسيير أو لسوء تفسير، ألا تبين المُحاكاة إلاّ نقصاً وهمياً من الواقع أو مسخاً ساخراً مفرطاً لصورة ما يفترض فيها أن توضحه. فيمكن مثلاً أن تتخطّى حدود النموذج، أو تخرج عن ميدان صلاحيته، أو تنسى ظاهرة أساسيّة، من دون أن تَصدُر فوراً أيّ إشارة إنذار. إن المحاكاة السيئة تولّد الظلال الأشباح.

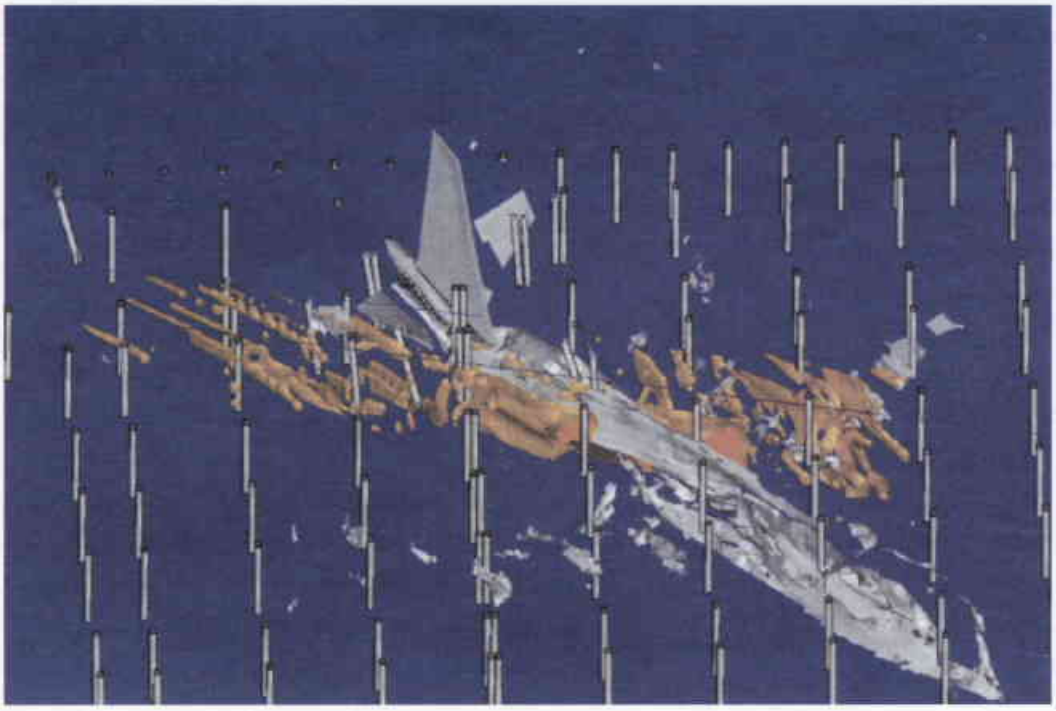
وبما أن النموذج الذي يُعدّ حاملاً للنمذجة يكون دائماً غير كامل، فلا يمكن لها أن تدّعي الكماليّة لنفسها قط. فما تسمح برؤيته، إنما هو في أفضل الحالات نتف أمينة للواقع، ولكنها مصفّاة أو مبسّطة. وستُترك مظاهر أخرى من هذا الواقع قابعةً في الظلّ. وعلى الرغم من معنى الكلمات، فثمّة جزء من المحاكاة مرتبط بالإخفاء فهل هذا الأمر خطير؟ لا، لأن ما من شيء يُفقد، مادام ما تخبئه أو تهمله المحاكاة ليس وثيق الصلّة بإطار المسألة المطروحة. ومن جهة أخرى، فما هو النموذج الجيّد، إن لم يكن النموذج الذي يحوي أقل المكوّنات اللازمة لإظهار الشموليّة بالنسبة إلى ما نرغب في توصيفه أو فهمه؟

وعلى العموم، فإن الفعل يحاكي، يعني لرجلِ العلْم، القيام "بتجريبيات على نموذج"، فيحقق نَسْخاً اصطناعياً للظاهرة التي يريد دراستها، وبعدئذ يُراقب سلوك هذا النَسْخ عندما يُغيّر الأفعال التي يمكن تطبيقها عليه، ويُحرِّض فيها ما قد يجري في الواقع تحت تأثير أفعال مماثلة. في التطبيق العملي، تؤول هذه المنهجية إلى عدّة بدائل تتمتّع بمزايا مختلفة. لنتفحّص بعضاً منها.

دخول قطاعات مجهولة تجريبياً

في المحاكاة بدايةً بُعدُ استكشافي. فهي تبيّن مالا تبينه الصياغات المجردة مباشرة، وتعطي المعادلات معناها المادي، وتكسو النظريات لحمتها، وتُنطق المفاهيمَ، وتُضعف تطبيقاتها المحسوسة (غالباً بشكل جمالي جداً). فتجعلها هذه المزيّة أحياناً ضرورة لا غنى عنها. إنّها الحالة التي تكون فيها المعادلات مُعقَّدة جداً. وهي أيضاً الحالة التي لا يمكن فيها اختيار ما تتنبأ به نظرية ما بالتجربة المباشرة، لاعتبارات أخلاقية، أو لمقتضيات زمانية، أو لتقييدات في الميزانية، أو لعوائق طبيعية. وهكذا، تسمح المُحاكاة بتوصيف ما يجري في لبّ نجم أو في تصادم المجرّات، وبإعادة صورة ما كان عليه

من بين التطبيقات العملية للمحاكاة أنها تسمح بتحديد التشكيلة المثلى لشبكة طرقات



في الأعلى، المحاكاة الجيدة تجلب قدراً من المعلومات أكبر مما تجلبه تجربة شاملة تحضيرها غير كافٍ وتكرارها صعب، بسبب تكلفتها على الأقل.

محاكاة تدمير طائرة البوينغ 757 التي خرقت أبنية البنتاغون عند اعتداءات 11 أيلول 2001. وهذه المحاكاة التي نفذها، انطلاقاً من قوانين فيزيائية، باحثون من جامعة بيردو Perdue ومهندسون مدنيّون، تُظهر كيف سحقت دعامات الإسمنت المسلّح بالفولاذ الطائرة، وخاصة أجنحتها، وكيف انتشر الكيروسين المُلتهب (باللون البرتقالي).

في الأسفل، تجربة تحطيم إرادي لطائرة بوينغ 720، نفذتها في الأول من كانون الأول 1984 هيئة ناسا NASA في قاعدة إدوارد (كاليفورنيا)، وكانت تهدف بشكل خاصّ إلى اختبار مادة إضافية يفترض فيها أن تحدّ من قابلية اشتعال الكيروسين. وكانت التجربة بعيدة عن أداء كل النتائج المأمولة.

المناخ قبل مئة ألف سنة، واستقراء بعض العمليات الفيزيائية استقراءً خارجياً على مدى طويل جداً، وتحديد التشكيلة المثلى لشبكة طرقات، وتوقّع أثَر مختلف التدابير الاقتصادية في الاستهلاك أو في التوفير. وعندما يتصل الأمر بقطاعات مجهولة تجريبياً، تُصبح المُحاكاة أداة لا بديل منها. فإجراء محاكاة جيدة يعني في نهاية المطاف، التزوّد بوسائل تساعد على فهم أحسن، وتصميم أفضل، وخاصة على تنفيذ أحسن. والمحاكاة أيضاً حاسمة في الحالات التي لا تتوفّر فيها قواعد نظريّة راسخة، وحيث نبحث خاصة في إعداد نظريّة تأخذ بالحسبان مُعطيات الملاحظة. فيمكن عندئذ أن نُحدّد بدقة النتائج المحسوسة لمختلف النماذج النظريّة الممكنة، وتحديد أيّ منها يُؤدّي إلى التقريب الأكثر وثوقاً، ومن ثم فهم بعض العمليات، وحتى استمثالها.

ليست المحاكاة رقمية حصراً. بل يمكنها أن تكون "تماثلية". فيمكن مثلاً أن نستعمل قوانين سلّم القياس التي تدخل أعداداً لا أبعاد لها لإجراء تجارب في السلالم الصغيرة وبالتالي شرح الظواهر، التي تجري في الطبيعة، في سلمّ كبير أو في مدد طويلة جداً. وهكذا يحاكى الحَمْل الحراري في غلاف الأرض بدراسة حركات الموائع في أوعية مملوءة بمائع لزج مُسخَّن. ويمكن كذلك محاكاة جريان الموائع على مُجسَّم للتنبؤ بالمُناخ. وفي علم التحريك الهوائي، يمكن في النفق الهوائي،إعطاء الملامح الرئيسية للجريانات الهوائية حول نموذج طائرة مُصغّر. ويمكن إتمام هذه المُحاكَيات التماثلية بمحاكيات رقمية تنقص من تكلفتها وعددها.

وتسمح المحاكاة أخيراً بتشغيل منظومة (إنسان آلي، طائرة، محطّة نووية) بشكل افتراضي بمساعدة برنامج حاسوبي. والمبدأ بسيط: فإذا حوى البرنامج جميع أنماط السلوك لمختلف المنظومات الفرعية، يمكن عندئذ للمشغّل

أن يعمل كما لو كان الأمر يتعلّق بمنظومة واقعية. وإلى هذه الفكرة تستند المُحاكيات الأكثر تقليدية (الطيران، وحركة المرور، والإرشاد الملاحي...). إن وظيفة المحاكيات هي تدريب العاملين، والمساعدة على اتخاذ القرار أو التصرف في البيئة الحقيقية، بل وعلى توقع سلوك منظومة في بيئة لا ينفذ الإنسان إليها.

ما بين النظريّة والتجربة

وكما يتضح، فالمُحاكاة تتكشّف عن وُجَيْهات مُتعدّدة.فما هو وَضْعها المعرفي؟ فلا هو وَضْع النظرية، ولا هو وضع التجربة. لقد أدخلت المُحاكاة فعلاً ودون أي اعتراض، علاقة جديدة حيال تصوّرنا للعالم. وحتّى في الخمسينيات، كانت النظرية والتجربة تُعرضان كفاعليتين مرتبطتين جدليّاً (جاستون باشلار، G. Bachelord كارل بوبر K. Popper). وكانت الفكرة تقول إن العِلم ينشأ من حركةَ ذهاب وإيّاب مستمرة بين إحداهما والأخرى. وقد تغيّرت هذه المعطاة مع قدوم الحواسيب والحساب الرقمي بكميات ضخمة إلى درجة أن أسئلة جديدة صارت تطرح في الوقت الحاضر: فهل يُمكن أن يكون للمُحاكيات نفس وضع التجارب؟ وهل تُصبح المحاكيات قادرة، عند الحاجة، على تزييف النظرية؟ وهل تسمح المُحاكيات بفهم النماذج التي توضّحها فهماً أفضل؟ أمّا المفعول الإيجابي للمحاكاة، الحريص على التوفير في الوقت والمال، وحتّى على الوصول إلى وقائع مؤذية أو خطرة بإسهام الحقائق الافتراضية، أفلا ينبغي أن يوازن بخطر الهرب من أمام الواقع والتجريب الحسّي؟ ويبقى أن نذكر أن المُحاكاة قد غيّرت تدريجياً وظيفة الواقع في العلوم. لقد كان رجال العلم سابقاً يتصدّون لواقع كانوا يعتقدون أنهم متأكدون منه، واقع أصلي وأصيل لا يخرق وليس خيالياً. أما اليوم، فإن طبيعة هذا الواقع نفسها هي في وضع يتحوّل بالاستعمال المُعَمَّم للمحاكيات، والنمذجات والسيناريوهات. في الماضي كان الواقع هو تارةً الموضوع، والعائق تارة أخرى، والمعيار في تارة، واختبار العلم في تارة أخرى. أما من الآن وصاعداً، فيحيط الواقع نفسه بالافتراضي حتى أن أكفّته لم تعد ثابتة. إن العلم المُحاكي يعالج الممكن ولا يعالج فقط ما هو موجود.

المحاكاة كمنهجية للبحث والتطوير

ديديه بسنار
مدير البرنامج المحاكاة
مديرية التطبيقات العسكرية
مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية (مركز DAM ـ إيل دو فرانس)

ملخص

إنّ البحث العلمي، الذي ينتظم تقليدياً وفق جَدَلية النظرية والتجربة، اتخذ شيئاً فشيئاً بنية ثلاثية تجمع النظرية والنمذجة معاً، ثم المحاكاة الرقمية فالتحقق التجريبي. إن منهجية المحاكاة هذه، في مستويات نضج مختلفة حسب القطاعات، تفرض نفسها اليوم في كل مكان.

الكلمات المفتاحية: منهجية المحاكاة، جدلية النظرية / التجربة، المحاكاة الرقمية، الإقرار بالصلاحية، نمذجة المناخ.

التلافي، كما يرى بالتلسكوب (المرقاب) الفضائي هبل Hubble، بين المجرّتين الحلزونيتين NGC 2207 (إلى اليسار) وIC 2163 (إلى اليمين). بإمكان الباحثين بعد الآن محاكاة تصادم مجرّتين رقمياً لتفهم بعض البنى المشاهدة بفضل المقاريب العملاقة.

إنّ أحد الأساليب التي تُعتمد لتطوير المعرفة العلمية هو طرح تفسيرات عقلانية للحوادث الطبيعية بإعداد النماذج الموافقة. ومشاريع العمل الذهني هذه، المختصرة بالنسبة إلى الواقع، توحي بها ملاحظات تجريبية، كما أنها تثير هي التجارب بنفسها. فالنموذج إذن هو تجريد للواقع، وكلّما نضجت الأفكار أمكن تشذيبه تدريجياً (من نظرية نيوتن في سقوط الأجسام إلى النسبية العامة لأينشتاين، مثلاً) ويعبَّر عنه بمعادلات رياضية. ففي أبسط الحالات، يمكن أن تُحلَّ المعادلات بطرائق تحليلية. ولكن الأمر، على العموم، ليس ممكناً. وللبرهان على درجة ملاءمة النموذج بالنسبة إلى المعطيات التجريبية، ينبغي في الغالب أن تحل المعادلات بواسطة الحاسوب.

وهكذا، تبرز فجأة المحاكاة الرقمية في جدلية النظرية /التجربة، التي هي في قلب المسيرة العلمية (المؤطر A ما هي المحاكاة الرقمية؟). وهكذا تكتسح المحاكاة الرقمية شيئاً فشيئاً ساحة المعرفة وتنقص من إمكانات التقصي لدى الباحثين. فيمكنهم، مثلاً، محاكاة التصادم بين مجرّتين حتى يمكن تحسين فهم بعض البنى التي تُلاحظ بالمَقاريب (الراصدات) العملاقة.

ثلاثية غير مرتّبة

إن دورة البحث العلمي تصبح، عندئذٍ، على النحو الآتي: نظرية ونمذجة، ثم محاكاة رقمية فتحقّق تجريبي. وهذا ما ندعوه هنا منهجية المحاكاة.

وفي الواقع، إنّ المعرفة العملية الفيزيائية أو مجموعة العمليات المدروسة تجمّع في برمجية تسمح بحل معادلات النماذج الموضوعة مُسبْقاً. فكيف تقرُّ صلاحية هذه البرمجية؟ يتم ذلك فعلاً، بمحاكاة العملية التي نعتقد أنها أدت إلى الظاهرة الملاحظة. فإذا جاءت النتائج العددية والتجريبية متقاربة، يُعدّ النموذج الذي تعبر عنه البرمجية نموذجاً صالحاً، بدرجة التقريب المختارة. وغالباً ما يكون هذا الإقرار بالصلاحية معقداً لأن ثمّة عدّة عمليات تشترك معاً؛ لذا ينبغي التصرف خطوة فخطوة، والبرهان على أنّ كلّ نموذج عنصري من التوصيف الإجمالي هو نموذج مرض. إن هذا الإقرار بالصلاحية مجزأ، وينبغي بعدئذٍ، إقرار صلاحية المجموعة بإجمالها، وهذا يقتضي

المؤطر A- ما هي المحاكاة الرقمية؟

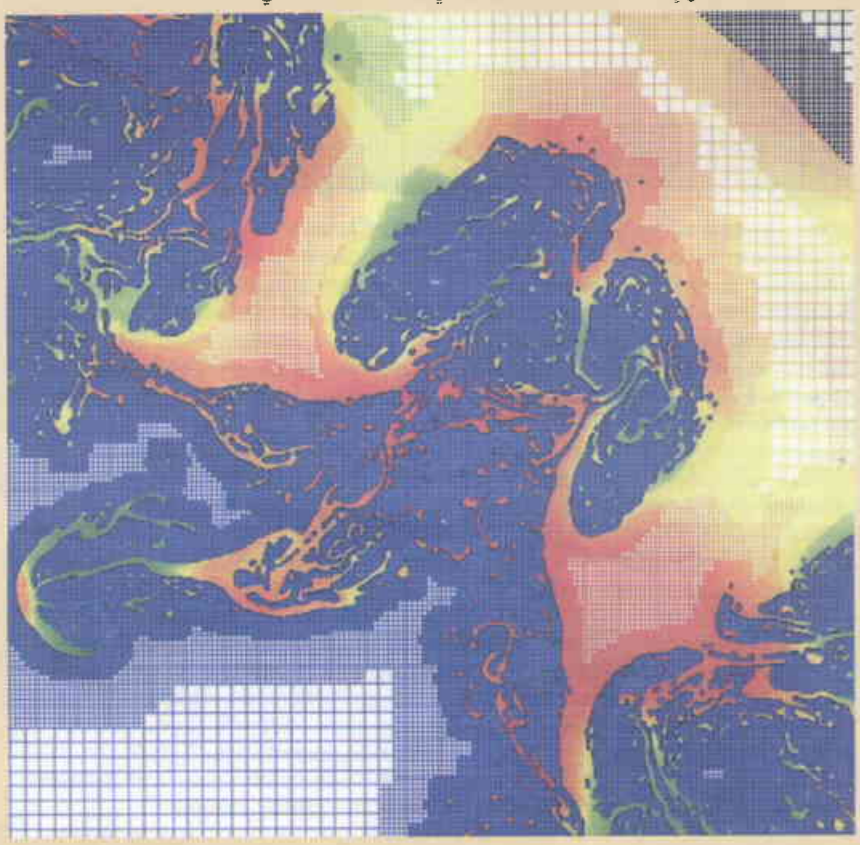
تقوم المحاكاة الرقمية على تقليد عمل منظومة بالحساب، كانت موصوفة مُسْبقاً بمجموعة من النماذج. وتستند المحاكاة إلى طرائق رياضية ومعلوماتية نوعية. إن المراحل الرئيسية لتنفيذ دراسة بالمحاكاة الرقمية هي مشتركة في عدّة قطاعات من البحث والصناعة، بخاصة القطاع النووي أو الفضائي الجوي أو السيارات.

في كل نقطة من "الجسم" المفروض، ثمة عدّة مقادير فيزيائية (هناك سرعة، ودرجة حرارة...) تصف حالة المنظومة المدروسة وتطورها. وليست هذه المقادير مستقلة بعضها عن بعض، بل مرتبطة وتنظمها معادلات، هي على العموم معادلات تفاضلية جزئية. تشكل هذه المعادلات الترجمة الرياضية لقوانين الفيزياء التي تنمذج سلوك الجسم. فمحاكاة حالة هذا الأخير، إنما هي تحديد القيم العددية لوسطائه، في كل نقطة في الحالة المثالية. وبما أنّ هناك عدداً لا نهائياً من النقاط، فثمّة عدد لا متناه من القيم ينبغي حسابها، وهذا الهدف لا يمكن بلوغه (إلا في حالات خاصة جداً حيث يمكن أن تحلّ معادلات الانطلاق بمساعدة صيغ تحليلية). وهناك تقريب طبيعي يقوم على ألاّ نأخذ بالاعتبار إلا عدداً منتهياً من النقاط، وهكذا يصبح عدد قيم الوسطاء المراد حسابها منتهياً. كما تصبح العمليات الضرورية يسيرة المنال بفضل الحاسوب. والعدد الفعلي من النقاط التي تعالج، يتوقف بكل تأكيد على استطاعة الحاسوب؛ وكلما كان هذا العدد مرتفعاً، كان وصف الجسم في النهاية أفضل. ففي أساس حساب الوسطاء كما في أساس المحاكاة الرقمية، ثمة إذن تقليص اللانهائي إلى النهائي، أي هناك تقطّع (استعمال قيم متقطعة).

وكيف نعمل بالضبط بدءاً من المعادلات الرياضية للنموذج؟ ثمة طريقتان تستعملان غالباً، وهما تمثلان على التوالي إما طرائق الحساب الحتمي، التي تحل المعادلات التي تحكم الظواهر المدروسة بعد أن تُقَطَّع المتحولات، وإما طرائق الحساب الإحصائي أو الاحتمالي.

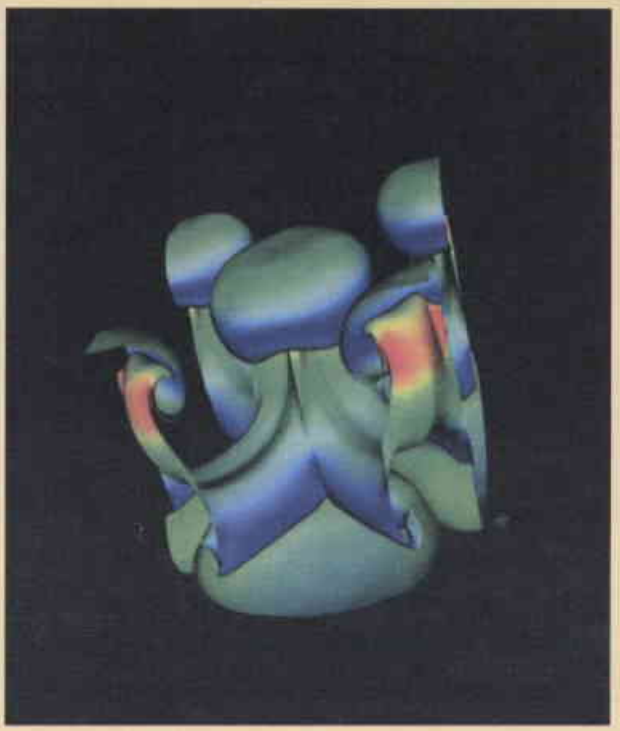
عرفت الطريقة الأولى باسم طريقة الحجوم المنتهية، وقد سبقت في مبدئها استعمال الحواسيب. تمثل فيها كل نقطة من الجسم ببساطة بحجم صغير عنصري (مكعب مثلاً)، ومن هنا أتى مصطلح الحجم المنتهي. فالبلازما مثلاً، ينظر إليها على أنّها مجموعة أو شبكة من الحجوم المتلاصقة، وقياساً بالمشابهة مع لُحْمة نسيج ما، تدعى المشبَّك. وهكذا تصبح وسطاء حالة الجسم محدودة في كل عروة من المشبَّك. فيصبح من الممكن لكل منها، أن تصاغ من جديد المعادلات الرياضية للنموذج بمقادير حجمية متوسطة، وبالتالي يمكن إنشاء علاقات جبرية بين وسطاء العروة وبين وسطاء العرى المجاورة لها. وبالإجمال، ستكون هناك علاقات بقدر الوسطاء المجهولة، وعلى الحاسوب أن يحل جملة العلاقات الحاصلة. فينبغي لذلك أن نلجأ إلى تقنيات التحليل العددي وأن نبرمج خوارزميات نوعية.

هذا، وإن تنامي قدرات الحواسيب يسمح بزيادة دقة التقطّع، مما يسمح بالانتقال من عدّة عشرات من العُرى في الستينيات إلى عدة عشرات الآلاف في الثمانينيات، فإلى الملايين في التسعينيات وإلى عشرة مليارات عروة الآن (مكنة تيرا Tera لمديرية التطبيقات العسكرية في مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية)، وينبغي أن يضرب هذا العدد بعشرة في نهاية العقد الحالي.



مثال لصورة محاكاة ذات بعدين اثنين من اللاستقرار تمّ تحقيقها بالحاسوب الفائق تيرا Tera في مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية تمّ الحساب بمساعدة التشبيك التلاؤمي، والذي يكون أكثر دقة في المناطق التي تكون فيها الحوادث هي الأكثر تعقيداً.

إن زيادة دقة نعومة المشبّك، أي التشبيك التلاؤمي، يعني إحكام حجم العُرى بتابعية الظروف، كأن نجعلها، مثلاً، أصغر وأكثر تراصّاً عند السطوح البينية بين وسطين، حيث الظواهر الفيزيائية هي الأكثر تعقيداً، أو حيث التغيرات هي الأكثر أهمية.



الشكل 3- محاكاة ثلاثية الأبعاد، تحققت بالحاسوب الفائق تيرا، الذي أنشىء في نهاية 2001 في مركز مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية.

وتطبق طريقة الحجوم المنتهية في مجالات فيزيائية ورياضية مختلفة جداً. وتجيز أي شكل تأخذه العروة (مكعب، سداسي الوجوه، رباعي الوجوه...) ويمكن تعديل المشبّك أثناء الحساب، بتابعية المعايير الهندسية أو الفيزيائية. وأخيراً، من السهل أن نستعمل في السياق حواسيب متوازية (المؤطرB، الوسائل المعلوماتية عالية الأداء للمحاكاة الرقمية)، علماً بأن المشبّك يمكنه في الواقع أن يكون موضوع تقطيع لحسابات تجرى على هذا النوع من الآلات (مثال الشكل B).

هذا، وتنتمي إلى الزمرة نفسها طريقة الفروق المنتهية، وهي حالة خاصة من طريقة الحجوم المنتهية، حيث أضلاع العُرى متعامدة، وكذلك طريقة العناصر المنتهية يمكنها أن تجاور أنواعاً مختلفة من العُرى. والطريقة الكبيرة الثانية، يقال لها طريقة مونت - كارلو، وهي تتلاءم بخاصة مع محاكاة نقل الجسيمات، مثل النترونات أو الفوتونات في البلازما (راجع عمليات المحاكاة في فيزياء الجسيمات). ويتميز،في الواقع، هذا النقل بسلسلة متوالية من المراحل، يستطيع أي جسيم أن يعاني أثناءها حوادث مختلفة ممكنة سلفاً (انتثار، امتصاص، إصدار...). إنّ الاحتمالات الأولية لكل من هذه الحوادث معروفة لكل جسيم على حدة.

فمن الطبيعي في الحالة هذه أن تشبَّه نقطة من البلازما بجسيم. وهكذا تؤلف مجموعة من الجسيمات، عددها منته، عيّنةً تمثل جسيمات البلازما اللانهائية، كما هو الأمر عند السبر الإحصائي. هذا، ويتحدّد تطور العينة، من مرحلة إلى أخرى، بفضل سحوبات اعتباطية تعتمد على الحظ (من هنا تُشتق تسمية الطريقة). إنّ فعالية هذه الطريقة التي استخدمت في لوس ألاموس Los Alamos في بدايات الأربعينيات، تتعلق طبعاً بالجودة الإحصائية للسحوبات الاعتباطية. وتحقيقاً لذلك، هناك طرائق الأعداد العشوائية، التي تتلاءم جيداً مع المعالجة بالحاسوب.

إن طريقتي الحجوم المنتهية ومونت ـ كارلو قد أثارتا وتثيران دراسات رياضية عديدة. وتتمسك هذه الدراسات خاصة بتبيان تقارب هاتين الطريقتين، أي كيف تتغير دقة التقريب مع عدد العُرى أو الجسيمات. إن طرح هذا السؤال طبيعي أثناء مقارنة نتائج المحاكاة الرقمية بنتائج التجربة.

كيف تجري محاكاة رقمية؟

غالباً ما تُطرح مسألة التجربة العددية لتشدد على التشابه بين ممارسة المحاكاة الرقمية وبين إجراء تجربة فيزيائية.

وباختصار، تستخدم هذه الأخيرة جهازاً تجريبياً، جرى تشكيله وفق شروط ابتدائية (من درجة حرارة، وضغط...) ووسطاء تحكم (مدّة التجربة، والقياسات...). يعرض الجهاز، أثناء التجربة، نقاط قياس يجري تسجيلها. ثم تُحلل هذه التسجيلات وتفسر.

وفي المحاكاة الرقمية، يتضمن الجهاز التجريبي مجموعة من البرامج المعلوماتية التي تنفذ على الحاسوب. إن الكودات أو برمجيات الحساب هي ترجمة الصياغات الرياضية، للنماذج الفيزيائية المدورسة، عبر الخوارزميات الرقمية. وفي مقدمة الحساب وفي نهايته، تقوم برمجيات البيئة بإدارة عدة عمليات معقدة في تحضير الحسابات ومراجعتها بإمعان.

وتتضمن المعطيات الأولية للمحاكاة في بداية الأمر تحديد حدود قطاع الحساب انطلاقاً من تمثيل تقريبي للأشكال الهندسية (ينتج بالرسم والتصميم بمساعدة الحاسوب (CAO))، ثم يتبعه تقطع قطاع الحساب هذا على مشبّك، ومعه قيم الوسطاء الفيزيائية على المشبّك نفسه ووسطاء التحكم في حسن سير البرامج... ومن ثم تتناول الكودات جميع هذه المعطيات (التي تنتجها برمجيات البيئة وتديرها) وتتحقق من صحتها. وتُحفظ شيئاً فشيئاً نتائج الحسابات بحد ذاتها،

أي القيم العددية للوسطاء الفيزيائية. وفي الواقع، ثمة بروتوكول نوعي يرتّب المعلومات الناتجة من الحاسوب لكي تنشأ قاعدة للمعطيات العدديّة.

وهناك بروتوكول كامل يُنظم التبادل المحوسب للمعلومات المطلوبة (بخاصة الأبعاد) وفق أنساق محددة سلفاً: المنمذج [1]، المشبّك [2]، مقطّع التشبيك، كود الحسابات، برمجية الإراءة والتحليل. إن دراسات حساسية النتائج (في التشبيك وفي النماذج) جزء من "التجارب" العددية.

هذا، وعقب الحسابات (الحل العددي للمعادلات التي تصف الظواهر الفيزيائية التي تجري في كل عروة)، فإن تحليل النتائج الذي يقوم به الاختصاصيون يقوم على الاستفادة من قاعدة المعطيات العددية. ويتضمن هذا، عدّة مراحل: استخراج انتقائي للمعطيات (بحسب الوسيط الفيزيائي المطلوب) وإراءة المعطيات، واستخراجها ونقلها وذلك لحساب التشخيصات وإراءتها.

فالمقارنة بين إجراء حالة حساب، وتجربة عددية وبين إجراء تجربة فيزيائية لا تتوقف هنا؛ فالنتائج العددية ستقارن بالنتائج التجريبية. إن هذا التحليل المقارن، الذي يجري على قاعدة المعايير الكمية المعيارية، يستعين بخبرة ومهارة المهندس، والفيزيائي، وعالم الرياضيات. فيؤدي إلى تحسينات جديدة في النماذج الفيزيائية للمحاكاة وبرامجها المعلوماتية.

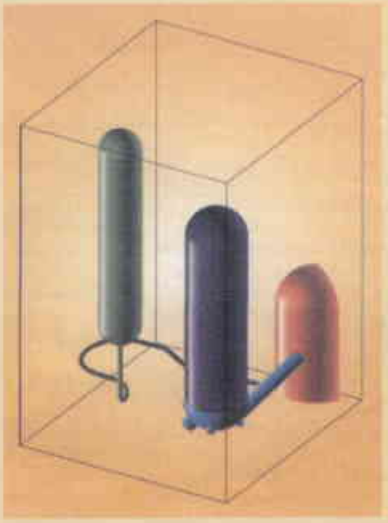
(1) المنمذج: أداة تسمح بتوليد النقاط وانشاء المنحنيات والسطوح ومعالجتها بغية توليد مشبك معين مثلاً.
(2) توصف الأشكال الهندسية للمشبك بمجموعات من النقاط متصلة ببعضها بمنحنيات وسطوح تمثل الحدود.

بروتو ستوريز
مديرية التطبيقات العسكرية - مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية - إيل دوفرانس
فريدريك دوكرو - أوليريش بيدر
مديرية الطاقة النووية - مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية - مركز غرونوبل

مثال على حساب يُجرى في ترموديناميك السوائل

إن تنفيذ بروتوكول في المحاكاة الرقمية يمكن أن توضحه الأعمال التي قام بها فريق تطوير برمجيات الحساب في ترموديناميك السوائل أعني فريق تريو أو (Trio U). جرت هذه الأعمال في إطار دراسة تمّت بمشاركة معهد الوقاية من الإشعاع والأمان النووي (IRSN). وكان الهدف هو الحصول على معطيات دقيقة جداً بغية تزويد المهندس بالتغيرات الطفيفة جداً في درجة الحرارة عند جدار مركّبات المفاعل بالماء المضغوط في حالة حادث خطير يفرض جرياناً طبيعياً دوّامياً للغازات الساخنة. تتطلب هذه الدراسة النمذجة في آن واحد لمفاعيل "الجملة" في المقياس الكبير وللحوادث الدوامية في المقياس الصغير (المؤطر F، نمذجة ومحاكاة الجريان الدوامي).

تبدأ الدراسة بتعريف نموذج الحساب الإجمالي (الشكل A)، ثم يستتبع ذلك تحقيق النموذج CAO (التصميم بمساعدة الحاسوب) والتشبيك الموافق بمساعدة برمجيات التجارة (الشكل B). هذا، وتتطلب التشابيك ذات الأكثر من خمسة ملايين عروة استعمال محطات للرسم البياني قوية. ففي هذا المثال، قُطّع المُشَبّك الخاص بمولد البخار (الشكلان C وD) لتوزيع الحسابات على ثمانية معالجات لحاسوب على التوازي في مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية: ويرمز كل لون إلى المنطقة المعيّنة لمعالج خاص. إن الحسابات، التي شروطها الحدّية تعطى بحساب "جملة" (إكار - كتر Icare-Cathare)، تعطي نتائج يعود تفسيرها إلى الاختصاصيين. وبالمناسبة، تظهر الإراءة في محطات الرسم البياني للقيم الآنية لحقول السرعة أثر تموج ساخن على الصفيحة الأنبوبية الشكل لمولد البخار (مقطع في حقل السرع إلى يسار الشكل E) ودرجة الحرارة الآنية في حُقّة الماء (إلى اليمين).

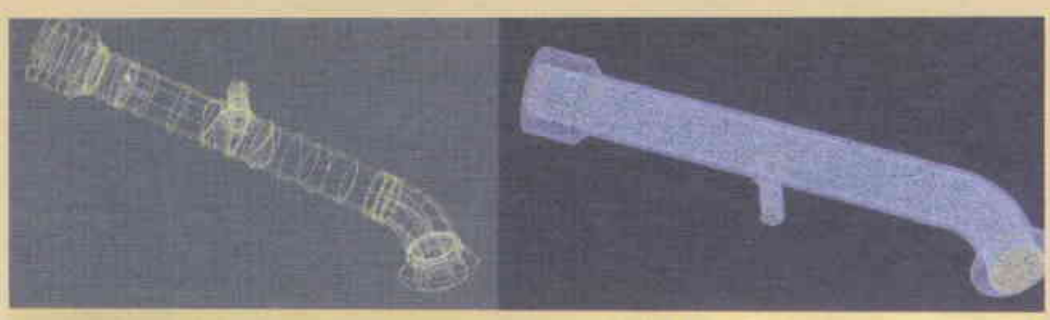


الشكل A
قطاع الحساب الإجمالي، الذي يحوي جزءاً من حوض المفاعل (الأحمر)، ومجرى الخروج (الفرع الساخن بلون أزرق فاتح)، ومولد البخار (أزرق غامق) ومكيف الضغط (أخضر).

أن نأخذ بالحسبان التفاعلات بين النماذج العنصرية. وهذا هو الإقرار بالصلاحية الإجمالي (بالجملة).

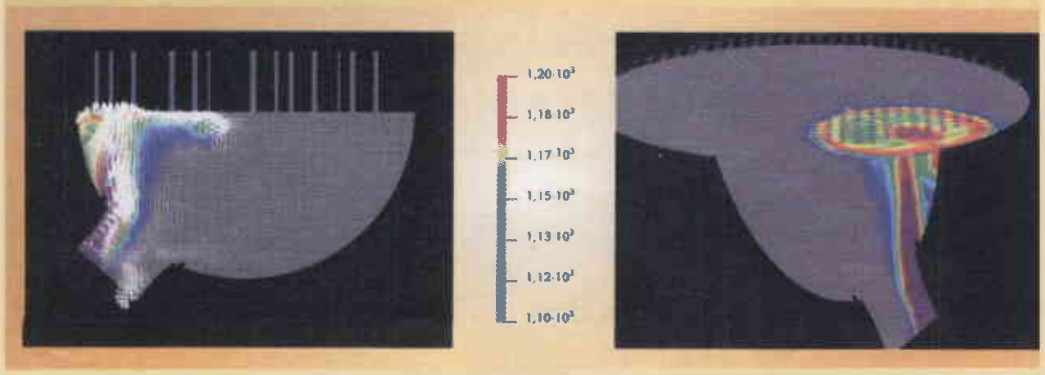
في نمذجة المناخ مثلاً، يعمل الباحثون، كل على حدة، على المحيطات والجو والغلاف الحيويّ للأرض، ويحوي كل جزء من هذه الأجزاء الكبيرة نماذج عديدة. ثم يتحققون من صحة المجموع بمحاكاة فترة من مناخ سابق، وهذه المحاكاة يمكن إقرار صلاحيتها عن طريق تحليل القباب الجليدية.

والميزة الهائلة لهذه المنهجية أنّها تسمح باستكشاف



الشكل B - نموذج التصميم بمساعدة الحاسوب (CAO) ، للفرع الساخن عند الخروج من حوض المفاعل (إلى اليسار) وتشبيكه بدون بنية (إلى اليمين).

الشكلان C و D



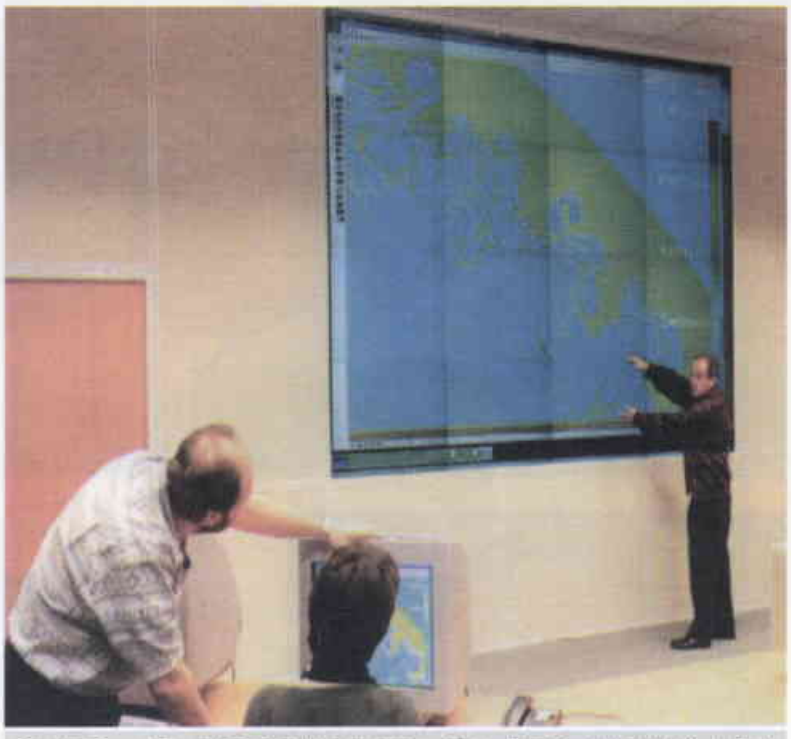
الشكل E

تفاصيل الظواهر التي لا يمكن بكل بساطة إعادة إجرائها في المختبر، إما لاستحالة تحقيق ذلك (مجرّة ما!)، وإما لأنّ الأمر غير معقول بكل بساطة (خطر كيميائي أو نوويّ، أو غير ذلك).

مسعى منقول إلى الصناعة

قاد هذا النضوج السريع لمسعى المحاكاة إلى استخدامه في الأبحاث التقانية والتطوير الصناعي. إن الإغراء، في الواقع، قوي للانتقال إلى المحاكاة في هذه المجالات من الأعمال. إن أسباب ذلك بسيطة. في بداية الأمر يصبح الهامش مع المحاكاة أعرض لاستمثال المفاهيم. فإذا كان عدد النماذج المصغّرة التجريبية الحقيقية المتيسرَّ تصنيعها محدوداً، يمكن في المحاكيات الرقمية إحداث تغييرات بقدر ما نرغب. وبما أن اللجوء إلى التجربة أصبح أقلّ، فالتطوير يصبح أرخص ثمناً، وأسرع إنجازاً، والمنتجات أسرع نزولاً إلى السوق. ويفرض كلّ ذلك بالبداهة أن بَرْمَجيات التصميم جاهزة؛ علماً بأن في إحكام تصميمها يكمن جزء من التكلفة. وهكذا فإن فهمنا لشيء ما يمرُّ بمحاكاة سلوكه، واستمثال تفاصيله والتحقق من انتظام عمله يمران بعدد قليل من التجارب.

وهل هذه هي نهاية القصّة! فمهما يكن الأمر، ليس بالإمكان

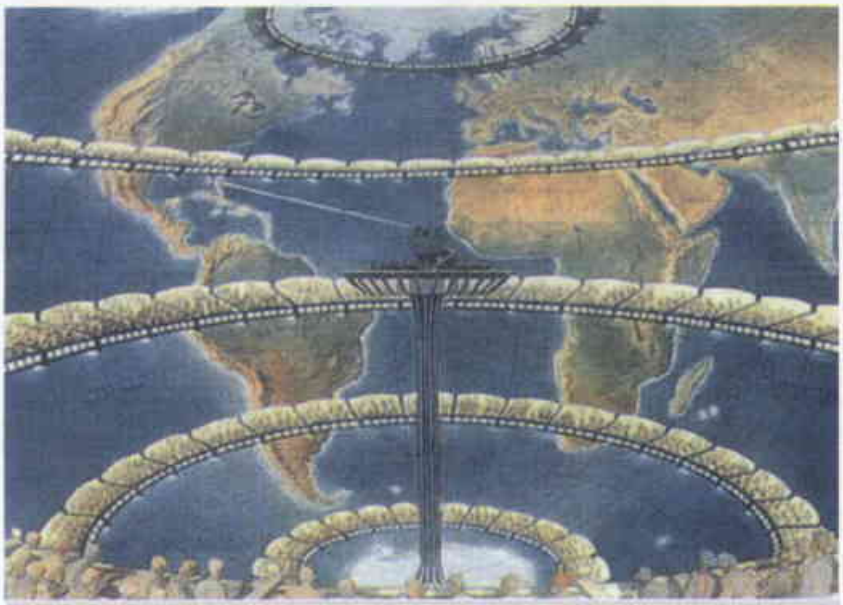


الشكل 4- إن الشاشة الجدارية المنشأة حديثاً في مركز مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية لمديرية التطبيقات العسكرية تسمح للباحثين، بفضل دقتها 3 200 x 2 400 بيكسل بمشاهدة تفاصيل دقيقة جداً ضمن المحاكيات الشاملة التي تمّت بالحاسوب تيراقلوب Teraflop وهو يشبه الحاسوب تيرا Tera الحالي.

التحتية تسمح باستمثال التصميم وذلك بتثبيت مستوى الأمان أو تحسينه. فينبغي إذن أن يتم تطوير نماذج أكثر دقة، ومحاكاتها رقمياً بشكل مفصل، ثم إقرار صلاحيتها. وهذا يقتضي في الوقت نفسه، حواسيب أكثر قدرة مما كانت عليه، وتجارب إقرار صلاحية تعتمد مجموعة أدوات أكثر دقة مما كانت قبلاً، ولكن الربح المحتمل مهمّ جداً. وتوجد هذه الإشكالية اليوم في القطاعات الصناعية كلها في مستويات مختلفة من النضوج.

وبمجرد أن تقرّ مجموعة من التجارب صلاحية برمجيات المحاكاة، تصبح هذه البرمجيات أداة مدهشة للعمل؛ فهي للباحث أداة تحليل، تسمح له بالتعرف إلى أكثر العمليات أهمية في الجمل المعقدة جداً، وللمهندس أداة استمثال. وليست البرمجيات جامدة؛ إنها تغتني باستمرار بنماذج أكثر دقة، وأمكن تحقيقها عن طريق التقدم العلمي والوصول إلى حواسيب أكثر استطاعة، وطبعاً بإقرار صارم لصلاحيتها يعتمد على أدوات تتحسن باستمرار.

استخلاص معلومات من نموذج ما أكثر مما وضعنا منها فيه. وما هو جديد في الأمر بأدوات المحاكاة الرقمية، هو أن النتائج التي يُتنبأ بها بمحاكاة الجمل المعقدة تزيد كثيراً في عددها عن السيناريوهات التي يمكن أن يتنبأ بها الباحث مسبقاً. ومن زاوية ما، تصبح المحاكاة دليلاً تصميمياً لتعرّف دروب البحث الجديدة أو اختيار الأكثر ملاءمة منها. وطبعاً، فهذا لا يعني الاستقراء الخارجي، بل يعني تحليل الممكن من مجال واسع من الوسطاء. فتحسين النماذج يتقوى إذن من استكشاف الباحث لها. ومن هُنا تتجلّى حاجات أخرى وتجارب أكثر دقة.



الشكل 5- رسم بريشة الرسام البلجيكي فرانسوا شوتين F. Schuiten 2 "حلم ريكاردسون". وهو "مصنع للتلوثات المناخية" قد يبدو على أنه تصور مسبق لحواسيب اليوم المتوازية بكثافة. وتحت أوامر عصا "قائد الأوركسترا"، هناك 64 000 حاسوب بشري مكلفون بإجراء حسابات متزامنة بغية "تدارك سريع لتطور الطقس على الكرة الأرضية بأكملها".

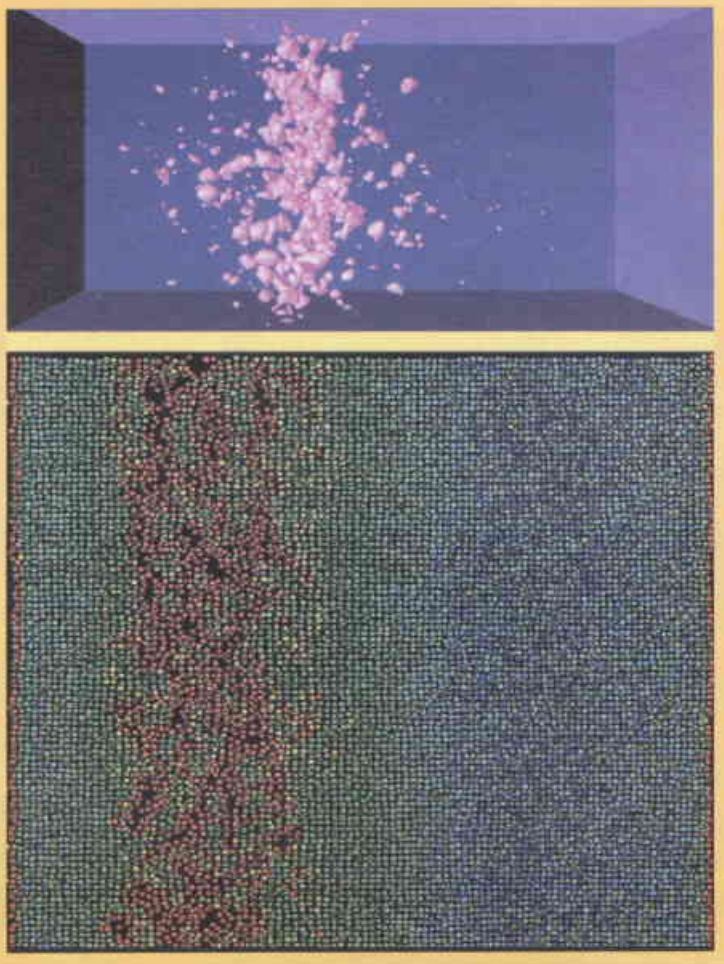
المحرك الاقتصادي

إن المردودية الصناعية للبحث والتطوير في التقانة هي أيضاً محرك دافع للتحسين. إنّ زيادة الربح بضعة أجزاء مئوية من اليورو على سعر الكيلو واط الساعي، مثلاً، هي رهان صعب في قطاع توليد الكهرباء النووي. فكيف نصل إلى ذلك؟ مثلاً، عند تحديد أبعاد محطات التوليد النووية، تُلحظ هوامش تضمن أمنها؛ وتتوقف هذه الهوامش على معرفتنا بالحوادث الفيزيائية المستخدمة. فمعرفة أفضل للحوادث

I - المحاكاة من أجل الفهم

تحتل المحاكاة في البحث العلمي دورًا خاصًا، أهم من دورها في التطور التقاني، حيث برهنت على فعّاليتها، لأنّ عليها هي بالضبط أن تُترجم، مفاعيل الظواهر الأساسية، على الرغم من أنّ بعضها يمكن أن يكون معروفاً معرفةً غير كافية أو حتّى مجهولاً. إن مواضيع هذا الفصل على قلّتها تبيّن كيف تساعد المحاكاة على فهم الظواهر، كما تبين أيضاً أنها ليست سوى زَريدة من سلسلة الإدراك، بين النظريّة، والنمذجة والتجريب، حيث يبقى الأخير هو "قاضي الصُلح". وهذا مشهد لافت للنظر في قطاع المواد مثلاً، حيث تعدُّ المُحاكاة جسراً بين نظرية الظواهر على المقياس الذري وبين إثبات المفاعيل الجهرية (الماكروسكوبية). وفي علم المناخ، إنّ نمذجة المجموعة المؤلّفة من الغلاف الجوي، والمحيطات لا غنى عنها للتنبؤ بمناخ كوكب الأرض. وتحتاج التقانات النانوية إلى نمذجة السطوح، والسطوح البَيْنيّة وبُنى نانوية أُخرى. وأما تقانات علم الأحياء، بمعناها الواسع، فلا يمكنها أن تستغني عن النمذجة الجزيئية. وفي حال النفايات النووية، تبدو المحاكاة ضرورية للتنبؤ بسلوكها على المدى البعيد إن طُمرت في وسط جيولوجي، وكذلك لأمثلة تصميم العبوات، والحاويات والموقع.

وفي ترتيب آخر للأفكار، تسمح النمذجة "السلوكيّة" بالتأكد من أنّ التجريبات الهادفة والقليلة العدد يمكن أن تُجرى بدون مخاطرة "الوقوع في مأزق" حول وسطاء حاسمة.



مقارنة بين رسم طيفي مكروي لعينة من النحاس أصر بها صدم (في الأعلى) وبين حادث الصدم نفسه محاكى بديناميّة جزيئية (في الأسفل). من أجل العينة المحللة، كانت أبعاد متوازي مستطيلات هي: 1200μm×1200μm×2400μm وأبعاد المنظومة المحاكاة، 3,6 nm×20 nm×20 nm من أجل 100000 ذرّة بكثافة نظامية. تظهر هنا شريحة من 20000 ذرّة بسماكة 0,36 nm.
إن مدة التجربة 7 بيكو ثانية. وإن التوزيع بحسب قد المسامات في العيّنة المحللة يخضع لقانون سلمي يشبه قانون السلم الملاحظ في الديناميّة الذرية (التحريك الذري).

نَمذَجة المناخ

ب. براكونو و أ. مارتي
مختبر علوم المناخ والبيئة - CEA-CNRS - مديرية علوم المواد - ساكلي.

ملخص

إنّ مُناخ الأرض هو نتيجة تآثرات مُعقّدة بين عمليات عديدة يتدخّل فيها الغلاف الجوّي والمحيطات والسطوح القاريّة. كيف تعمل هذه المنظومة؟ وهل يمكن التنبؤ بتطور المناخ على مدى فصل واحد أو على مدى أطول؟ هل أنشطة البشر تعمل الآن على تغيير التوازنات المناخية الكبيرة؟ ما هي آثارها الحالية وفي المستقبل في حياة البشر؟ ثمّة كمية من الأسئلة تجعل البحوث دقيقة بوجه خاص في المناخ وتطوّره، وتضع تحت الأضواء الشديدة نتائج نماذج المناخ. هذه النماذج الرقمية، المعروفة أيضاً باسم "نماذج الجريان العام" تسمح بمحاكاة التطوّر الزمني للمميزات الثلاثية الأبعاد للغلاف الجوي والمحيطات، آخذين بالحسبان تآثراتها مع السطوح القاريّة والمتجمّدة (قباب جليدية وجليد البحر).

الكلمات المفتاحية: المحاكاة - نمذجة المناخ - المعالجات السلّمية والمتجهة - الحاسوب المتوازي.

المنطقة الشرقية من إفريقية الجنوبية كما تلاحظها الأداة ميريس (Meris) من الساتل انفيسات Envisat في تموز 2002. يظهر في هذه الصورة، المحيط واليابسة، والفيوم، والمدن الكبيرة الساحلية، والثلج فوق جبال ليسوتو، ورمال في صحراء كالاهاري (في الأعلى إلى اليسار) وكلها يوضح تعقد المنظومة المناخية.

يَرقى تاريخ ظهور نماذج الجريان العام إلى الستينيات من القرن العشرين، وقد ارتبطت تعقيداتها ارتباطا وثيقاً بتطور الحاسبات الفائقة (المؤطر 1 والمؤطر B، الوسائل المعلوماتية العالية الأداء للمحاكاة الرقمية). فما هي هذه النماذج؟ وكيف نستعملها وما هي حدودها؟ تحاول السطور الآتية كشف جزء من النقاب.

مُكوّنات نموذج المناخ

تتطلب دراسة المناخ الأخذ بالحسبان علم تحريك الموائع أي البحر والغلاف الجوي، والعمليات الكيميا-فيزيائية للمركّبات الكيميائية التي تحويها هذه الموائع والتآثرات المعقّدة مع الغلاف الحيوي للأرض والغلاف الجليدي[1] (Cryosphere) البري أو البحري.

يُشير الشكل 1 إلى أن أيّ مُكوّن للمنظومة المناخية (الغلاف الجوي، المحيط، الغلاف الحيوي والغلاف الجليدي) له ثوابت زمنية خاصة به. فالغلاف الجوي يتغير بصورة أسرع

(1) الغلاف الجليدي هو الجزء من المنظومة المناخية الذي يشمل الكتل الجليدية وترسبات الثلج في العالم أجمع (الجليديات القارية القطبية والمصاطب الجليدية والقباب الجليدية والجليديات وجليد البحر وديان جليدية موسمية وجليد البحيرات والأنهار والتربة المتجلدة الموسمية والمتجلدة الدائمة الكتيمة).

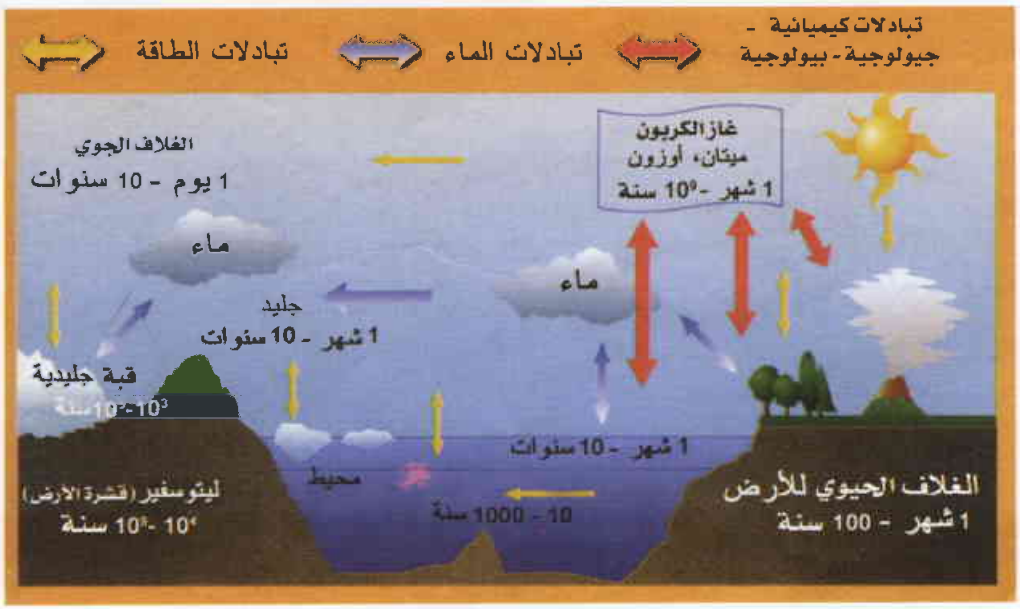
الموظر 1

قصة حديثة

إن المحاكيات المناخية، مثلها مثل التنبؤ بالحالة الجوية، تدين بازدهارها إلى تطور الحواسيب اللافت للنظر أثناء القرن العشرين. إن مطوّل الكاتب الإنكليزي ريتشاردسون L.F.Richardson الذي عنوانه التنبؤ بالطقس بعملية عددية Weather Prediction by Numerical Process المنشور عام (1922) هو أول مؤلّف عَرَض إمكانية حساب نُزوعات المتحولات الجوية (درجة الحرارة، الرياح ..) في نقاط مختلفة موزعة في المكان، بأن تُستبدَل بالمعادلات التفاضلية التي تصف الجَوَلان الجوي جملة من المعادلات قائمة على فروقات جبرية. بيد أنّ عملية إجراء مثل هذه الحسابات تستوجب 64000 شخص! فكان لا بدّ، والحالة هذه، من انتظار عام 1950 حتى تمّ على يَدي الأميركي شارني (J.G.Charney) تحقيق التنبؤ العددي الأول بنموذج للجو مبَسّط. وفي الستينيات، أصبح التنبؤ بالأحوال الجوية شيئاً فشيئاً عملياتياً في عدة دول. وفي السبعينيات أقلعت المُحاكيات المناخية بنماذج للجو، ومنذ ذلك الحين لم تتوقف عن الانتشار الواسع، آخذة بعين الاعتبار في العقد الأخير ليس فقط الجو، بل أيضا ترابطاتها بمكوّنات المنظومة المناخية الأخرى. وفي فرنسا تطوّر نشاط مهم حول الترابط بين المحيط والجو بدءاً من التسعينيات، ويهدف المشروع الأوربي PRISM (برنامج نمذجةمنظومة الأرض المتكاملة) (Program for Integrated Earth-System Modelling) (2002-2005) إلى تسهيل عملية الترابط البينية (interfaçage) بين مختلف نماذج المنظومة المناخية الموجودة في أوربا.

من غيره، وذاكرته ضعيفة بعض الشيء. أمّا المحيط العميق فعلى العكس يمكنه أن يحبس اضطرابات لمئات السنوات. وهذه الثوابت الزمنية المختلفة تسمح بفهم الفرق بين علم المناخ climatologie، وعلم الأرصاد الجوية meteorologie. إن التنبؤ بحال الأرصاد الجوية يعني تبيان مثلاً حال الهطل في الأيام الآتية. ولمّا كان المحيط يتغير بسرعة أقل من الغلاف الجوي، فيحقّ للمتنبىء الجوي أن يُهمل تغيراته على مدى حقْبة التنبؤ. أما دراسة المناخ، بالمقابل، فتستلزم مُحاكيات أطول مُدّة (10 إلى 100 عام) للحصول على إحصائيات موثوقة. لم تعد المسألة في استعادة مسار المنظومة، بل في إحصائيات مساراتها. ففي هذه الظروف لا يجوز إهمال، تغيرات الجريان في المحيط وفي بقية الخزانات الأبطأ. فالمنظومة المناخية المراد تفحّصها تتعلّق إذن بالعمليات وسلالم الزمن المدروسة فيها. ومنذ عدّة سنوات، أصبحت المنظومة المترابطة المحيط – الغلاف الجوّي عُنصراً مركزياً، يساهم هذان المائعان في إعادة توزيع فائض الطاقة التي تنالها المناطق الاستوائية إلى المناطق القطبية، عن طريق الرياح والتيّارات المائية.

إن نموذجاً للمناخ هو قبل كل شيء نموذج فيزيائي، أي أن العمليات الفيزيائية المطلوب تمثيلها قد وضعت في شكل معادلات رياضيّة. فالمكوّنات الأساسية للمنظومة المناخية



الشكل 1: مركبات المنظومة المناخية، وفق سيلفي جوسوم S.Joussaume (المناخ من الأمس إلى الغد).

المؤطر B

الوسائل المعلوماتية العالية الأداء للمحاكاة الرقمية

إن إجراء محاكيات رقمية أدق مما هي عليه بغرض تحقيق نماذج فيزيائية ورقمية هي ذاتها أدق، تتناول توصيفات أكثر دقة للأشياء المحاكاة (المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية؟). ويتطلب هذا كله ترقيا في قطاع برمجيات المحاكاة وأيضا زيادة في قدرة التجهيزات المعلوماتية التي تستخدم فيها هذه البرمجيات.

المعالجات السلمية والمتجهة

نجد في قلب الحاسوب، أن المعالج هو الوحدة الأساس، التي تجري الحسابات أثناء سير البرنامج. ثمة نوعان كبيران منه، المعالجات السلمية والمعالجات المتجهة. تنفذ الأولى عمليات تقوم على أعداد بدائية (سلمية)، مثل جمع عددين اثنين. وتنفذ الثانية عمليات تقوم على مجموعات من الأعداد (متجهات)، مثل جمع الأعداد، مثنى مثنى، التي تكون مجموعتين من 500 عنصر. لهذا السبب، فهي تلائم خاصة المحاكاة الرقمية: فأثناء تنفيذ عملية من هذا النوع، يمكن أن يعمل معالج متجه بسرعة تقارب أداءه الأعظمي (الذروة)، بينما تتطلب العملية نفسها بمعالج سلمي عدة عمليات مستقلة (عمليات وفق مركبة المتجهات) التي تجري المطلوب بسرعة تقل كثيرا عن سرعتها العظمى. إن الفائدة الأساسية من المعالجات المتجهة هي تمنها: والمقصود هنا المعالجات المكررة العامة generalistes التي كلفة تصميمها وتصنيعها يمكن أن تخفض في الأسواق الكبيرة.

ميزات التوازي وإشكالياته

تسمح المعالجات الحديثة بالوصول إلى كفاءات عالية، باستعمال تواتر تشغيل أكثر ارتفاعا من جهة أولى، ومن جهة أخرى بمحاولة تنفيذ عدة عمليات في الوقت نفسه: إنه، والحق يقال، المستوى الأول من التوازي. إن تسارع التواتر بحده تطور تقانة الإلكترونيات المكررة، بينما العلاقات بين التعليمات التي يراد أن ينفذها المعالج هي التي تحد التوازي الممكن. إن تشغيل عدة معالجات في آن واحد يؤلف المستوى الثاني من التوازي، الذي يسمح بالحصول على مزيد من الكفاءات شريطة أن نمتلك برامج قادرة على الانتفاع بها. وفي حين أن التوازي في مستوى المعالجات نفسها أوتوماتي، فإنه ما بين المعالجات في حاسوب مواز يقع على عاتق المبرمج، الذي عليه أن يقطع برنامجه إلى قطع مستقلة وأن يستدرك بينها الاتصالات اللازمة. يعمل غالبا على تقطيع القطاع الذي يجري عليه الحساب، ويكلف كل معالج بمحاكاة سلوك قطاع ما، ويعمل على إقامة اتصالات منتظمة بين المعالجات لكي يضمن توافق مجموع الحساب. وبغية الحصول على برنامج مواز فعال، ينبغي أن نتأكد من توازن الحمولة بين المعالجات والبحث في الحد من كلفة الاتصالات.

المعماريات المختلفة

هناك وظائف مختلفة لتجهيزات المعلوماتية. فانطلاقا من الحاسوب الخاص الذي يعمل عليه المستخدم، فيعد عليه حساباته ويحلل نتائجها، ينفذ المستخدم إلى وسائل حساب وتخزين، وإراءة مشتركة، إلا أنها أكثر قدرة من وسائله. ويرتبط مجموع هذه التجهيزات بشبكات معلوماتية تسمح بجريان المعلومات فيما بينها بحسب يتلاءم مع حجم المعطيات المنتجة، الذي يمكنه أن يبلغ تيرا ثمانية (أي 10^{12} ثمانية) من المعلومات في محاكاة واحدة.

وتدعى، على العموم، تجهيزات الحساب الكبيرة: الحاسبات الفائقة، التي تبلغ في الوقت الحاضر استطاعة تقدر قيمتها بالتيرافلوب (أي 10^{12} عملية حساب في الثانية الواحدة).

يوجد اليوم ثلاثة أنواع من الحاسبات الفائقة: الحاسبات الفائقة المتجهة، العناقيد من الحواسيب الصغيرة بذاكرة مشتركة، والعناقيد من الحواسيب الشخصية PC (أي الحاسوب الذي يمتلكه كل شخص في منزله). يتوقف الاختيار بين هذه المعماريات كثيرا على التطبيقات العملية والاستعمالات المرغوب فيها. تحوي الحاسبات الفائقة المتجهة معالجات عالية الأداء، لكن من الصعب جدا زيادة قدرتها بإضافة معالجات

.....

رقمت الآلية تيرا Tera في مؤسسة الطاقة الذرية الفرنسية في تشرين الأول 2001 وقد صممتها Compaq، التي سميت بعنقود Alpha. إن عنصر الأساس فيها هو حاسوب صغير ذو 4 معالجات من نوع ألفا بسرعة 1GHz وتتضمن ذاكرة قيمتها 4Gb وشريط مغناطيسي قدرته 70Tbyte. إن عناصر الأساس هذه موصولة بعضها ببعض بشبكة سريعة صممتها شركة الاريكسن. ثمة عملية تزامن تجري على مجموعة 2560 معالجا، يقل عن 2 ميكروثانية لتقدم متطلوبة المعلومات الخاصة بمعالج للتخزين قدرة 30 Tb للدخولات والخروجات مع عملية تقرير مدمجة قدرتها 7.5 Tb/s.

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

أخرى. أما العناقيد من الحواسيب الشخصية فكلفتها قليلة لكنها لا تتلاءم جيداً مع محيط عمل يجري فيه عدة مستخدمين حسابات شرهة جداً من حيث استطاعة الآلة والذاكرة والدخولات والخروجات.

إن هذه الاعتبارات هي التي قادت مديرية التطبيقات العملية العسكرية في مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية إلى أن تختار لبرنامجها في المحاكاة (راجع البرنامج المحاكاة: ضمان الأسلحة بدون اختبارات نووية) المعماريات من نوع العنقود من الحواسيب الصغيرة بذاكرة مشتركة، التي تدعى أيضا حشود (clusters) من SMP (أي معالجات متعددة ومتناظرة).

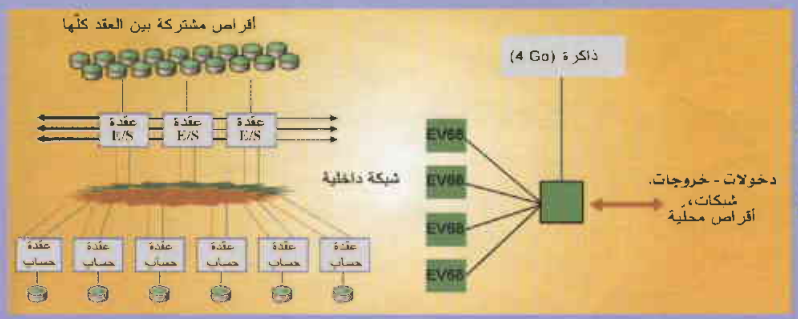
تستعمل هذه المنظومة كلبة أساسية حاسوبا صغيرا يحوي عدة معالجات مكررية تتقاسم ذاكرة مشتركة (الشكل). وإذ تنتشر هذه الحواسيب الصغيرة انتشاراً واسعاً في قطاعات متنوعة بدءاً من البنك حتى المخدم في شبكة الويب، مروراً بمكاتب الدراسات، فإنها تؤدي إلى قيمة ممتازة لنسبة الكفاءة إلى السعر. وترتبط اللبنات الأساسية هذه (التي تدعى أيضا العقد) فيما بينها بشبكة من الوصلات العالية الكفاءة: فالاستطاعة المتجمعة من عدة مئات من هذه اللبنات يمكنها أن تبلغ عدة تيرافلوب. وفي الحالة هذه، فالكلام إنما يجري حول الحاسوب كثيف التوازي.

تتلاءم الحاسبات المتوازية مع الطرائق الرقمية التي تقوم على التشابك (الموطر ١: ماهي المحاكاة الرقمية؟) وتتلاءم أيضا مع معالجة الحسابات والصور الآلي (IGH) اذ كما هو الأمر في هذه المحاكاة بالديناميكا الجزيئية الكمي الذي يتبع بفعل لمئات مليارات من الذرات (راجع محاكاة المواد) تتألف المنظومة المفروضة من ١٩٩٩٩٩ ذرة من التحشن على شكل متوازي المستطيلات مقطعه مربع (قطعة 9/9Å) وبكثافة نظامية للتفاعل الذرات بفعل الكمون من نوع كمون الذرة المضغوطة EAM (راجع ٤٨: بيكوثانية: ان الحساب الذي أجري على ١٥ معالجا في الحاسبة الفائقة "جوردان دو توريبيو لوشاتيل" (Jade Bourgogne) (راجع ٤-١ Jade Bourgogne) بمساعدة البرمجية (Ntoto) التي طورت في مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية، قد استغرق عشر دقائق من عمل "المستخدم" (أجري الحساب بـ عنقود ٢٥٦ معالجا). واجريت اختبارات لغاية حتى ٤٨ مليون ذرة حيث عالجنا الذرة ٢٥٦ معالجا لمدة ساعة.

ويمكن ان تتوفر هذه الاستطاعة لتطبيق متواز وحيد يستخدم موارد الحاسبة الفائقة كلها وكذلك أيضا لتطبيقات متعددة مستقلة، متوازية أو غير متوازية، يستخدم كل منها جزءا من الموارد. فإذا كانت المميزة البارزة لتوصيف حاسبة فائقة هي على العموم، قدرتها على الحساب، ينبغي عندئذ ألا يهمل جانب الدخولات والخروجات. وهذه الآلات القادرة على إجراء محاكيات حجمها كبير، ينبغي أن تحوي منظومات من الأقراص بسعات وكفاءات ملائمة. في حالة الحشود من المعالجات المتعددة والمتناظرة (SMP)، يتوفر لدى كل حاسوب صغير مجال قرص محلي ومع ذلك ليس من الفطنة في شيء استعماله لملفات المستخدمين وهذا ما يدفع المستخدم إلى نقل معطياته بصورة واضحة إلى ما بين مختلف أطوار حساباته ولهذا السبب من المهم أن يتوفر مجال تستطيع الوصول إليه مجموعة الحواسيب الموجودة في الحاسبة الفائقة. ويتألف هذا المجال على العموم من مجموعات أقراص موصولة بعقد تكون وظيفتها الأساسية أن تدير هذه الأقراص. وكما هو الحال في الحساب، فإن التوازي في الدخولات والخروجات هو الذي يسمح بتقديم كفاءات عالية. وينبغي لتحقيق ذلك، أن تعد منظومات ملفات شاملة متوازية تسمح بالوصول سريعاً وبدون أي عائق إلى المجال القرص المشترك.

ولئن كانت الحشود من المعالجات المتعددة والمتناظرة ذات قدرات حسابية ضخمة إلا أنها تعرض مع ذلك عدة تحديات. من بين أهمها، إضافة إلى وضع برمجيات للمحاكاة قادرة على الاستفادة من عدد المعالجات الكبير، أنه ينبغي إعداد منظومات التشغيل والبرمجيات الخاصة المستلائمة مع مثل تلك التشكيلات والمتساهلة إزاء الأعطال.

ف. روباد
مديرية التطبيقات العسكرية
مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية



بنية معمارية لآلة من النوع "حشد من معالجات متعددة متناظرة". إلى اليسار، البنية المعمارية العامة (دخول/خروج - IGH)، وإلى اليمين البنية المعمارية لعقدة ذات 4 معالجات ألفا من نوع EV68 مخدمة على قوائم IGH.

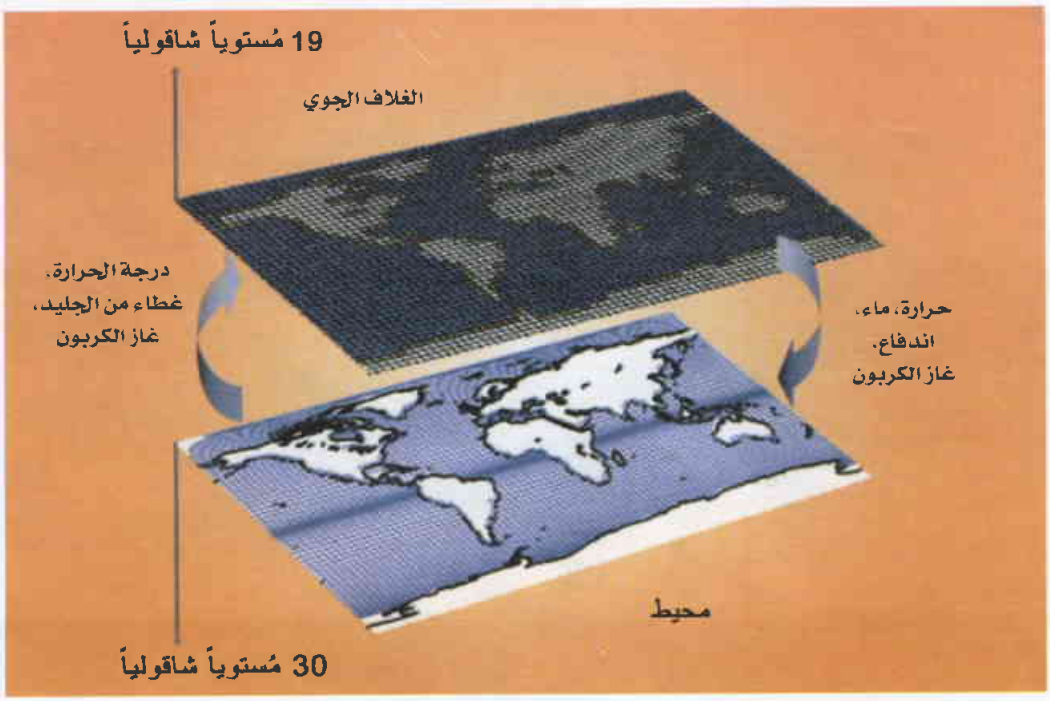
تُكوِّن موضوعَ نماذج – فرعية تسمح بحساب العمليات الداخلية لكل منها والترابطات فيما بينها. وهكذا، فإن نموذجٍ الغلاف الجوي، الذي ليس هو في الأساس إلا نموذجاً للتنبؤ بالأحوال الجوية، يحسب انتقال الحرارة والرطوبة بالرياح، وتبادلات الاندفاع، والحرارة والماء بين الغلاف الجوي وسطوح المحيطات واليابسة. وينضم إلى ذلك تكاثف الرطوبة في الغيوم والهواطل، وامتصاص إشعاع الشمس الوارد وانتشاره، وكذلك أيضاً إصدار الغيوم، والغازات الجوّية وسطوح المحيطات واليابسة للإشعاعات تحت الحمراء وامتصاصها. وتدخل في الحسبان أيضاً مختلف العوامل القادرة على تغيير العمليات الأساسية. فمثلاً، إنّ جليد البحر، والثلج، والغطاء النباتي يغيّر من كمية إشعاع الشمس التي يمتصها سطح الأرض بقدرتها على عَكس الإشعاع الشمسي الوارد نحو الفضاء. ويأخذ نموذج المحيط بالحسبان التأثرات مع الغلاف الجوي عن طريق الرّياح، وتدفق الحرارة والإشعاعات الشمسية وتحت الحمراء. وتتحدّد حركات الحمل الحراري في عمود من الماء بتغيرات درجة الحرارة والملوحة.

تؤلف الغيوم أحد العناصر الأكثر صعوبة في مسألة صياغتها بمعادلات في النمذجات المناخية

المهارة في حَبْس العالم في حاسوب

إن التعبير "نموذج" المناخ يمكن أن يكون خادعاً، لأنه بعد النموذج الفيزيائي يَتَدخل النموذج الرقمي. وإن وضع الأرض في حاسوب يستلزم حلّ المعادَلات على شبكة ثلاثية الأبعاد وعلى مقياس الكرة الأرضية (الشكل 2). فالطرائق الرقمية التي أُعدت للمناخ ينبغي أن تصون كميات تكاملية كالطاقة أو كتلة الماء الكليّة. وللحصول على الحلول المُعتمدة على العموم للمُناخ، تُحل المعادَلات كلّ نصف ساعة أثناء عملية استكمال للنموذج. هناك عمليات عديدة، مثل تلك التي تأخذ بالحسبان الغيوم، تكون فعّالة في سلّم أصغر بكثير من سلالم العروة أو خُطوة زمن النموذج، فلا يمكن إذن أن تُنَمذَج بشكل واضح. وتُؤخذ بعين الاعتبار مفاعيلها في السلالم الممثلة عليها وذلك بنمذجتها انطلاقاً من علاقات فيزيائية مع متحولات السلّم الكبير. تُدعى هذه التقنية التمثيل الوسيطي paramétrisation.

وبعدئذ، يأتي دور النموذج المعلوماتي، أو ببساطة ما بعدها



الشكل 2: شبكتا المركبتين المحيطية والجوية للنموذج المترابط في معهد ببار سيمون لابلاس، في نسخة مُسماة مِيز خفيض. وفي أثناء عملية استكمال، يتم ترابط النموذجين مرة واحدة في يوم محاكاة، بواسطة أداة ترابط تنظم الاتصال بين النموذجين والاستقراءات الداخلية بين الشبكتين، ولتأمين انحفاظ الطاقة بين الشبكتين، يمكن أن تحوي عروات الغلاف الجوي مختلف أنواع السطوح (اليابسة، المحيط، جليد البحر، وجليد القارات) ويتم الحصول على خط الساحل بإسقاط قناع اليابسة / البحر على الشبكة الجوية لنموذج المحيطات. تشير ألوان الشبكة الجوية إلى النسب المئوية لليابسة في أي عروة. وتزداد دقة شبكة المحيطات، وفق خطوط العرض، بالانتقال نحو خط الاستواء، لتمثيل الظواهر المدارية تمثيلاً أحسن.

المؤطر 2

كيفية إقرار صلاحية النماذج وتقدير دقّتها؟

تشهد هذه الرواسب البحيرية التي اكتشفت في الصحراء الكبرى على أن هذه المنطقة كانت فيما مضى أكثر رطوبة مما هي عليه في الوقت الحاضر.

إنّ إقرار صلاحية النتائج يتوقف على عدة عوامل. يستند العامل الأول إلى العمليات الفيزيائية التي تستعاد في النموذج. ولا يكفي هذا العامل لوحده، وإنما ينبغي أن تستعمل معه مجموعة من الاختبارات، للتحقق من أنّ المناخ المحاكى على توافق مع الظواهر الملاحظة.

إن المظاهر الشواشية (chaotiques) المتعددة للمنظومة المناخية (وتطورها حساس جدا باضطرابات صغيرة تجري في الشروط الابتدائية والشروط النهائية) تلزم باللجوء إلى مجموعات من المحاكيات، أو بالاعتماد على نتائج عدة نماذج. وهكذا فإن عدة مشاريع مقارنة بين نتائج النماذج للمناخ الحالي أو لمناخات سابقة أظهرت أن النماذج تمثل بشكل مرض المظاهر الأساسية للمناخ ولتغيراته، ولكن لا يوجد أي نموذج قادر في الوقت الحالي على استعادة كل وجيهات المناخ بشكل صحيح. إن أحد المنابع الأساسية للارتياب مرتبط بتمثيل الغيوم، الذي يتحكم بالقسم الأعظم من استجابة المناخ الطاقية لاضطراب ما.

وتقدم محاكاة المناخات السابقة أيضاً إمكانية تقدير ما إذا كانت النماذج قادرة على استعادة مناخات تختلف عن المناخ الحالي. إنه أحد أهداف المشروع الدولي PMIP: (مشروع مقارنة دولية لنمذجة مناخ قديم)، الذي تنسقه سيلفي جوسوم S. Joussaume. إن النتائج التي تمّ الحصول عليها للعصر الهولوسيني الأوسط (منذ 6000 سنة) أظهرت، مثلاً، أن المنظومة المترابطة المحيط - الجو - الحياة النباتية ينبغي أن ينظر إليها بمجموعها من أجل استعادة الشروط الأكثر رطوبة التي أظهرتها الرواسب البحيرية، وحيات الطلع في المناطق التي هي اليوم جافة (الشكل).

تسخن في الصيف، قارات النصف الشمالي من الكرة الأرضية أكثر من المحيطات، التي سعتها الحرارية أكبر. إن الهواء الساخن أقل كثافة، مما يتميز بتولّد ضغط منخفض على القارة، حيث تقع قيمته الصغرى على سفح تضاريس جبال الهيمالايا وهضبة التيبت وتمتد حتى الصحراء. وهكذا تضغط الرياح من المحيط نحو اليابسة، فتنشحن بالماء أثناء سيرها فوق المحيطات الاستوائية الساخنة وتهطل على شكل أمطار شديدة فوق القارة. إنها الأمطار الموسمية. وكما يحدث في إفريقية في شهري تموز/آب (a). قبل 6000 سنة كانت الأرض في نصفها الشمالي تتعرض في الصيف للإشعاع الشمسي بصورة أشد، وهذا ما أدى الى تعزيز فرق الضغط الجوي بين اليابسة والمحيط وجريان الرياح الموسمية. كانت الرياح الموسمية تتجمع آنذاك أكثر فوق شمال إفريقية مما جعل المناطق رطبة وهي اليوم جافة. تبيّن نماذج الغلاف الجوي الحاضع للإشعاع الشمسي قبل 6000 سنة هذه الآلية كلها (b). تهمل هذه المحاكيات تغيرات جولان المحيطات والحياة النباتية. وتشير المحاكيات التي تمت بالنموذج المترابط المحيط - الغلاف الجوي - الحياة النباتية لمعهد بيار سيمون الى أن المفاعيل الرجيعة المرتبطة بالمحيط والحياة النباتية تعزز استجابة جولان الأمطار الموسمية (c). تتفق نتائج هذه المحاكاة اتفاقا جيدا مع المعطيات المتوفرة.

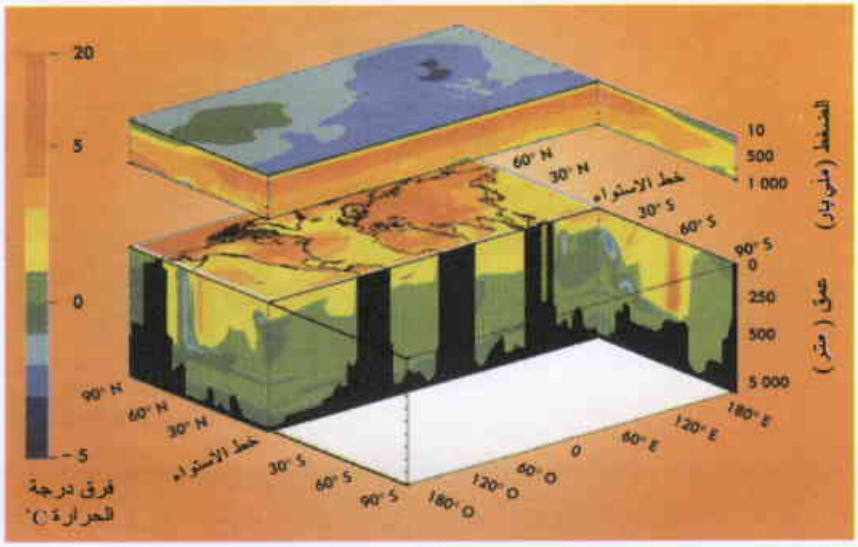
بساطة، "الكود". إن لغة الفورتران Fortran هي المستعملة بكثرة في الوقت الحاضر لأنها إرثٌ تاريخي ولأنها على العموم الأكثر كفاءة من بقية لغات الآلات المُتجهة التي عليها تشغّل هذه الأنواع من النماذج. إن اختيار المَيز resolution و تعقيد النموذج ينتج أيضاً من تسوية بين "الواقعية المطلوبة" وبين الكلفة المعلوماتية. فينبغي أن يجري الحساب أسرع، وأسرع بكثير، من الوقت الذي يمرّ. ففي الدراسات حول المناخات الماضية التي أجريت في مختبر علوم المناخ والبيئة (CEA-CNRS/LSCE)، استُخدم نموذج مترابط محيط – غلاف جوي، حيث المركّبة الجويّة ذات ميز مؤلف من 72 نقطة طولاً، و45 نقطة عرضاً و 19 سوية شاقولية. وبهذا الميز، يلزم 200 ساعة حساب على الحاسبات المتجهة الأكثر قدرة لإنتاج 100 سنة من المناخ المحاكى. ويُضرب هذا الحساب في 10 لزيادة الميز المكاني بعامل 2 في الاتجاهات الثلاثة. إن مثل هذه المُحاكيات تقبل التنفيذ على محطة العمل، لكن ينبغي أن يُحسب عامل مقداره 10 على زمن الاستعاضة.

وتضاف إلى كود المحاكاة نفسه سلسلة من الأدوات المخصصة لتدير عمليات المحاكاة عدَّة مئات أو عدَّة آلاف ساعة من عمل الحاسوب. وثمَّة وسائل تخزين قادرة وأدوات تحليل تسمح باستثمار معلوماتية هذه الآلات في صنع الأرقام. وأمّا التحليل البياني للنتائج والتحاليل الإحصائية، التي تبدأ من متوسطات بسيطة إلى طرائق تجعل من الممكن توصيف حالات مناخية ومواعيد حدوثها الزمنية، فتستعمل عادة في علم المناخ (المؤطر 2).

صُوَر المناخ في المستقبل

ثمّة تطبيقات متعددة لنماذج المناخ، مثل دراسات العمليات المناخية، من التقلبات المناخية مابين السنوية إلى مابين متعددة العقود أو التغيرات المناخية القادمة أو الماضية. فلدراسة تحولات المناخ التي تحرّضها الأنشطة البشرية، تقوم الطريقة المُعدّة لذلك، على أن تنفذ أولاً محاكاة تمثل مناخاً لم يشوشه الإنسان. وبعدئذ تُجرى محاكاة للمناخ المشوش، بتغيير تركيز غاز الفحم CO_2 في الجو مثلاً، بناء على سيناريو أقترحه الاقتصاديون.

يظهر في الشكل 3 التسخين الذي سيحصل بهذا السيناريو في عام 2100 وفق محاكاة منفذة بنموذج المناخ لمعهد بيار سيمون لابلاس في باريس. فبالنسبة إلى محاكاة المناخ قبل الازدهار الصناعي، تشير قارات النصف الشمالي من الكرة الأرضية إلى تسخين مهم. فعند خطوط العرض العالية، نقص غطاء الثلج، وسطح الأرض العاري يعكس الأشعة الشمسية أقلّ مما يعكسه الثلج، وهذا ما يساعد على تسخين السطح القاري. أمّا المحيط، فبسبب سعته الحرارية الأكبر من سعة اليابسة يعاني تسخيناً أقل، ولم يبلغ التسخين الجزء العميق من المحيط، لذا يزداد الاستقرار الشاقولي للمحيط، ممّا يخفف من التبادلات الشاقولية ويغيّر الدور المناخي للمحيط. وإنّ ازدياد مفعول الدفيئة يعزل الجو العالي جداً فيبرد. إن مستقبل دورة الماء المرتبطة بهذا التسخين المناخي لا تزال غير معروفة جيداً. وتدخل الدورة الهدرولوجية عمليات طفيفة يصعب تمثيلها في النماذج وإن لوحة نتائج مختلف النماذج أوسع بكثير من تلك التي يُحصل عليها بتغيير درجة الحرارة. وانطلاقاً من هذا النوع من المحاكيات، وبدمج مقاربات مختلفة تأخذ بالحسبان محاكيات المناخ الحالي، ومناخ المستقبل ومناخات الماضي، تتحرر شيئاً فشيئاً دواليب الآليات المتعددة التي ولجت فجأة الآلة المناخية. إنّ نمذجة المناخ هي في الوقت الحاضر قطاع في توسّع سريع. إنه بالإمكان الآن ربط الآليات المناخية بالعمليات الكيميائية والجيولوجية والحيوية. ويبحث علماء المناخ ليس فقط في دراسة أثر تغيرات الدورات – الكيميائية – الجيولوجية – الحيوية في المناخ، بل أيضاً في أثر المناخ في هذه الدورات، هذا الذي سيؤدي بالتأكيد في السنوات القادمة إلى تغيير أسلوبهم في النظر إلى العالم وأيضاً وإلى طرح عدّة أسئلة حول الطرائق المعتَمَدة لإدخال هذه الفيزياء في الحاسبات.



الشكل 3، تمثيل ثلاثي الأبعاد لتغير درجة الحرارة.هذا التغير المُحاكى بنموذج المناخ لمعهد بيار سيمون لابلاس في حالة مناخ مُشَوَّش بغاز الكربون Co_2 بفعل البشر بعد انقضاء 240 سنة. يوافق المناخ المرجعي مناخ ما قبل الازدهار الصناعي، حيث ثبت معدّل CO_2 بمعدّل سنوات 1860 (ppm 286). يعود الجزء الأعلى من الشكل إلى الغلاف الجوّي وجزؤه الأسفل إلى المحيطات. وتسجل الخطوط المتساوية درجة الحرارة كل درجة حرارة منوية واحدة (أسقط الخط 0) حتى درجة الحرارة المنوية 5، ومن ثم كل خمس درجات منوية.

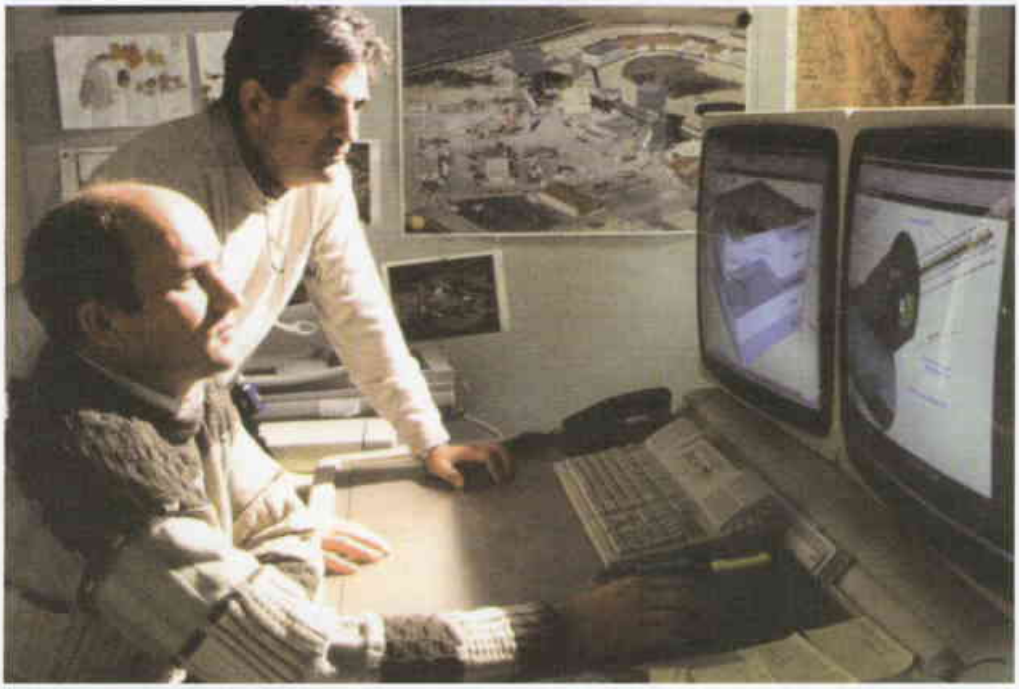
مُحاكاة تخزين النُّفايات النووية وإيداعها

عماد طومي، إمّانويا موش، ألان بنغاور
مديرية الطاقة النووية — مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية (ساكلي — فرنسة)

ملخص

في قطاع تخزين النُّفايات النوويّة وإيداعها تأتي المُحاكاة، كما في مواضع أخرى، تكملة للتجريب. لكن هنا بالنظر إلى سلالم الزمن المعنيّة، فإنّها يمكن أيضاً أن تحلّ محلّ التجريب أكثر ممّا هو عليه الأمر في المواضع الأخرى. فما هو دور المحاكاة؟ إنه تسهيل البحث عن الوسطاء الحاسمة في تطوّر الموقع، والموادّ، والعبوّات وأخيراً، في تطور جرعات الإشعاعات التي يُقصد الاحتفاظ بها مادام لها تأثير في الإنسان.

الكلمات المفتاحية: تَحاكي، تخزين، إيداع، وسط جيولوجي.



يعمل جيولوجي مع مختص في المعلوماتية البيانية على نمذجة مختبر تحت الأرض للبحث في تخزين النفايات النووية. يجري بناؤه على موقع Bure.

هو التنبؤ بحال سلامة مواد البنية التحتية والعبوّات، في سبيل استعادة الإنسان لهذه العبوّات في حينه.

إن سلالم الزمن المعنيّة، وهي تتراوح بين بضع عشرات وعدة آلاف من السنين، تجعل التجريبات المباشرة صعبة. فدور المُحاكاة إذاً، سواء

إشكالية في التنبؤ

إنّ تقييمات الأمان أو الكفاءة لموقع تخزين النُّفايات النووية أو إيداعها[1] يتضمّن خاصة التنبؤ بتطوّر سلوك هذا الموقع مع الزمن، وسلوك مواد بنيته التحتية، وأخيراً سلوك عبوّات النفايات[1]. إن الهدف النهائي من هذا التنبؤ، في حالة التخزين، هو الإبلاغ عن الجرعات[2] من النُّكليدات المُشعّة وعن أزمنة وصولها إلى الغلاف الحيوي للأرض، وفي حالة الإيداع

(1) راجع حول هذا الموضوع العدد رقم 46 من مجلة Clefs CEA، ربيع عام 2002 – يتميز الإيداع عن التخزين بطبيعته المؤقتة (وربما لأجل بعيد) ويمكن أن يحصل على السطح أو تحت السطح (في عمق يُقدّر بعدة عشرات الأمتار في الوسط الطبيعي). إن النفايات المُعدّة للتخزين التي ينبغي أن تكون في عبوات، يمكن أن تُجمع في التخاريب التي ربما تجمع في وحدات موزعة في الوسط الجيولوجي.

(2) راجع الجدول من المقال "مُحاكاة التدخل في الوسط الجوي".

الشكل 1- مخطط للتحليل الظواهري لحالات التخزين الذي أعدّته "أندرا" يوضح الظواهر السائدة التي ينبغي توصيفها في المكان والزمان.

في تكملتها للتجريب أو في الحلول محله، هو في توضيح مدى الحالات الممكنة، وتوضيح البحث عن الوسطاء الحاسمة عن طريق، مثلاً، إجراء دراسات الحساسيّة التي يتمّ فيها تقييم كثير من الوسطاء الفيزيائية، والتشكيلات الهندسية (المؤطر A، ما هي المُحاكاة الرقمية؟). وتسمح المحاكاة بتحقيق أدوات عملياتية تكون صدى المعرفة المكتسبة والمثبتة صلاحيتها في زمن مُعيّن.

الآليات الكيميائية - الفيزيائية

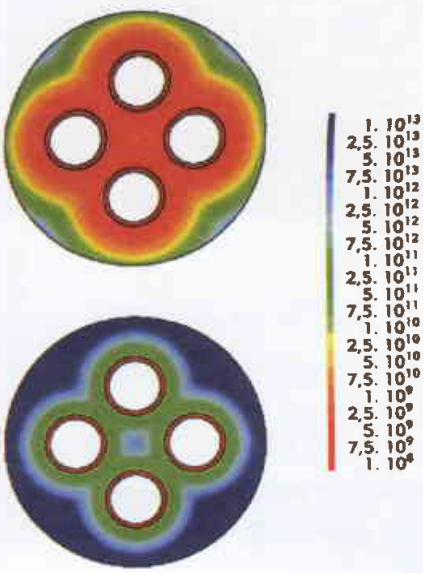
إن الآليات الكيميائية - الفيزيائية التي تنظّم سلوك موقع ما للتخزين أو للإيداع هي عديدة ومُعقّدة. لنبحث، مثلاً، في إطار سيناريو تطوّر عادي لتخزين جيولوجي. ففي أثناء طور حفر كتلة الأرض، ولتكن مُدّته بضع عشرات من السنين، فإن الجريانات تحت الأرض تتغيّر. فيفقد الصخر بجوار الآبار والسراديب إشباعَه بالماء فيضطرب سلوكه الميكانيكي. وبعد أن يُغلق الموقع، تَرفع الحرارةُ التي تُحررها عبوّات النُّفايات درجةَ حرارة التخزين. فيستعيد الصخر إشباعه بالماء، وتتبعه في ذلك المواد المُصنَّعة والردْم ويتطوّر السلوك الميكانيكي لهذا الصخر وتلك المواد نحو حالة توازن. فيحتّ الماء العبوات، وينشحن بالنكليدات المُشعّة. وبعدئذ ترحل هذه النكليدات، أولاً عَبْر المواد، وبعدئذ عبر كتلة الأرض نحو سطحها. وهذه الهجرة مقيّدة بالتفاعلات الكيميائية للنكليدات المُشعة مع المواد والصخور.

ينجم هذا السيناريو عن التحليل الظواهري لحالات التخزين (APSS) الذي أجرته الوكالة الوطنية لإدراة النُّفايات المُشعّة (Andra) في هذه السنوات الأخيرة. ويمكن إعطاء رسم تخطيطي له على مخطط يشار فيه إلى الآليات الكيميائية - الفيزيائية السائدة (الشكل 1) من أجل كلّ سلّم مكاني للتخزين (عبوّات، نخاريب، وحدات، وسط جيولوجي)[1] وكلّ سلّم زماني له.

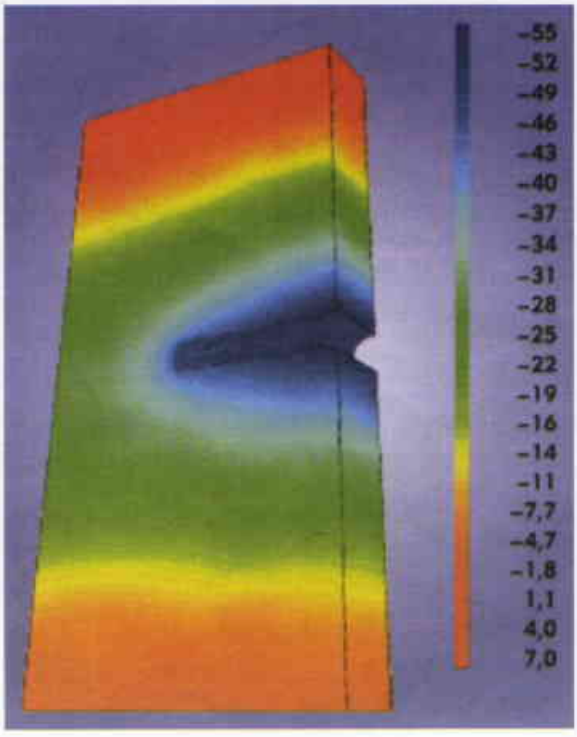
وفيما يخص الإيداع بوجه خاص، سواء كان هذا الإيداع على السطح أم تحت السطح[1]، فإحدى المشاكل المُهمّة تتعلق بإخلاء الحرارة المنتشرة من العبوّات. ويجب أن تُخلى هذه الحرارة من المنشأة، بالحملان القسري مثلاً، حتى تُجتنب أيُّ سُخونة حَرِجة لمواد البنية التحتيّة يُمكن أن تؤدي إلى عطب ميكانيكي. والهدف من ذلك هو المُحافظة على سلامة المواد والعبوّات بُغية استعادتها مستقبلاً.

ثمّة ثلاثة سلالم مكانيّة يُمكن أن تتميز في مُحاكاة التخزين. ففي مُستوى العبوّات، يكون المقصود، التنبؤ بتآكل العبوّة بفعل ماء الموقع: تآكل الحاوية، تخريب القالب (زجاج، إسمنت...)، وبعدئذ تحرر النكليدات المُشعّة (الشكل 2). تجمّع هذه المعرفة في نماذج عملياتية لتستخدم فيما بعد، مقترنة بنماذج سلوك النخاريب والوسط الجيولوجي.

وفي مُستوى نُخروب التخزين،



الشكل 2- مقارنة، على شكل بطاقات التركيز بالنيكل 59 لمدة مليون سنة، لنموذجين اثنين من عبوّات النُّفايات المرصوصة، الأعلى بدون شحنة إضافية والأسفل بشحنة إضافية.



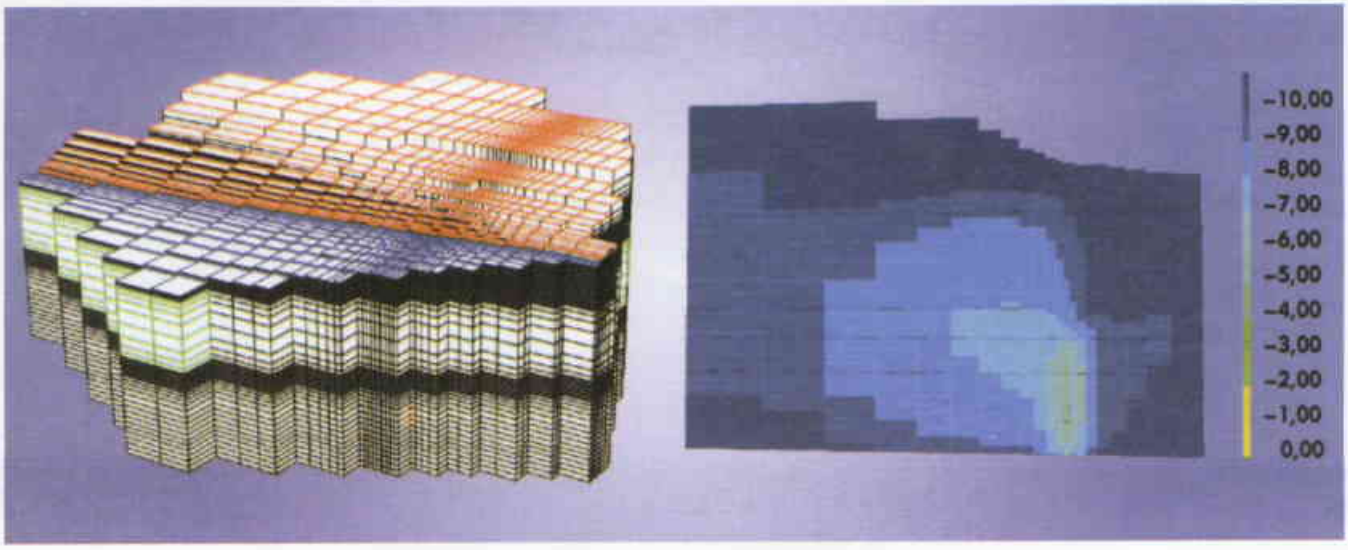
الشكل 3- دراسة الحقل بشحنة هدروليكية (بالأمتار من الماء) حول نخروب لتخزين عبوات النُّفايات.

فإن العوامل المؤثرة كُلّها (الحرارية، والكيميائية...) مُهمة. إن النُّخروب هو إذاً مكان الترابطات المهمة، سواء كانت هدروميكانيكية حرارية أم - هدروكيميائية حرارية. إذا كان بعض هذه الظواهر خطياً، كنقل النكليدات المُشعّة بالانتشار الصرف، فإن الظواهر المترابطة هي على العموم لاخطية بوضوح، كنقل النكليدات المُشعّة على سبيل المثال بوجود ترسيب أو انحلال. إنها تتطلب تقنيات رقمية نوعيّة، لأنه ينبغي أن تحلّ كل المعادلات التي تصف هذه العمليات في آن واحد. يسمح هذا الترابط بتقدير كفاءة العبوّة في بيئة مفروضة وهكذا سيُكوّن الحدّ الأصل للحُجيرة الثالثة: الوسط الجيولوجي (الشكل 3).

أما في مستوى الوسط الجيولوجي، فتُصبح العوامل المؤثّرة ضعيفة كما يُصبح نقل النكليدات المشعّة الظاهرة الوحيدة السائدة. فإذا كانت آليات النقل (بالحملان، الانتشار، التبدد) بسيطة من وجهة نظر المُحاكاة، إلا أن توبولوجيا الوسط (تعدّد الطبقات)، وامتداده (عدّة كيلومترات، أي بالنسبة إلى المحاكي مليون عروة)، وكذلك تباين الخواص في باطنه (تناوب الطبقات النفوذة ونصف النفوذة) تجعل من محاكاة هجرة النكليدات المُشعّة في الوسط الجيولوجي عبر عدّة ملايين من السنين تمريناً غير مبتذل (الشكل 4).

أداة المحاكاة أليانس

إن محاكاة تطوّر التخزين أو الإيداع هي بطبيعتها متعددة الطبيعة الفيزيائية ومتعددة التخصصات، وللاستجابة لهذا الهدف أطلقت مفوضية الطاقة الذريّة الفرنسية، مع أندرا في شهر حزيران عام 2001، مشروع أليانس Alliances (ورشة برمجيات لتوحيد وتحليل وتصميم أشكال التخزين والإيداع). فما هو الهدف من هذا المشروع؟ إنه السماح بتحقيق دراسات حول الكفاءات والأمان، وتسهيل أعمال البحث والتطوير على التخطيطات العدديّة والنماذج الفيزيائية وتجميع المعارف المكتسبة في مختلف خدمات مفوضية الطاقة الذريّة الفرنسية وأندرا والشركاء الآخرين (جامعيين، ومقدمي خدمات خارجيين...).



الشكل 4- تشبيك بثلاثة أبعاد لموقع Bure التجريبي والخطوط المتساوية التركيز باليود 129 (بالمول في المتر المكعب) وفق سلّم لوغاريتمي

إن الاختيارات التي تهندس بنية المشروع كانت ثلاثة ترتيبات. كان الاختيار الأول هو التطوير المشترك. فقد تمَّ تنظيم فريق مختلط من مفوضية الطاقة الذريّة الفرنسية وأندرا، للتعاون على تكاليف التطوير وتسهيل انضمام مجموع المستخدمين مستقبلاً إلى توصيف برنامج المشروع. وأما الاختيار الثاني فيقوم على استخدام المركبات الرقمية. إن أوجه التقدّم الحاصل في هندسة البرمجيات (المؤطر E، التقدّم في هندسة البرمجيات) والتطور في وسائل الحسابات تسمح في الوقت الحاضر بالتفكير في إعادة استخدام المركبات التي طُوِّرت بصورة مستقلة، وجامعة بذلك تجربة مفوضية الطاقة الذريّة في هذا القطاع. أضف إلى ذلك، إن إعادة الاستخدام تسمح باختيار المركب الأكثر ملاءمة لتوصيف حالة مفروضة، وهكذا فإن الكود شيس code Chess، الذي طوّرته، من بين أمور أخرى، مدرسة المناجم، تمَّ اختياره كمحرّك لكيمياء الأرض في المشروع. وأخيراً، فإن بيئة برمجيات أليانس مشتقة من البنية التحتية سالومي Salome (المحاكاة بالبنية المعمارية البرمجية ذات منهجية التطور)، وهذا ما يسمح للفريق بأن يركّز بحثاً ودراسةً على المظاهر النوعية للمشروع، كتهيئة نموذج من معطيات المُستخدم وإدماج المركّبات (الشكل 5).

الشكل 5- بنية معمارية عامة لأداة المحاكاة أليانس

بيئة برمجيات متوافقة

وهكذا فإن أليانس تُزوّد المستخدمين بيئة برمجيات متوافقة تحوي مجموع الأدوات اللازمة لتحليل مفهوم للتخزين أو للإيداع. تصف المركبات الرقمية سلوك العبوّات، والجريانات تحت الأرض، وهجرة النكليدات المُشعة... بينما تشمل بيئة النمذجة المُنمذج الهندسي بالأبعاد الثلاثة (مجموع الأشكال الهندسية الأساس التي يمكن جمعها لتوصيف عبوّة أو نُخروب أو موضع)، وأدوات التشبيك والإراءة، واكتساب المُعطيات وكذلك وظائفية الترابط وتوزيع المركبات على عدّة مُعالجات (المؤطر B، الوسائل المعلوماتية عالية الأداء للمحاكاة الرقمية). وأخيراً، إنّ مجموع مخططات الترابط ومنهجيات الحساب تُقرّ صلاحيتها استناداً إلى حالات مرجعية من التخزينات والإيداعات.

وبموازاة تطوير أليانس، فإن فريق مفوضية الطاقة الذريّة وفريق أندرا اشتركا في تعاونات وطنية متعددة بالمحاكاة الرقمية، عبر تجمع البحث موماس Momas وفي الكيمياء الجيولوجية عبر القطب Geochimie Transport. إن الرغبة الملحّة لدى الهيئتين في جعل تقاسم مسعى المحاكاة أليانس على المستوى الأوربي، يمكن أن تتجسد في اقتراح مشروع متكامل للبرنامج – الإطار السادس للبحث والتطوير التقاني والبرهنة.

مُحاكاة المواد

ج. مارتان

مديرية الطاقة النووية - مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية - مركز ساكلي.

ج. زيرا

مديرية التطبيقات العسكرية - مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية - مركز إيل دوفرانس.

ملخص

في الصناعة النووية، تؤدي المواد دوراً مهماً في رفع كفاءات المفاعلات وإنشاءات دورة الوقود، وتحسين وثوقية اشتغالها وأمانها. ويشكل سلوكها، عندما تتعرّض للإشعاع، الشغل الشاغل لرجل التعدين. ففي الواقع، إن فعل الإشعاعات المؤيّنة وتدفقات النترونات يحرّض تغيراً بنيوياً في المادة، يدعى الشيخوخة، يمكن أن يُترجم إلى تغيير في خواصها. كيف يمكن التنبؤ بسلوك المواد على مدى طويل جداً، وكيف يُستقرأ تطورها خارجياً في شروط تشعيع جديدة، وكيف يتم التنبؤ بخواصها في شروط قاسية من التعرض؟ تظهر المحاكاة الرقمية أداةً لا يمكن تفاديها، إما كأداة داعمة للتجريب تزيد "عائد استثماره"، وإما كملاذ وحيد إن كان التجريب مستحيلاً.

الكلمات المفتاحية: محاكاة، طريقة مونت - كارلو، المسبار الذرّي التوموغرافي، الخوارزميات، نظرية تابعية الكثافة.

مواد معرّضة لشروط قصوى

تنتج أداءات المواد دائماً من التسوية بين تركيبها الكيميائي (أنواع ترابطها)[1]، وبنيتها الذرّية وبنيتها المكروية. إن خبراء الفولاذ خاصة، يعرفون تماماً كيف يستمثلون خواص مادتهم بالتأثير في هذه المركّبات الثلاث. وأثناء عملها، تخضع هذه المواد لعدّة تأثيرات تحوّل من مميزاتها. فالتعرض لتشعيع (مؤيّن أو غير مؤيّن) يؤثر في هذه الأسس الثلاثة. والتحويلات الطفرية والتفاعلات النووية الأخرى تحدث تغيرات في التركيب الكيميائي للمواد، وخاصة للوقود. والإثارات الإلكترونية تغير الترابط الكيميائي في المواد العازلة. والتصادمات النووية، وهي تقذف ذرّات من مواضع توازنها، تؤثر في البنية الذرّية، مما يؤدي إلى الأمورفيّة (اللابلوريّة)، وإلى تولد عيوب نقطية كالفجوات (مواقع خالية) والمواقع البينية (ذرّات موجودة بين مستويات الشبكة). ويمكن أن تكون الطاقة الحركية للذرّات المقذوفة كافية لإزاحة ذرّات أخرى وبالتالي لإثارة سلسلة من الانتقالات الذرّية. إن الهجرة البطيئة وتجمع العيوب النقطية المتولدة تُحرّض تحركات في البنية المكروية: تكوّن رواسب أو انحلال رواسب، تُفسد المقاومة الميكانيكية (القدرة على تحمل جهود كبيرة) والصمود أمام التآكل، وتغير شبكة الانخلاعات، التي تتحكم في لدونة المواد، وإعادة التبلور...

ثمّة خصوصية أخرى للمجال النووي هي التكلفة المرتفعة جداً، وأحياناً، غياب كامل للعودة إلى التجربة. وعليه فهل المطلوب أن نتنبّأ بسلوك المواد على مدى يتجاوز أحياناً كل إمكانية تجريبية بالمقياس الحقيقي: فهل يمكن أن نسرع شيخوخة المواد بطريقة منضبطة؟ كيف يمكن أن نستقرئ خارجياً في شروط جديدة من التشعيع، يتعذر بلوغها في الوقت الحاضر (مثلاً في حالة مفاعلات الاندماج أو مفاعلات ذات الدرجة العالية من الحرارة)، وتطور المادة غير المعروف إلا في شريحة محدودة جداً من الشروط (طيف طاقة النترونات، مجال ضيق من درجة الحرارة...)؟

تتعرض المواد لشروط قصوى (تصادمات نووية، صدمات شديدة جداً، واقتحامات في درجات حرارة وضغوط عالية جداً)، هي شروط تستحيل فيها المراقبة المباشرة، في السُلّم الملائم والمحدّد في الزمن. فهل يمكن أن نتنبأ بخواص المواد في هذه الشروط القصوى المتعذر بلوغها على التجريب الأولي؟

تحثّ هذه الأسئلة جهداً متواصلاً لتطوير طرائق لنمذجة المواد تنطلق من المقياس الذي تكون فيه فيزياء العمليات مؤكدة نسبياً، وتسعى إلى إعادة توليد السلوك الماكروسكوبي المفيد عملياً. لهذا، كله، ثمة أربعة أنواع كبيرة من الأدوات.

أدوات نمذجة المواد

تتصنّف أدوات النمذجة بشكل طبيعي في فئات أربع، بحسب الموضوع:

- نمذجة الرابطة الكيميائية (نماذج التماسك). المقصود هو متابعة تطور الروابط الكيميائية أثناء عملية التآلف. إنها حسابات في البنية الإلكترونية تنبئية بقدر الإمكان؛
- نمذجة في السلّم الذرّي للأحداث السريعة (تصادمات نووية، انتشار أمواج الصدم، إضرار). تقتضي هذه الحوادث عدداً كبيراً من الذرّات أثناء أدوار عديدة من الاهتزاز الذرّي. إن الديناميك الجزيئي هو الأداة المناسبة؛
- نمذجة الحركيات البطيئة في التعتّق (الشيخوخة)، أي في تطور البنية المكروية أو استرخائها. هناك عدّة طرائق معتمدة، حتمية أو عَرَضية، في السلالم الذرّية أو المكرونية ($1\mu m=10^{-6}m$) أو الماكروسكوبية؛
- الانتقال من البنية المكروية إلى خواص الاستعمال. في هذه المرحلة، نادراً ما يتميز القطاع النووي عن القطاعات الأخرى، وهو في تطور سريع.

نمذجة تماسك الأجسام الصلبة

الأداة هي المحاكاة "انطلاقاً من المبادئ الأولى" (من البداية – ab initio): تُعدّ المادة كتجمع من النوى والإلكترونات؛ وهذه الأخيرة، بسبب كتلتها الصغيرة جداً، تتكيف آنياً مع حركة النوى. والصورة الحاصلة هي صورة كثافة إلكترونية يتغير شكلها متتبعاً مواضع النوى، وتتعين فقط بهذه المواضع. إن تعيين الكثافة الإلكترونية المتحرّضة يستدعي حتماً ميكانيك الكم، وهناك نظرية لافتة للنظر، تسمى النظرية التابعية للكثافة (DFT)، معالجة بتقريبات مختلفة، تسمح بتحقيق هذه الحسابات لعدد كبيرمن الذرّات في زمن معقول. وفي الختام، يتصرف المنمذج بالطاقة الكلية لعينة من المادة كتابع لإحداثيات النوى فقط.

ومن وجهة نظر رقمية، تكمن المسألة الأساسية في حل

(1) تحدث الرابطة المعدنية بين العناصر ذات الكهربية الموجبة (التي تحوي طبقتها الخارجية قليلاً من الإلكترونات) فالكترونات الطبقات الخارجية غير متموضعة. والرابطة الأيونية تربط عناصر ذات كهربية موجبة شديدة بعناصر ذات كهربية سالبة شديدة (تحوي طبقتها الخارجية كثيراً من الإلكترونات) تتأسر إلكترونات الطبقات الخارجية على الأيونات السالبة. وتكون الرابطة تكافئية عندما يؤلف إلكترون من الطبقة الخارجية للذرة مع إلكترون من الطبقة الخارجية لذرة مجاورة قرينة زوجاً مشتركاً بين الذرتين. هذان الإلكترونان مستقران بين الذرتين وتشترك ذرة مع عدة ذرات مجاورة لإشباع طبقتها الخارجية.

معادلة شرودنغر لعدد كبير من النوى والإلكترونات وتغطي القسم الأكبر من جدول التصنيف الدوري للعناصر. إن حجوم المنظومات المفروضة تبدأ من مئات الذرّات إلى عدّة آلاف منها حسب التسوية التي يجريها الرقميون بين الدقة والسرعة.

ما لعمل بهذه الكمية المدهشة من المعطيات المتولدة هكذا؟ ينبغي أولاً وصف النموذج المستعمل، لأن نقطة الانطلاق هي تقريب لمعادلة شرودنغر. فالخواص البنيوية كلها يمكن أن تقيَّم: معادلة الحالة، مخطط الأطوار، طيف الاهتزازات الذريّة (مجموع أنماط اهتزاز البلّورة). إنّ تماسك الأجسام الصلبة وحجمها عند التوازن وخواصها المرنة والخواص الاهتزازية للنوى تُستعاد كلها استعادة جيدة جداً على وجه العموم (بتقريب عدة أجزاء بالمئة). ومخططات الأطوار تستعاد بارتياب أكبر (عدة عشرات الأجزاء بالمئة). أما الأكتينيدات فتشذ شذوذاً لافتاً، كما يبيّنه الشكل 1، الذي يمثل الحجم التوازني الملاحظ والمحسوب لهذه العناصر. وإن الحالة الجيدة للأكتينيدات، المسماة خفيفة، تتدهور تدريجياً بدءاً من البلوتونيوم الموجود عند الملتقى. فينبغي في هذه الحالة إدخال نمذجات أكثر تطوراً تتجاوز الحقل الأوسط[2].

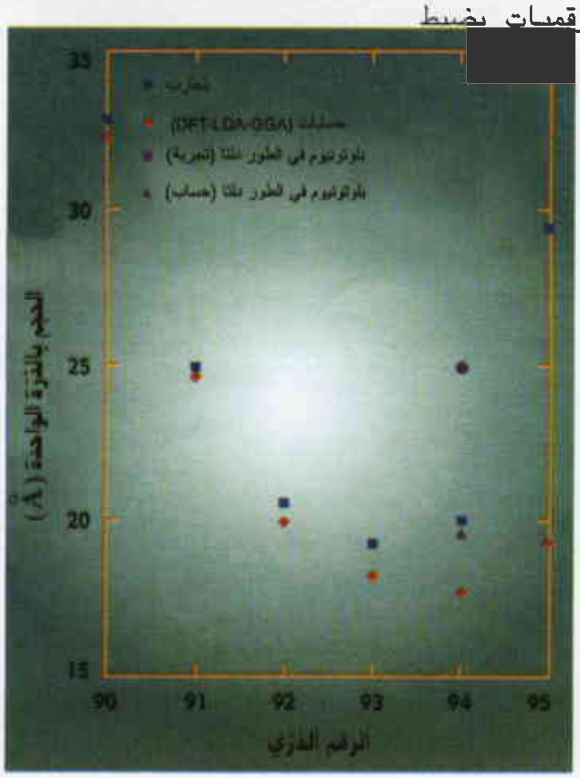
إن تحديد مخطط الأطوار، بخاصة الانتقال صلب – سائل، يطرح مسألة أكثر تعقيداً، لأن المحاكاة في الواقع تجري في وسط لا متجانس سائل – صلب أكبر كثيراً من أن تتم محاكاته بمقاربة من البداية. ولكي نتمكن من إجراء حسابات على مثل هذه العينات الكبيرة، فإن المتعامل بالرقميات يضبط وسطاء كمون نصف تجريبي لاستعادة معطيات الحساب من البداية على أحسن وجه. لقد اختبر هذا الإجراء، أولاً على منحني انصهار الحديد، ثم وسّع على الأكتينيدات (الشكل 2).

نمذجة الأحداث السريعة في السلّم الذرّي

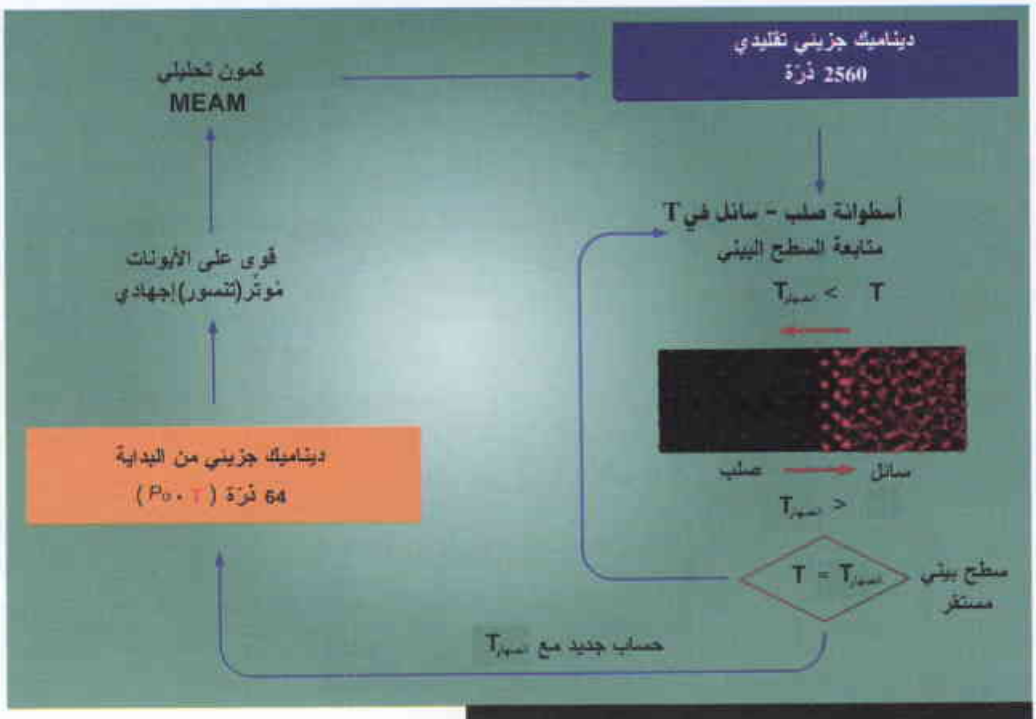
الأداة هي الديناميك الجزيئي. لنعتبر مجموعة من الذرّات مترابطة فيما بينها بأحد النماذج الطاقية الموصوفة أعلاه. ففي حدود الميكانيك التقليدي يعطى مسار الذرّات باستكمال معادلة نيوتن: ويساوي تسارع ذرّة ما إلى القوة التي تؤثر فيها مقسومة على كتلتها؛ وتحسب القوة بتغير الطاقة الكامنة مع الموضع. وتُكامل هذه المعادلة بوساطة خوارزمية سريعة جداً ودقتها كبيرة. فيتوفر للمنمذج إذاً مسار المنظومة في فضاء الأطوار (المواضع والاندفاعات). وتسمح الحواسيب الحالية بإجراء مثل هذه الحسابات لمجموعات تحوي حتى مليار ذرّة في أثناء مدّة فيزيائية يمكنها أن تبلغ عدّة مئات النانو ثانية ($1ns=10^{-9}s$) للمجموعات الصغيرة، شريطة أن يكون المتعامل بالرقميات قد استعان بكمونات نصف تجريبية. وعندما تحسب الطاقة الكامنة بدءاً من المبادئ الأولية، لا يمكن معالجة أكثر من ألف ذرّة أثناء بضعة بيكو ثانية ($1ps = 10^{-12}s$).

ماذا يفعل المنمذج بهذه المسارات؟ إنه يفعل شيئين مختلفين جداً. فعندما يسمح الميكانيك الإحصائي، بحسب مقادير ماكروسكوبية بإجراء التكامل على طول المسار وهذا، في مجموعات ترموديناميكية مختلفة (مثلاً بتثبيت الطاقة الكلية، والحجم وعدد الجسيمات، أو درجة الحرارة، أو الضغط...). فإن لم تكن الحالة هذه، فيلاحظ عن طريق أدوات الإراءة، بعض الذرّات التي يكون ترتيبها هو مصدر تغيرات خواص المادة المنمذجة. فالمقصود، والحق يقال، "مجهرية رقمية" حقيقية، فيمكن للباحث، بتقنيات مختلفة، أن يلاحظ، ويميّز وأن يرى عمل التشكيلة الذرّية التي عاينها. فهذا الإجراء مثلاً، هو المصدر الأهم للفكرة التي يكونها الفيزيائي اليوم عن شلالات

(2) مثل طريقة LDA+U



الشكل 1- في حالة الأكتينيدات، التي بنيتها الإلكترونية معقدة بفعل الامتلاء التدريجي للطبقة الإلكترونية الفرعية 5f، تكون الحسابات التي أجريت بنظرية تابعية الكثافة (DFT) في التقريب LDA-GGA تتفق جيداً والتجربة، حتى عنصر البلوتونيوم، ذي الرقم الذرّي (عدد البروتونات) 94. وتتدهور الحالة بشدة عند البلوتونيوم في الطور دلتا (مكعب مركزي الوجوه) وأكثر عند الأمريسيوم (رقمه الذرّي 95). (أجرى الحسابات ن. ريشار و م. بنيكو).



الشكل 2- دورة حساب تهدف إلى تعيين من البداية منحني انصهار جسم صلب. هناك كمون نصف تجريبي MEAM محكم على نتائج الحسابات من البداية التي أجريت على منظومة صغيرة متوافقة مع إمكانيات الحواسيب (علبة إلى اليسار) في شروط معينة من درجة الحرارة والضغط. ومن ثم يستعمل هذا الكمون في محاكاة تقليدية (علبة إلى اليمين) على منظومة أكبر بكثير، في الشروط الترموديناميكية نفسها. ويتم بلوغ درجة الانصهار $T_{انصهار}$ عندما يستقر السطح البيني صلب - سائل. هناك تطبيق لهذه الطريقة أدى إلى إعادة تقييم مخطط الأطوار للحديد.

الانتقالات الذرّية، المرحلة الرئيسية من تضرر المواد بالتشعيع.

لقد بدأت هذه التقنيات تثمر في حالة مسائل اللدونة أو التشقق، حيث السلّم الذريّ هو الملائم.

نمذجة التطور البطيء للبنية المكروية

في أغلب الأحيان، يراقب تطور البنية المكروية من انتشار العيوب النقطية أو تكدّسها. ففي هذه الحالة، تسمح عدّة تقنيات بنمذجة واقعية، أي وفق سلم زمني صحيح، "الطريق الحركي" تتبعه البنية المكروية. إنّ طريقة مونت - كارلو الحركية في السلم الذرّي هي الأكثر دقة، لأنها تحاكي تسلسل القفزات المتتالية للعيوب، آخذة بعين الاعتبار كل الفيزياء المعروفة حول هذه القفزات، فالأزمنة التي يمكن أن تحاكي قد تكون طويلة جداً. لقد تمّت محاكاة حتّى مليار قفزة من العيوب في الحديد، وهذا يمثل 87 سنة في درجة حرارة حوض مفاعل بالماء المضغوط. وتبقى الحجوم صغيرة لأن المنمذج يعمل في السلم الذرّي (المؤطر).

سلاسل من الانتقالات في نموذج من محلول ممدد من النحاس في الحديد، على أثر تصادم بطاقة 10 keV:

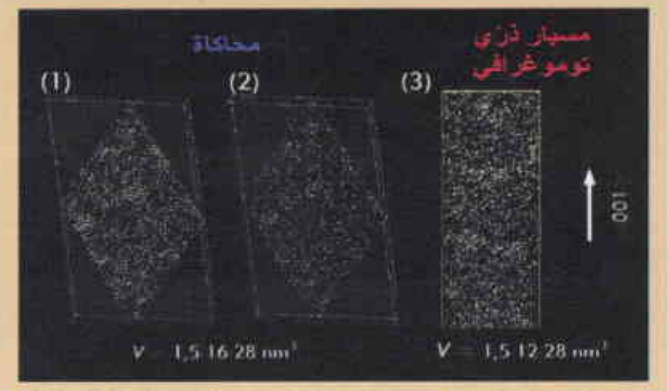
(a) بعد 0.21 ps (وهي تقريباً اهتزازتان ذرّيتان) نرى أن عدداً كبيراً من الذرّات (باللون الأحمر) تُطرد من مواضعها البلورية، التي تغدو خالية (فجوات باللون الأصفر)؛

(b) وبعد 15.27 ps (تقريباً 150 اهتزازة ذرّية) تجد معظم الذرّات المقذوفة موضعاً بلورياً (بالأزرق). وتبقى بعض العيوب النقطية، معزولة أو مكدّسة؛

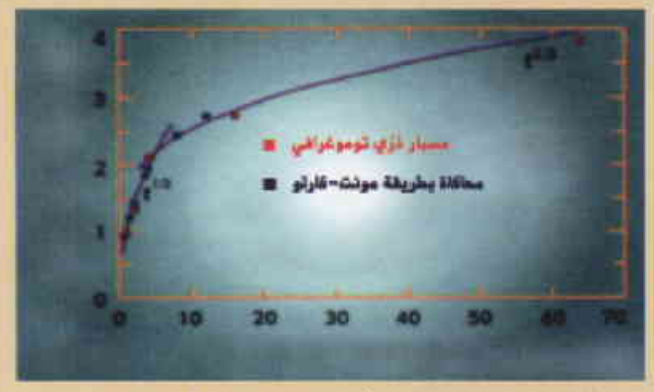
(c) وفي سلم النانو ثانية، إن كداسات المواقع البينية متحركة وتزيل الفجوات على طريقها. وبعد 3 ns، إن شفاء المعدن متقدم كثيراً. فلا تختزن العيوب المتبقية إلا بعض الأجزاء من ألف جزء من الطاقة المنقولة بالتصادم.

مقابلة المحاكاة بالتجربة: المسبار الذرّي للتصوير الإشعاعي الطبقي المقطعي (التوموغرافي)

إن طرق التحول في السبائك يمكن أن تلاحظ مباشرة في السلم الذرّي، بفضل المسبار الذرّي التوموغرافي. بعد اقتلاع الأيونات واحداً واحداً من رأس معدني قدّ من السبيكة، وبعد تسريعها في حقل كهربائي وقياس زمن طيرانها إلى مكشاف تموضعي، يمكن أن نرجع إلى الأصل فنستدل على التوزع المكاني لمختلف الذرّات المكونة للسبيكة. إن الحجوم القابلة للتحليل بهذه التقنية هي من نفس مرتبة الكِبْر للحجوم التي تحاكى بطريقة مونت – كارلو الحركية في السلم الذرّي. وتكون المقابلة المباشرة للمحاكاة بالتجربة قابلة للتحقيق عندئذ، وقد تمت بنجاح، بالتعاون مع جامعة روان Rouen، في الحالة المعقدة نسبياً للترسيب في السبائك الثلاثية نيكل – كروم – ألومينيوم (Ni- Cr- Al). عتقت سبيكة من Ni-14.8at%، و Cr-5.2at%، و Al في الدرجة



الشكل a- توزيع ثلاثي الأبعاد للألومينيوم وفق الاتجاه <001> في السبيكة Ni-14.8 at.%Cr-5.2 at%Al عُتق في درجة الحرارة °C 600 أثناء ساعة واحدة. ففي (1)، ترى تشكيلة حاصلة بالمحاكاة مع 100% من ذرّات الألمنيوم ممثلة. وفي (2)، ترى تشكيلة حاصلة بالمحاكاة مع 50% من ذرّات الألمنيوم ممثلة (يوافق هذا العامل ½ مردود الكشف بالمسبار الذرّي التوموغرافي). وفي (3)، ترى التوزع التجريبي الحاصل بالمسبار الذرّي التوموغرافي في هذه السبيكة نفسها.



الشكل b- حجم الرواسب بتابعية زمن التعتق، الملاحظ بالمسبار الذرّي التوموغرافي والمحاكى بطريقة مونت - كارلو.

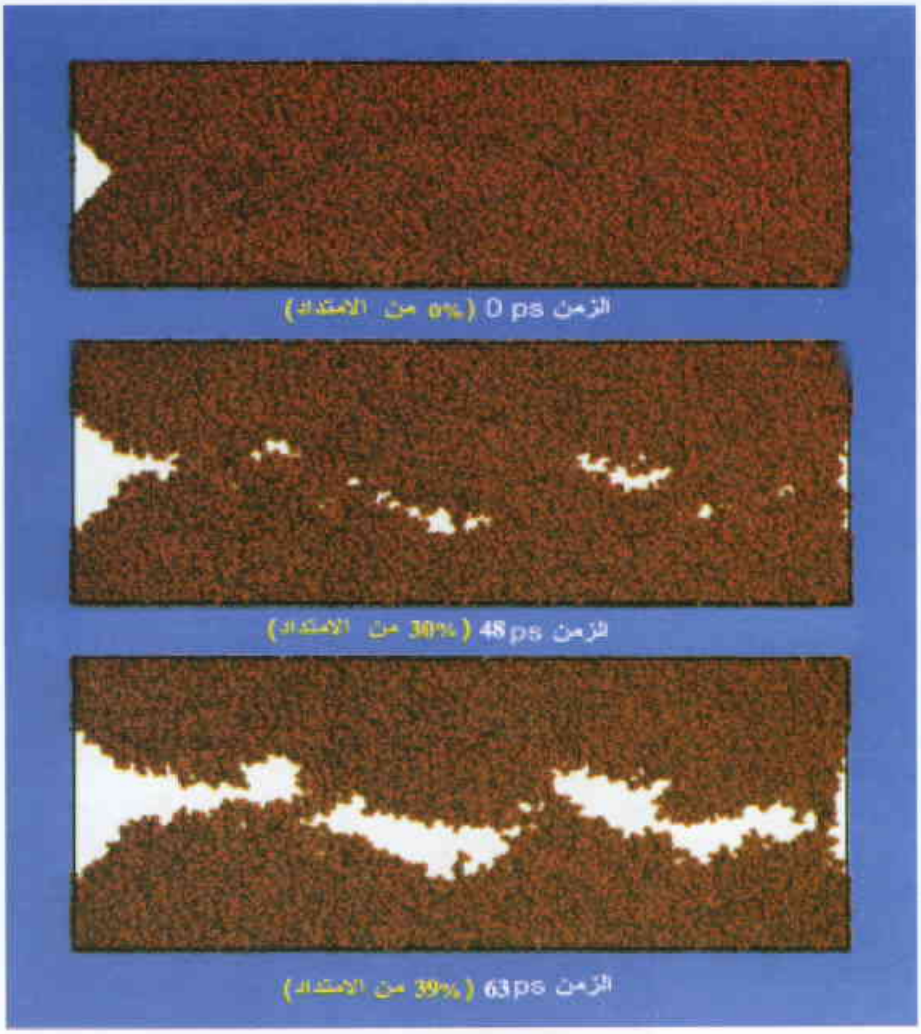
من الحرارة 600°C في مدد متزايدة من الزمن وفحصت بالمسبار الذرّي التوموغرافي في مراحل مختلفة من تفككها. لقد لوحظت طريق حركية من نوع "تكوّن البزرة–نمو– اندماج"

فمن أجل المحاكيات الرقمية، جُعل النموذج وسيطاً وفق المعطيات التجريبية المتوفرة في الأدبيات [مثل حدود الانحلالية في السبائك الثنائية والثلاثية، ومثل بعض معاملات الانتشار، والبنية البلّورية للمركب $Ni_3(Al,Cr)$ التي تظهر عند الترسيب]. أظهرت مقابلة النتائج المحاكاة بنتائج التوموغرافيا (الشكل a) أن المحاكاة بطريقة مونت – كارلو تصف وصفاً صحيحاً بشكل كيفي وكمي الطريق الحركية للتحول: بعد التكوّن المبكر لمناطق مرتّبة غنية بالألومينيوم (بقطر 1nm تقريباً)، تنمو هذه المناطق وتغتني بالألومينيوم، ثم في مرحلة لاحقة، تَفْقَر بالكروم. تأخذ المحاكاة بالحسبان تماماً هذه العملية، كما تأخذ بالحسبان أيضاً بصورة كمية تطور كثافة الجسيمات، وتركيب الأطوار وحجم الجسيمات مع الزمن (الشكل b).

وبواسطة أدوات نظرية أحكمت حديثاً (طريقة ذاتية التوافق للحقل الوسطي الحركي)، يتمكن المنمذج من تجاوز هذا التوصيف الدقيق جداً (هذه الذرة في هذا الموقع في كل لحظة) إلى توصيف احتمالي. إن التراكيز في أي نقطة بتابعية الزمن هي حلول لمعادلات تفاضلية جزئية مترابطة. فنجد من جديد الطرائق المسماة "حقل الطور" لكن مع أساس ذرّي يضفي عليها تعريفاً واقعياً للزمن الفيزيائي، مع التخلص تماماً من السلم الذرّي (الشكل 3).

ثمة تقنية يجري تطويرها في مركز ساكلي لمفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية هي طريقة مونت – كارلو الحركية على الحوادث (EKMC). إن هذه الطريقة واعدة، لأنها تتحرر من السلم الذرّي وتتآلف آلياً مع تغيرات السلم الزمني. فترسم البنية المكروية تخطيطياً بخطوط الانخلاعات، ووصلات الحبيبات وكدس العيوب؛ والأنواع المتحركة (عيوب نقطية وشوائب صغيرة وهليوم متولد بتفاعل نووي...) تتعين بمواضعها. ثمة نماذج بسيطة تصف احتمال أن يلتقط كل واحد من عناصر البنية المكروية نوعاً متحركاً مفروضاً، خلال فترة زمنية معينة. وتُعين خوارزمية مونت – كارلو تسلسل مختلف الحوادث والمدد التي تفصل بينها. تفتح هذه الخوارزمية الطريق أمام نمذجة ظواهر معقّدة (مفعول حجم شلالات الانتقالات الذرّية وترسيب بفعل حفّاز من الشوائب، ومنافسة بين مورفولوجيات متنوعة لكدس من العيوب في مواد معقّدة نسبياً. وهناك حجوم من بضعة μm^3

إن زجاج السليس مشهور بأنه هش، ولكن آلية انتشار الصدع لم تكشف إلا حديثاً، بالديناميك الجزيئي. تنفتح بعض المسامات وتنمو حتى تتصل فيما بينها بجوار ذرّات الأكسجين "غير المجسورة" أي غير المتقاسمة بين رباعيي الوجوه المتجاورين من SiO_2 وقد قادت المحاكاة نفسها التي أجريت على شكل بلّوري من SiO_2 إلى انقطاع بالانفلاق (انقطاع حرّ على طول مستوى التبلور)، كما شوهد تجريبياً.



محاكاة ترسب كاربور النيوبيوم، في الفولاذ بطريقة مونت - كارلو الحركية في السلم الذرّي

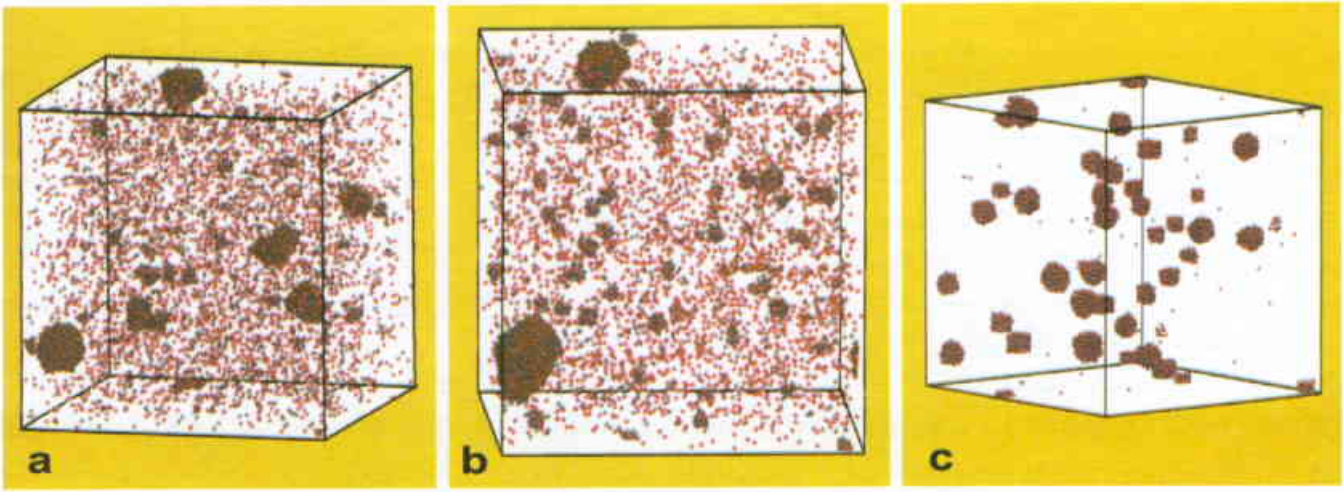
(a) بعد ثانيتين، أنتج المحلول الصلب الابتدائي (ذرات النيوبيوم معلّمة بالأحمر، وذرات الكربون بالرمادي) مجموعة انتقالية من كاربور الحديد، (كدس رمادي واصفر)؛

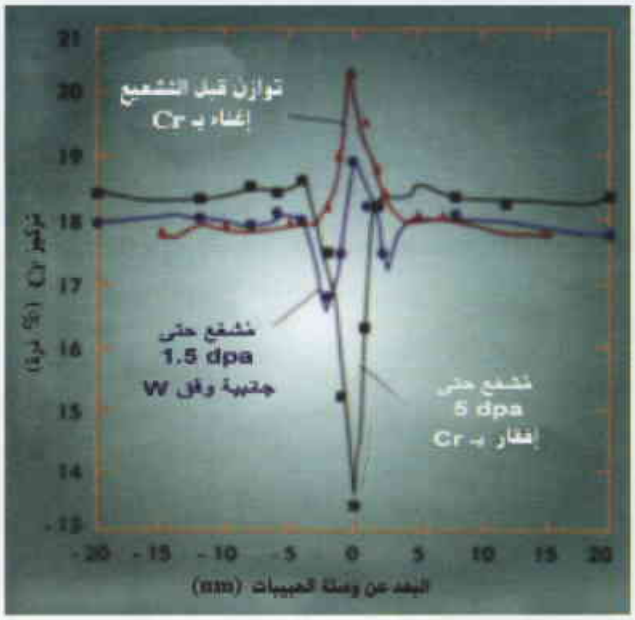
(b) وبعد 30s، تظهر رواسب مستقرة من كاربور النيوبيوم، فتؤدي وهي تتطور إلى انحلال مجموعة كاربور الحديد؛

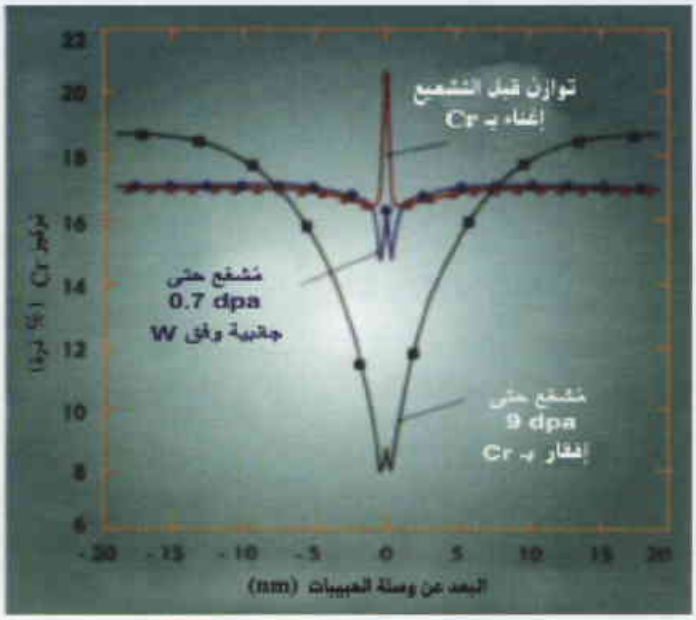
(c) وبعد نصف ساعة، تبقى فقط مجموعة كاربور النيوبيوم. إن الخوارزمية قادرة على أن تدير أمر سلّمين للزمن أوليين مختلفين، سلم (سريع) لقفزات الكربون البيني وسلم (بطيء) لقفزات الفجوات التي تسمح بانتثار الحديد والنيوبيوم.

تجري عادة محاكاتها أثناء أزمنة طويلة (ساعة أو أكثر). وإنّ هذه السلالم الزمانية والمكانية تتكيف من جهة أخرى آلياً (تلقائياً) مع تطور البنية المكروية.

وأخيراً، يلجأ المنمذج غالباً إلى نماذج من الحركية الكيميائية المتجانسة لتوصيف المنافسة بين توليد العيوب





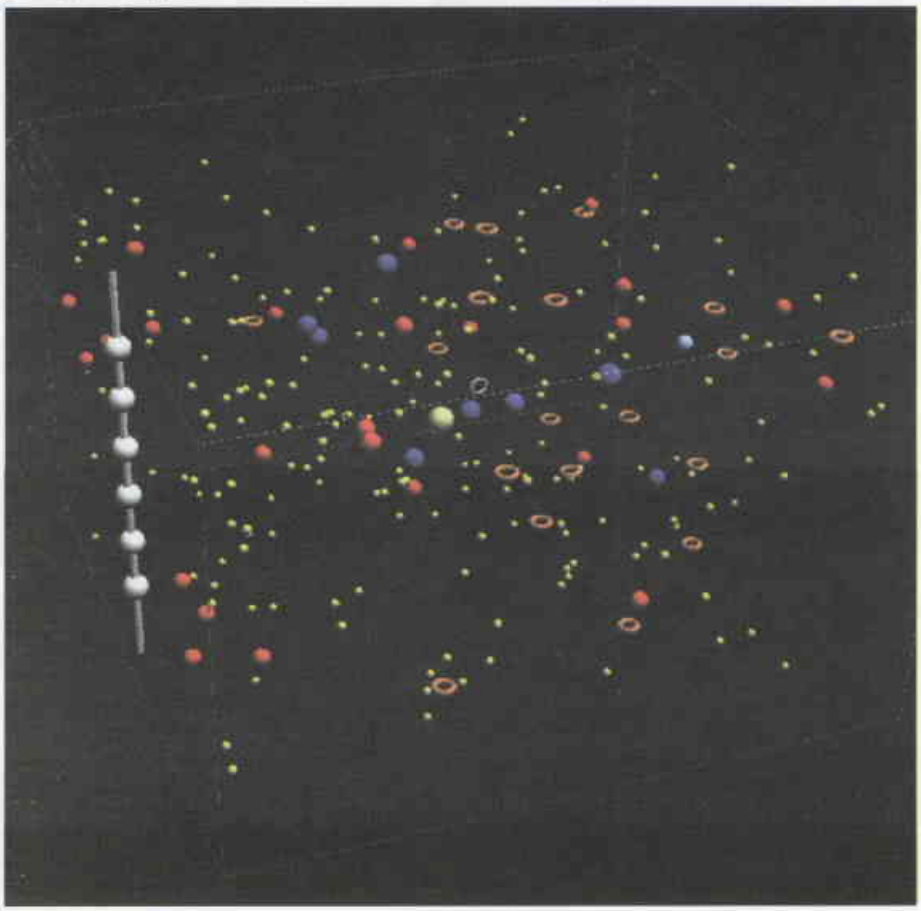


الشكل 3- الفرز المحرَّض، بالتشعيع، في وصلات الحبيبات لفولاذ أستنيتي (مركب من حديد وكروم ونيكل وقليل من الكربون). في اليسار، جانبية لتركيز الكروم (Cr) بتابعية البعد عن وصلات الحبيبات بجرعات تشعيع متزايدة تقدر بال dpa (انتقال بالذرة الواحدة)، تمت ملاحظتها بالمجهرية الإلكترونية التحليلية. وفي اليمين، جانبية تركيز Cr المتنبأ بها بالنموذج الحركي الكيميائي على شبكة طوّرت في مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية.

بالتشعيع وإزالتها بإعادة الاتحاد، والتكتل أو الانتشار نحو انقطاعات الشبكة البلّورية. هذه التقنيات قوية جداً لإعطاء هذه البنية المكروية بتابعية شروط التشعيع.

المرور من البنية المكروية إلى خواص الاستعمال

ليست هذه المرحلة خاصة بالمجال النووي وتستفيد من



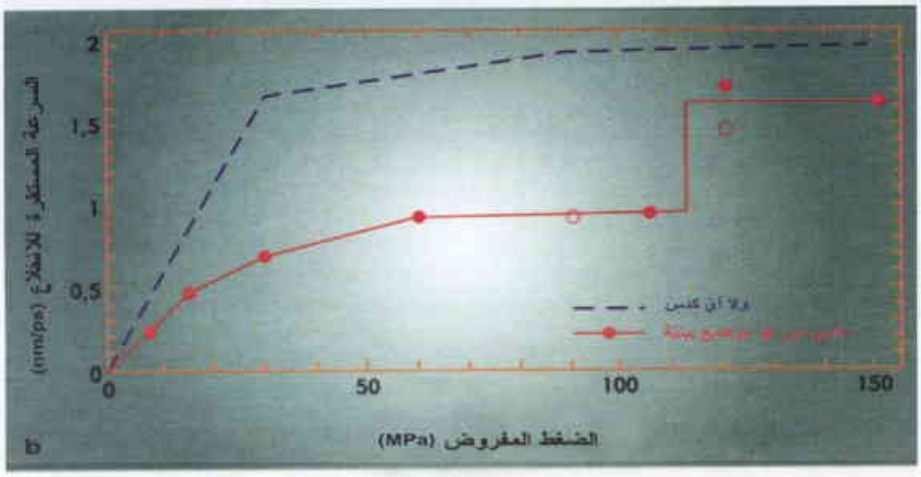
طريقة مونت - كارلو على حدث (Jerk). محاكاة البنية المكروية أثناء تطورها في النيكل الذي يحوي عدّة أجزاء من مليون جزء من الهليوم وشائبة أخرى، عند تشعيع يحصل من تراكب شلال كبير من الانتقالات وعدة شلالات صغيرة عديدة لاحقة. إن العناصر ذوات البنية المكروية المأخوذة بالحسبان تحوي انخلاعاً وحلقات وتجاويف (تجمع فجوات) تحوي قليلاً أو كثيراً من الهليوم، ومكدسات مع شوائب مأسورة أو بدونها (الحجم المحاكى $1\mu m^3$ أثناء نصف ساعة).

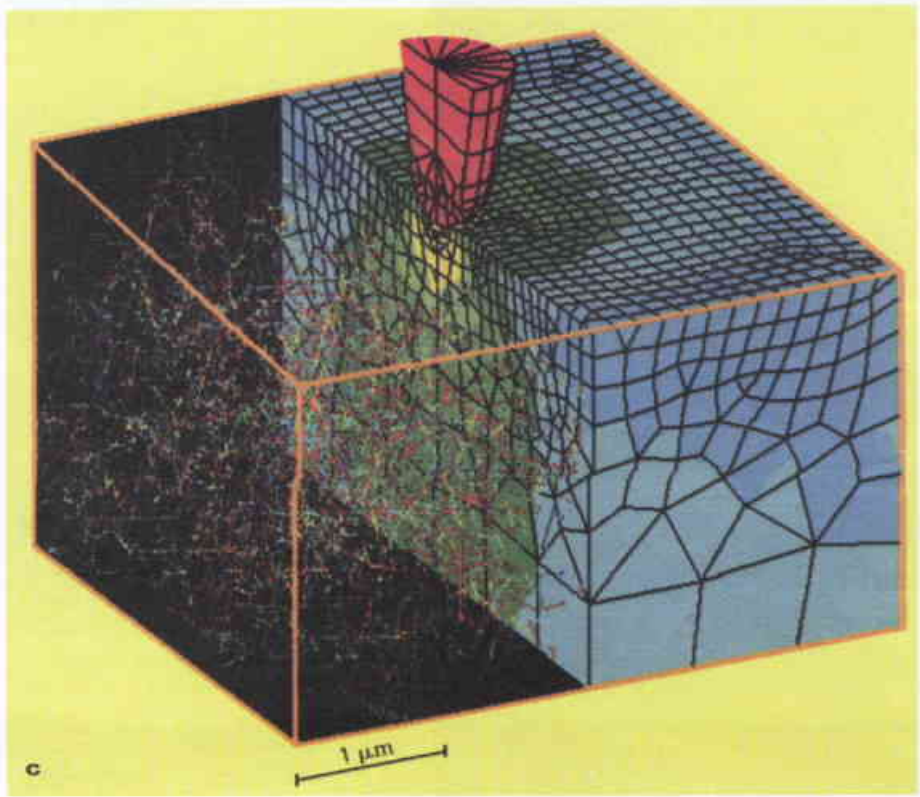
الوفرة الحالية لطرائق النمذجة. إنه الميدان النفيس للنمذجة المتعددة السلالم التي يمكن أن تأخذ الأشكال الأكثر تنوعاً، وأكثرها شيوعاً هو إدخال مقادير مُقيَّمة بنمذجات ذات سلّم دقيق (مثل قوة تثبيت الانخلاعات بكُدْس من العيوب) في النماذج البسيطة لصناعة التعدين في الفيزياء التقليدية (مثلاً عند حافة الجريان) (الشكل 4).

إن النمذجات الدقيقة قادرة أيضاً على إعطاء مكونات النظريات المتقنة التعقيد (مثل نظرية استقرار الأطوار في السبائك التي تقع تحت التشعيع)... تجدر الإشارة إلى أنّ بعض الترابطات بين النماذج أو بين نموذج (لتطور بنية مكروية مثلاً) وبين نظرية ماكروسكوبية (مثل قانون السلوك في ميكانيك الأجسام الصلبة) ليست دوماً قابلة للتحقيق في حالة الظروف الراهنة. هناك تطويرات نظرية ينبغي إجراؤها.

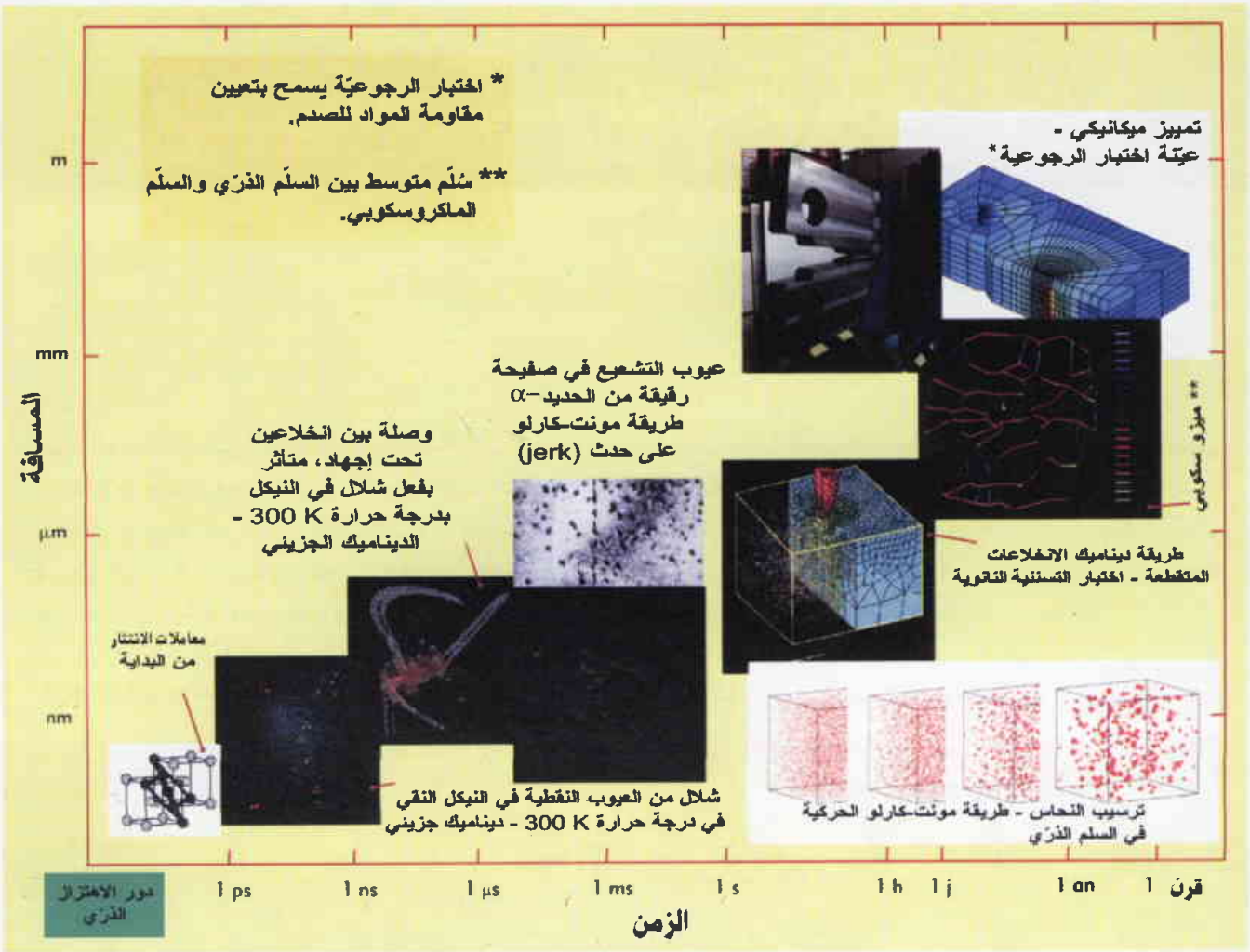
المحاكاة والتجربة: مقابلة ضرورية

من التحديات الرئيسية والرهانات الصناعية لنمذجة المواد توفر نمذجة تنبئية عن كفاءاتها. ولا يمكن أن تكتسب هذه النمذجة إلا بدمج المعطيات المكتسبة في السلالم الدنيا عن طريق النظريات الظاهراتية. تتكون مجموعة المعارف حول هذه المقاربات شيئاً فشيئاً، فتسمح لكل منها في مجاله (الميكانيك، التآكل...) بأن يستدعي هذه الأدوات كما هو الأمر في مختبر رقمي واسع لنمذجة المواد في سلالم متعددة.





الشكل 4 - إنّ التقسية المتحرّضة بالتشعيع، هي مثال عن النمذجة المتعددة السلالم (تجد التقسية أصولها في إزالة العيوب النقطية، المكدسة، على الانخلاعات).
(a) محاكاة بالديناميك الجزيئي لتدبيس (تعليق بالدبابيس) انخلاع (لم يعد بإمكانه الانتقال) بفعل كدس من المواقع البينية المتولدة بالتشعيع.
(b) على هذه المحاكاة قياس قوة إرساء الانخلاع بفعل كدس المواقع البينية.
(c) المحاكاة بالطريقة المسماة المحاكاة بديناميك الانخلاعات المتقطعة (DDD) لاختبار التسنّية النانوية التي تسمح بتوضيح التقسية الناجمة عن التشعيع. يقوم هذا الاختبار على وضع رأس من الماس على المادة وتعيين مفعول القوة المطبقة في عمق اختراق الرأس، وذلك في السلم النانومتري.



لوحة طرائق نمذجة المواد، المتوفرة أو التي تحضر، في سلالم مختلفة للمكان والزمان.

ونظراً إلى تعقّد المواد وتطورها مع الاستعمال، وبخاصة تحت التشعيع، فإن من المستحيل تطوير نماذج بدونٍ مقابلة دائمة مع التجربة. إن التجارب "الأولية" تقف حَكَماً لواقعية النمذجة ومتانتها، أشد صرامة من قياسات الخواص المركّبة الماكروسكوبية للمواد. إن مثل هذه التجارب الأولية نادرة جداً، فينبغي تشجيعها بالتوازي مع تطوير طرائق النمذجة.

سيزدهر هذا الإجراء بالفعل المشترك لزيادة وسائل الحساب والإراءة زيادة كبيرة ولنمنمة الأجهزة التجريبية.

نمذجة الجزيئات الكبُرويّة البيولوجية

م. ج . فيلد
معهد البيولوجيا البنيوية
ج. بيار إبل
مديرية علوم الأحياء - غرونوبل

ملخص

تظهر المحاكاة على أنها الأداة المناسبة التي تسمح بأحسن استثمار للكمية الضخمة من المعطيات التي تتأتّى من إطلاق مشاريع هامة في دراسة الإرث الوراثي لمختلف الكائنات الحية . في هذا الإطار، تهتم مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية خاصة بنمذجة بنية المنظومات البيولوجية ووظيفتها كالبروتينات. وإضافة إلى تعميق المعارف، سيكون لهذه الأبحاث إسقاطات صناعية، وطبيّة وصيدلانية، كتطوير مضادات حيوية (صادّات) جديدة، وأدوية، وجزيئات مقلدات حيوية...

الكلمات المفتاحية : نمذجة، جزيئات كبُروية، جينوم، بروتينات، مضادات حيوية، طفرة، حموض نووية.

تفصيل لدريئة مطياف كتلي يظهر جزءاً من عيّنات البروتينات (التي هضمتها خميرة التريبسين trypsine) بغية إجراء تحليل بروتيني في مركز مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية في غرونوبل.

المحاكاة في خدمة البيولوجيا

شهد القرن العشرون تحولاً في مفهومنا عن البيولوجيا. وكان هذا التطور قد حصل في فروع هذا العلم كلها وتأسّس، في قسمه الأعظم، على المفاهيم الطليعية الضخمة التي اكتسبت بفضل دراسة الكائنات الحية على المستوى الجزيئي. وتشهد على ذلك الدراسات التي جرت في هذه السنوات الخمسين الأخيرة، سواء في توضيح البنية الذرّية للجزيئات الكبْرويّة البيولوجية الأساسية (المؤطر 1) أو في الإدراك المفصّل لعمل هذه الجزيئات داخل الخلية والقدرة المدهشة على معالجة الممنظومات البيولوجية على المستوى المجهري.

وبلغت هذه الاكتشافات أوجها، في السنوات العشر الأخيرة، بفعل الخَرْق الذي حققته المشاريع الجينومية (المؤطر 2)، وخاصة، بفضل نشر التسلسل الكامل عام 2000، المؤلف من 3 مليارات زوج من أسس الجينوم البشري.

ومع ذلك، ليس هذا إلاّ البداية. إن هذا الطوفان من المعطيات الناتجة من هذه المشاريع صائر إلى الزيادة. فما الذي ينبغي أن نفعله أمام هذه الكميّة من المعلومات وكيف نستثمرها استثماراً أفضل ؟ من الواضح أن معالجة معلوماتية تؤدي دوراً حرجاً في الإجابة عن هذين السؤالين، بالتخزين والتحليل الإحصائي للمعطيات – مقاربة متبوعة بالضرورة بالمعلوماتية البيولوجية – أو أيضاً باستعمال هذه المعطيات لنمذجة بنية المنظومات البيولوجية ووظائفها، نمذجة مبنية على قوانين الفيزياء والكيمياء. يعالج هذا المقال المقاربة الثانية، التي تقوم على نمذجة الجزيئات الكبروية البيولوجية في سلّم ذرّي.

مراحل النمذجة

تستلزم النمذجة إطاراً نظرياً يُحدّد كيف ينبغي أن تبنى نماذج منظومة ما، وما هي القواعد التي يلزم أن تخضع لها. في حالة النمذجة الجزيئية (المؤطر C، النمذجة الجزيئية)،

المؤطر 1

الجزيئات الكبروية البيولوجية

إن الخلايا كيانات أساسية للكائنات الحية كلها. والجزيئات الكبروية البيولوجية هي المكونات الكبرى للخلية ما عدا الماء، حيث تؤدي وظائف متعددة. ويتألف الجزيء الكبْروي البيولوجي من وحدات فرعية بوزن جزيئي ضعيف، منضمة بعضها إلى بعض لتؤلف بوليميراً طويلاً على شكل سلسلة. عادة، لا تتكوّن كل سلسلة إلاّ من زمرة واحدة من الوحدات الفرعية يكون تسلسلها الدقيق أساسياً لوظيفة الجزيء الكبْروي. والأصناف الكبيرة من الجزيئات الكبروية هي أربعة:

البروتينات: هي على الأرجح الجزيئات الكبْروية الأهم لأنها تؤدي دوراً مهيمناً في أغلب العمليات البيولوجية. مثلاً، الأنزيمات هي البروتينات التي تحفز أكثرية التفاعلات الكيميائية في الخلية. وثمّة أصناف أخرى من البروتينات لها على الأكثر دور بنيوي أو تشترك في التشوير[1]، وتنظيم الاستقلاب أو في الدفاع المناعي. إن البروتينات هي بوليميرات من الحموض الأمينية – وُجد منها حوالي عشرون نوعاً مختلفاً شائعاً – ويمكن أن يتكوّن أحدها من عدة سلاسل، تتضمن كل منها بضع مئات من الحموض الأمينية. وتشارك البروتينات غالباً جزيئات أخرى تساعدها في مهمتها البيولوجية. إن بنى البروتينات الثلاثية الأبعاد معقّدة جداً لكنها حرجة لعملها.

الحموض النووية– إن الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين (DNA) والحمض الريبي النووي (RNA) هما من بوليميرات النكلوتيدات. والحمض DNA هو، في شكله ذي الطاقين المجدولين (أي سلسلتين من النكلوتيدات مرتبتين في حلزون مضاعف)، المادة الوراثية، التي تُكوّد، من بين أعمال أخرى، التعليمات لتتابعات (تسلسل الحموض الأمينية) جميع البروتينات التي تركبها الخلية. أما الحمض RNA، وهو عادة في شكل طاق وحيد (سلسلة من النكلوتيدات)، فهو أساسي لتركيب البروتينات.

الليبيدات: هي مُكوّنات أساسية للأغشية الخلوية، تؤدي أيضاً وظيفة هامة في الاستقلاب وتعمل كخزّانات للطاقة. ومن بين أصناف الليبيدات هناك الفسفوليبيدات، والغليسيريدات الثلاثية، والستيروئيدات.

البوليسكاريدات، هي بوليميرات من السكريات البسيطة، مثل الفركتوز أو الغلوكوز. وهي تؤدي دوراً بنيوياً، خاصة في النباتات (السلّولوز هو بوليسكاريد)، وفي التعرّف إلى الجزيء ويمكن أن تستعمل كخزّانات للطاقة.

(1) نقل الإشارات الذي يسمح للخلايا بالاتصال فيما بينها.

يتعين هذا الإطار بالنظرية الذريّة وبقوانين الميكانيك التقليدي والكمومي والاحصائي. ويتعلق التطبيق الدقيق لهذه النظريات، طبعاً، بطبيعة المنظومة. فمن أجل جزيئة كِبْرويّة بيولوجية، يجري السير النموذجي للعملية على خمس مراحل:

- تعيين تركيب المنظومة، ترتكز هذه المرحلة على تحديد عدد الجزيئات الكِبْرويّة المراد دراستها، ونوعها وخواصها الكيميائية وأيضاً بيئتها – أي الماء أو أيّ مُحلّ آخر – والخواص الفيزيائية لمجموع المنظومة (درجة الحرارة، والضغط ...).
- تعيين القوانين التي يخضع لها نموذج المنظومة، ففي النمذجة الجزيئية، ثمّة عنصران هامان. يلزم أولاً أن تتوفر طريقة لحساب الطاقة الكامنة للمنظومة لأن قيمتها تحدد أكثر تشكيلات المنظومة احتمالاً، أو أكثرها استقراراً. تتألف الطاقة الكامنة من مجموع كل طاقات التآثر بين ذرات المنظومة. وبعدئذٍ، يلزم اختيار الخوارزمية التي تستعمل الطاقة الكامنة لاستكشاف مختلف التشكيلات التي يسهل على المنظومة بلوغها. وتستدعي هذه الخوارزمية غالباً الديناميك التقليدي، الذي يسمح بالتعبير عن حركة الذرات بتابعية الزمن، عن طريق حلّ معادلات الحركة في ميكانيك نيوتن؛
- انتقاء شروط ابتدائية، مثل موضع كل ذرّة وسرعتها.

ونظراً لتعقيد بُنى الجزيئات الكِبْروية البيولوجية، فمن الطبيعي

المؤطر 2

المشاريع الجينومية

إن المشروع الجينومي البشري والمشاريع المماثلة لكائنات حية أخرى، مثل الخميرة والفأرة، تكمن في تقطيع وتحليل كل الحمض DNA الذي يُكوّن الإرث الوراثي للكائن الحي. لقد أتاحت هذه المشاريع الفرصة لمقاربات جينومية هدفها الدراسة الشاملة لعمل الخلايا والكائنات الحية. ومن عدادها، المقاربة الجينومية البنيوية التي تسعى إلى تحديد البُنى الثلاثية الأبعاد لكل البروتينات (المؤطر1) لكائن حيّ، سواء مباشرة بتحليل بنيتها، أو بأسلوب غير مباشر بمقابلتها ببروتينات أخرى ذات تتابعات مماثلة وبُنى معلومة. وعلم البروتينات Protéomique مكرّس لتمييز جميع التفاعلات بين البروتينات في الخلية. وعلم الاستقلاب métabolomique يهدف إلى تحديد تركيب المستقلبات وتوزعها في الخلية. ويدرس كيفية تغير هذا التركيب أثناء حياة الخلية وتحت شروط خارجية مختلفة .

المؤطر C

النمذجة الجزيئية

تمثيل، حُسب بإحدى طرائق الكيمياء الكمومية ، للكمون الكهراكدي حول جزيء من بيتريا زينيل – بيريدين (bis-triazinyl - pyridine) (BTP)، المطور بطريقة سانكس Sanex لفصل الأكتينيدات واللانثانيدات.

إن الباحثين في الكيمياء والبيولوجيا، وأيضاً في فيزياء المواد، يستعينون أكثر فأكثر بأدوات وأساليب تسمح لهم بالتنبؤ بدقة أكبر دوماً بمفاعيل الجزيئات تبعاً لبنيتها، وبما هو أكثر أهمية أيضاً للمصممين، تصور بنيانات جديدة قادرة على تحريض سلوك معيّن، وفي النهاية توليد المفعول المطلوب.

وتتوفر لهذه المقاربة النظرية تشكيلة متنوعة كثيراً من الأدوات، نذكر من بين أهمها الكيمياء الكمومية والميكانيك الجزيئي والديناميك الجزيئي، المستعملة أيضاً في فيزياء المواد.

إن الكيمياء الكمومية، التي تقوم على قوانين ميكانيك الكم، تفيد قبل كل شيء في وصف بنية الجزيئات وسلوكها في العمليات التي تماثل التفاعلات الكيميائية.

والديناميك الجزيئي التقليدي يحاكي حركة ذرات المنظومات الجزيئية وتطوّر تشكيلها المكاني انطلاقاً من معادلات الميكانيك التقليدي. إنها توصل إلى خصائص بنيوية وديناميكية وترموديناميكية.

وكما هي حال الكيمياء الكمومية، فإن الميكانيك الجزيئي هو طريقة تسمح بدراسة بنية الجزيئات وسلوكها إلا أنه أقل كلفة، وأسرع، وبالتالي يمكن استعماله لوصف المنظومات المؤلفة من آلاف الذرات مثل الجزيئات الكبروية البيولوجية .

البدء بالبُنى المحدّدة تجريبياً، سواء بتصوير البلّورات بأشعة X، أو بالتجاوب المغنطيسي النووي؛

● مُحاكاة المنظومة، وهذا يقتضي حلّ المعادلات التي تصف حركة الذرّات. والمحاكاة الرقمية (المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية ؟) لا غنى عنها في حالة الجزيئات الكبْرويّة البيولوجية لأن الحلّ التحليلي لجملة معادلات معقّدة إلى هذا الحدّ و كبيرة إلى هذا الحدّ غير ممكن. فمدّة الحساب اللازم لإجراء محاكاة معينة تختلف وفق حجم المنظومة ودقة الطرائق المعتمدة والمسألة المدروسة. إن محاكاة واقعية لمنظومة مؤلفة من حوالي خمسين ألف ذرّة تُشغّل بسهولة الحواسيب الأكثر قدرة حالياً لمدة عدة أسابيع؛

● تحليل النتائج باستعمال الأدوات الإحصائية خاصة. وعلى هذا التحليل أن يربط النتائج المحصّلة من المحاكيات بالقيم المقيسة تجريبياً. ومثالياً، تثير هذه المرحلة مسائل جديدة، يمكن التعرّض لها بمحاكيات جديدة أو بتجارب جديدة.

آفاق مهمة

إنّ مخبر الديناميك الجزيئي في معهد البيولوجيا البنيوية – جان – بيار إبل (IBS/CEA-CNRS-UJF) في غرونوبل يهتم خاصة بمحوري بحث اثنين كبيرين: الدراسة المفصّلة لآليات التفاعلات الأنزيمية بتقنيات المحاكاة المبنيّة على الكيمياء الكمومية ومحاكاة العمليات ذات السُلّم الأكبر، وعلى سبيل المثال، تغيّرات التشكل في بُنى البروتينات (راجع التنبؤ بالبنية ذات الأبعاد الثلاثة للبروتينات). وبالإضافة إلى المعارف التي تسمح مثل تلك البحوث باكتسابها، فإن نتائج هذه المشاريع تقود إلى منافذ مهمة لإدراك المثبطات الأنزيمية[1] إدراكاً عقلانياً (الأدوية، مبيدات الأعشاب ...) وهندسة البروتينات.

ثمة أربعة مشاريع حالية قدّمها مختبر الديناميك الجزيئي. ينبغي أن نؤكّد أن هذه الدراسات كلّها والدراسات النظرية كلّها، على العموم، تتطلب تعاوناً وثيقاً مع فرقاء تجريبيين .

البروتينات البكتريَّة PBPs

إن البروتينات الرابطة للبنسلين (Penicillin – binding pro-) (PBPs teins) هي أساسية لعملية تركيب الغلاف الذي يحمي بعض أنواع البكتريا[2]. ويوقف عملها بالمضادات الحيوية β- لاكتام لأن للأخيرة بنية تشبه ركازتها الطبيعية. وللأسف فإن كثرة من البكتريا المُمْرضة تصبح مقاومة لهذه المضادات الحيوية بفعل طفرات بسيطة في بنى هذه البروتينات PBPs. هناك دراسة قد بوشرت حول آلية التفاعل بين البروتينات PBP2x العائدة لبكتريا ستريبتوكوكوس بنومونيا Streptcocus pneumoniae وبين المضاد الحيوي (الشكل 1) تهدف إلى تحديد هوية سمات التفاعل، التي يمكن أن تساعد على تطوير مضادات حيوية جديدة.

الأنزيم HGXPRTase

إن أنزيم هيبوكزانتين – غوانين – كزانتين فسفور يبوسيل ترانسفراز (hyptoxanthine-guanine – xanthine phophoribosyl transferase) HGXPRTase هو هدف تسعى إليه العوامل المضادة للملاريا. وفي الواقع، كما هو حال الطفيليات كلها، إن الطفيلي

الشكل 1. الموقع الفعّال للبروتين PBP2x الذي يثبّت المضاد الحيوي سفوروكسيم cefuroxime. إن المضاد الحيوي والبقايا الهامة للموقع الفعّال أشير إليها صراحة (عصيّات). وقد وضحت بقية البروتين على صورة شريطية يظهر فيها مسير السلسلة الرئيسة فقط مرسوماً (أنابيب دقيقة). تمثلت بعض أجزاء السلسلة على شكل أسطوانات (حلزونات α) وأسهم (وريقات β) وهي توافق العناصر البنيوية التقليدية التي توجد عادة في معظم البروتينات.

(1) المثبطات الأنزيمية هي مركبات نوعية تثبط النشاط التحفيزي لدى الأنزيم.

(2) البكتريا هي كائنات حية دقيقة (مكروية)، وعلى العموم وحيدة الخلية ، لا تحوي نواة وتتكاثر بسرعة .

المسؤول عن الملاريا غير قادر على تحقيق تركيب البورينات (Purines) التي هي مُكوّنات أساسية للحموض النووية. يسمح الأنزيم XGXPRTase باستعادة البورينات من المضيف (وهو الإنسان أو الحيوان الذي تلوث) لتحويلها إلى نكلوتيدات البورينات، التي هي ضرورية لنجاته. وهكذا، فإن الأنزيم يحوّل البورين، والهيبوكزانتين، ونوعاً من السكر، وهو ريبوسيل -1 بيروفسفات، إلى إنوزين مونوفسفات وبيروفسفات. لقد تمّت محاكاة هذا التفاعل بواسطة الديناميك الجزيئي وقد افترضت بُنى للمراحل المتوسطة (الشكل 2)، يمكنها أن تكوّن أساساً لأعمال تصميم المثبطات.

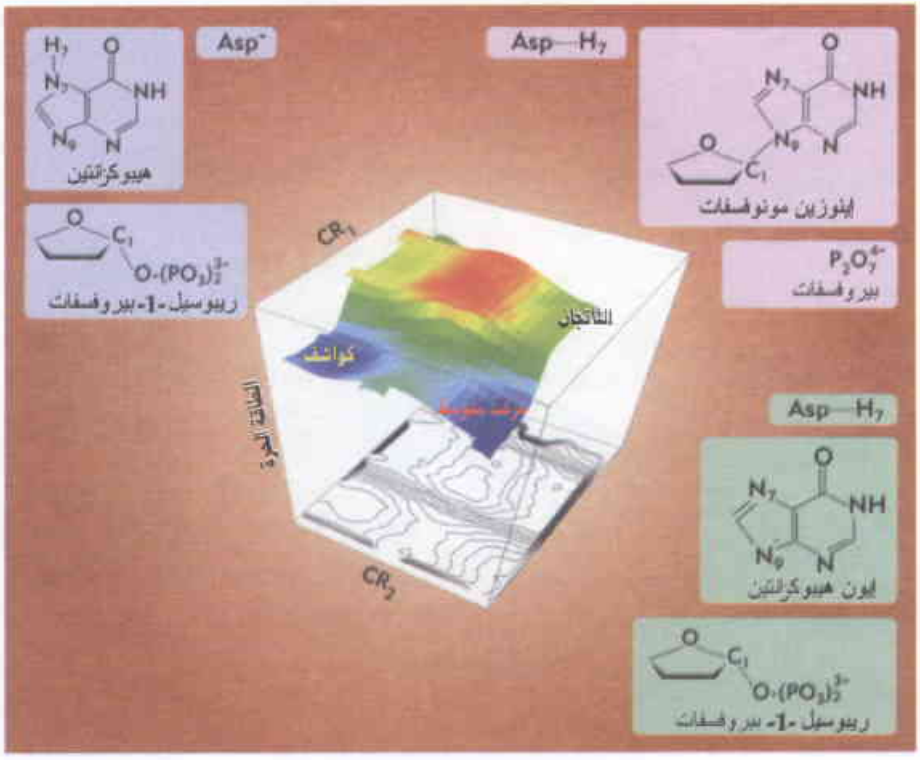
الأنزيم كاتالاز Catalase

إنّ زُمرة الكاتالازات قادرة على تحويل الماء الأكسجيني إلى أكسجين جزيئي وماء. وهذا التفاعل أساسي في المستوى الخلوي لأنه يشترك في منظومة المقاومة ضد الإجهاد المؤكسد[3] للكائنات الحية التي لا يمكنها أن تعيش إلاّ بوجود الأكسجين (كائنات هوائية aerobies). إن قدرة التحفيز العالية جداً لهذا الأنزيم جديرة بالملاحظة، نظراً لأن موقعها الفعّال مطمور على بعد 30 Å تحت السطح. إن تسيير الركازة الحاملة (الماء الأكسجيني) وإزالة نواتج هذا التفاعل دُرسا بالديناميك الجزيئي لتحديد ما إذا كانت شبكة القنوات التي تكشفها البنية البلّورية تؤدي دوراً وظيفياً. مثلاً، إن القناة الأساسية التي تربط الموقع الفعّال بسطح البروتين تبدو أساسية لإزالة الأكسجين (الشكل 3). ثمّة بحوث مشابهة، أجريت بالتعاون مع مختبر توليد البلّورات وعلم بلورات البروتينات في IBS، كانت قد سمحت بدراسة طرق وصول الهدروجين الجزيئي إلى الموقع الفعّال لأنزيم آخر هو الهدروجيناز Hydrogénase.

الترانسفيرين La transferrine

إن بروتين الدم هذا يؤمن انحلالية الحديد ونقله نحو الخلايا. وهو متورط أيضاً في نقل عدة معادن ثقيلة[4] التي هي عناصر سامّة جداً. دُرس سلوك هذا البروتين في وسط حامضي كما درست ديناميته بغية إدراك إلفته الشديدة للمعادن إدراكاً أحسن، وآلية تحريره الحديد وبذلك يتم التنبؤ بأنماط ارتباطه (تناسق) بالعناصر الثقيلة مثل اليورانيوم. إن موقع تعقد الحديد يتألف مثلاً من أربعة حموض أمينية وجزيء كربونات (الشكل 4). سيسمح هذا النوع من الدراسة، على المدى البعيد، بالمساعدة على تصميم جزيئات مقلدات حيوية تسمح بنزع النكليدات المشعّة.

إن مستقبل المحاكاة في مجال البيولوجيا واعد. لقد أنجز تقدم جوهري منذ عدة سنوات، يعود، في قسمه الأعظم، إلى التزايد الأسي لقدرة الحواسيب، كما يعود أيضاً إلى تحسين تقنيات المحاكاة. والمحاكاة في الوقت الحاضر، هي تكملة هامة للمقاربات التجريبية لأن المسائل الواقعية والمفيدة في المستوى الأساسي يمكن التصدي لها على شكل مألوف. وبدون أي شك، فإن هذه النزعة ستزداد وستجعل المحاكاة تساهم بلا تحفظ في ثورة البيولوجيا التي انطلقت.

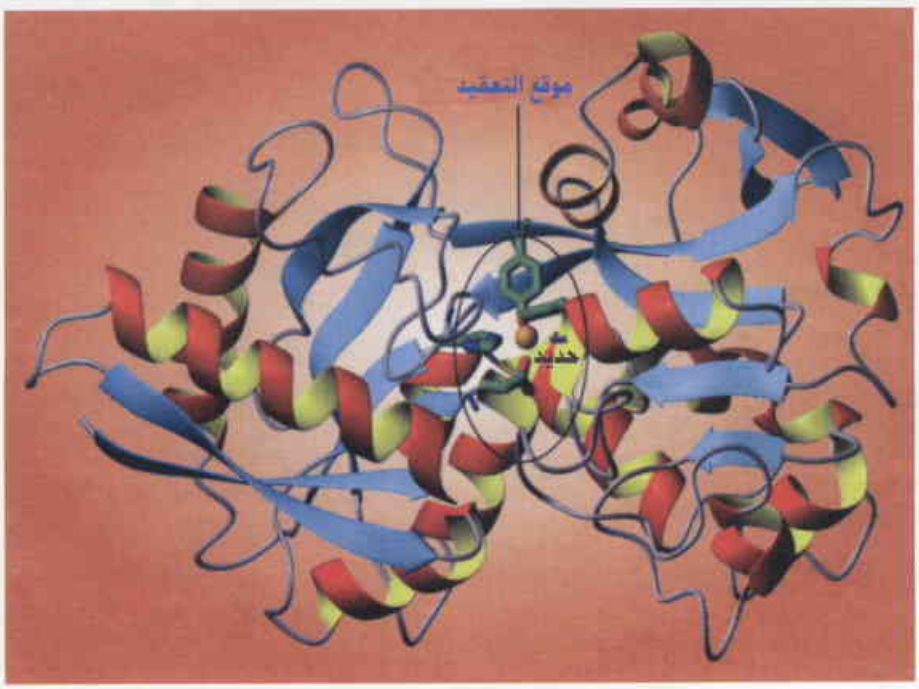


الشكل 2. سطح الطاقة الحرة (إنها كمية ترموديناميكية تؤدي دور معيار توازن وتلقائية عملية ما) لتفاعل انقلاب الهيبوكزانتين و 5-D-α فسفوريبوسيل -1- بيروفسفات (المتفاعلين) إلى إينوزين مونوفسفات وبيروفسفات (الناتجين) بواسطة الأنزيم XGXPRTase من الطفيلي بلاسمودیوم فالسيباروم (Plasmodium falciparum). تمر الطريق التفضيلية للتفاعل بمركب متوسط، هو الهيبوكزانتين بشكل أيون سالب. وتدل Asp على تجمع من البروتين الذي يأخذ البروتون من الهيبوكزانتين. وقد حُسب سطح الطاقة كتابع لإحداثيي التفاعل (CR_1, CR_2) اللذين يمكنهما وصف التغيرات الهندسية أثناء التفاعل. إن البنى الأكثر احتمالاً تواقق مناطق السطح ذي الطاقة الأخفض (باللون الأزرق أو البنفسجي).

(3) الإجهاد المؤكسد هو اكسدة المكوّنات الخلوية التي تحرّض أضراراً بالخلايا والأنسجة.

(4) يقصد "بالمعادن الثقيلة" المعادن التي تزيد كثافتها على 4.5، ويندرج فيها الزنك (النوتياء) (7.14) والكادميوم (8.6) والرصاص (11.35).

الشكل 3. مثال على مسار انتشار الأكسجين الجزيئي O_2 (الكرات) في الموقع الفعال من الكاتالاز نحو سطح البروتين عن طريق شبكة من قنوات الأنزيم (ممثلة هنا بالسطح الرمادي). فقط بعض ذرّات الموقع الفعال والقنوات مبينة في الشكل (العصيّات).



الشكل 4. بنية ثلاثية الأبعاد للترانسفيرين. تمثل في المركز على شكل عصيات. الحموض الأمينية (ذرّات الكربون بالأخضر. والآزوت بالأزرق والأكسجين بالأحمر) معقدة الحديد (باللون البرتقالي). وترى بقية البروتين في التمثيل الشريطي مع حلزونات α (حمراء وصفراء) وورقيات β (أسهم زرقاء). ويقع موقع التعقيد في منطقة مفصلية من البروتين تسمح بفتح الموقع وغلقه وبذلك تفسر آلية تعقيد الحديد وتحريره.

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

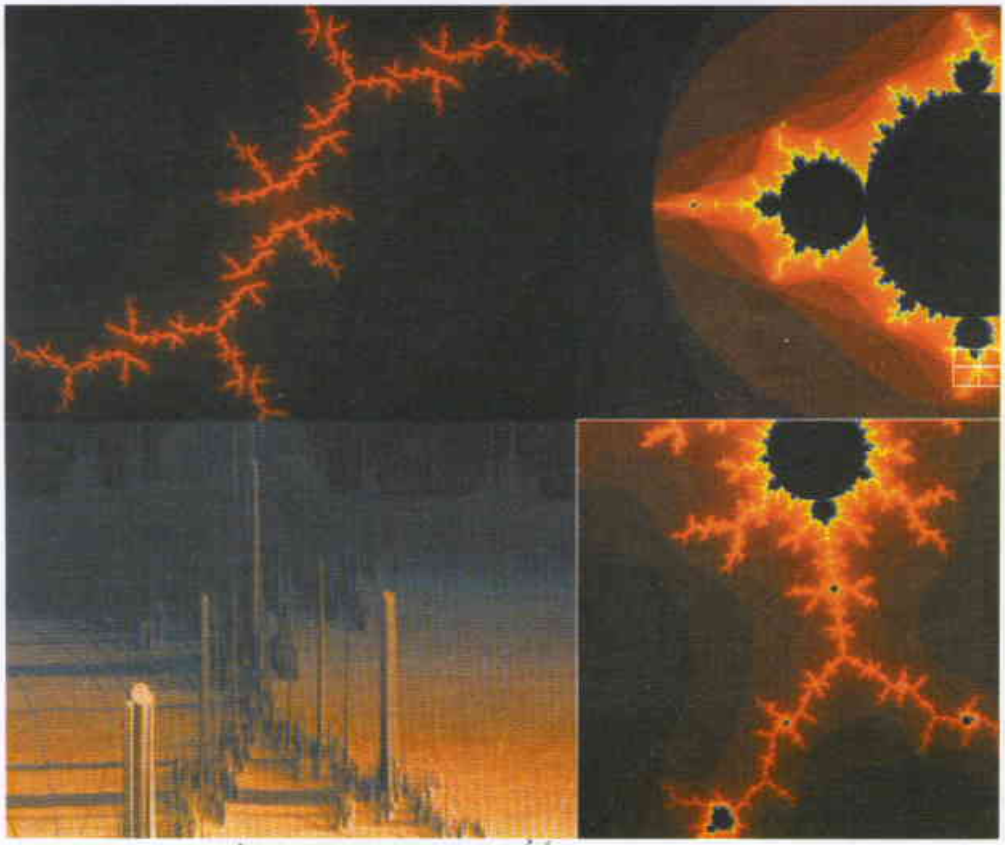
التغييرات المصيرية في النظريّة من أجل فيزياء تنبئية

جان زين - جوستان
مديريـــة علـــوم المـــادّة
مفوضيّة الطاقة الذرّيـة - ســاكلي

ملخص

سواء أكانت النظرية تسبق التجربة أم تليها، فإنّ عليها، في مجال الفيزياء، أن تُجري بعض التبسيطات بصورة مؤقتة طويلة أو قصيرة. وضمن هذا الشرط تظهر النظرية تنبئية عملياً في لحظة معينة. وينبغي لها بصورة خاصة أن تحدد هوية كل الوسطاء المهمّة التي تسمح بوصف الظواهر في سُلّم مفروض. إنّ هذه التغييرات المصيرية الجديدة لهذه الفكرة هي التي توضّحها مثلاً، في فيزياء الجُسيمات، النظريّة الكموميّة للحقول وتؤدي إلى مفهوم النظرية الفعلية.

الكلمات المفتاحية: نظرية الحقول الكمومية، فك الترابط، إعادة الاستنظام، نظرية التآثرات الأساسية، الحقول الفعلية.



إيضاح مفاعيل فكّ ترابط السّلالم. إذا كان التكبير التكراري لقطعة مستقيمة مطبوعة لا يُظهر تفاصيل إضافيّة إلا إذا أصبحت عيوب الطباعة ظاهرية، فإنّ صورة هندسية تكسرية (عنوانها هنا، على طول حدود مجموعة ماندلبروت)، بدون فكّ ترابط السّلالم، ومُنشأة بالتكرار، تظهر مختلفة في كل تكبير، ودائما مع زيادة في التفاصيل (تستعيد نفس العنصرالزخرفي باستمرار، كما هو مبين إلى اليمين). نجد هنا ما يكافئ زُمرة إعادة الاستنظام. فالخوارزمية تنصّ على كيفية الانتقال من سلم إلى التالي، ففي تكبير مفروض، يمكن الكلام عن صورة فعلية. إن الصورة في الأسفل إلى اليسار هي منظر في ثلاثة أبعاد للعنصر الزخرفي نفسه.

في القرن العشرين، وفي مجالين مُختلفين من الفيزياء هما نظرية التآثرات الأساسية[1] والميكانيك الإحصائي لانتقالات الطور، أُعيد النظر في إحدى الأفكار الأساسية في الفيزياء ألا وهي فكّ ترابط السّلالم. لنأخذ مثالين بُغية توضيح هذه الفكرة. يدلّ تحليل بُعديّ بسيط إلى أنّ دور النوّاس يتغيّر مع الجذر التربيعي لطوله. تستند هذه النتيجة في الواقع إلى الافتراض بأنّ أطوالاً أخرى، كأبعاد الذرّات التي تُكوّن النوّاس أو نصف قطر الأرض، لا تأثير لها في الدور، لأنّها على الترتيب إمّا صغيرة جداً أو كبيرة جداً. وكذلك يمكننا حساب مسارات الكواكب، بتقريب جيد جداً، بافتراض أنّ الكواكب والشمس هي نقاط ماديّة، لأنّ أنصاف أقطارها أصغر بكثير من أبعاد مداراتها. فمن الواضح أن الفيزياء التنبئية ستكون مستحيلة

عملياً إنْ لم تكن خاصةُ فكّ الترابط هذه صحيحة على وجه العموم.

نظرية التآثرات الأساسيّة

في الثلاثينيات، اصطدمت الحسابات الأولى في الإلكتروديناميك الكمومي[2] بمشكلات ظهرت وكأنّها لا تُذلّل، فقد كانت هناك نتائج كثيرة لا نهائية وكانت هذه اللانهائيات مرتبطة مباشرة بالطبيعة النقطية للإلكترون. ثم تبيّن بسرعة أنّ هذه اللانهائيات كانت ذات طبيعة أساسيّة، وكأنها نتيجةً محتومة للطبيعة النقطية للجُسيمات ولمصونية الاحتمالات.

ومع ذلك فقد اكتشف حلّ تجريبيّ لهذه المسألة، سمّي إعادة

نواس فوكو foucault في البانتيون بغية الحصول على النتيجة التي مفادها أنّ دور النواس يتغيّر مع الجذر التربيعي لطوله. وجب الافتراض أنّ الأطوال الأخرى، كأبعاد الذرّات التي تركّب النواس أو نصف قطر الأرض، لا تأثير لها فيه لأنها على الترتيب صغيرة جداً أو كبيرة جداً.

الاستنظام. وكان يرتكز على التعبير عن الكميّات القابلة للقياس ليس بدلالة الوسطاء الأولية للنظرية، مثل شحنة الإلكترون في غياب التآثرات، بل بدلالة الكميّات التي أعيد استنظامها كشحنة الإلكترون المُلاحظة. وقد أكدت التجربة بصورة مدهشة النتائج الحاصلة بهذه الطريقة.

وبداهة، تبدو هذه الطريقة كتطبيق للمبدأ الاعتيادي الذي مفاده اعتماد الوسطاء التي تنسجم مع سلّم الملاحظة. ومع ذلك ظهرت في هذا الإطار غرابات ثلاث: العلاقة غير المتناهية بين الوسطاء الابتدائية والوسطاء الملاحظة، وضرورة اعتماد تآثرات إضافية غير مُسبَّقة أحياناً، لكي تنجح طريقة إعادة الاستنظام وأخيراً الخاصة القائلة بأنّ شدّة التآثرات تتوقّف على سلّم الملاحظة. وعلى سبيل المثال، في المسافات التي هي أصغر من طول موجة الإلكترون، تتنبأ النظرية بظاهرة "الحجب المُضاد". لقد تمّ التثبت من صحّة هذه الظاهرة فيما بعد بصورة مباشرة جدًا في الطاقات العالية، أي على مسافات قصيرة: فشحنة الإلكترون المُلاحظة في طاقة 100 GeV، التي توافق كتلة الجُسيم Z، قد ازدادت بقدر 4% عن قيمتها "الاعتياديّة" التي هي الشحنة الكولونية .

الظواهر الحرجة والنظرية الغَوْسيّة

تهدف نظريّة الظواهر الحرجة إلى وصف انتقالات الطور المستمرّة أو التي هي من المرتبة الثانية في المنظومات الكبروية (الماكروسكوبية)، مثل الانتقال سائل - بخار، والانتقالات في المزيج الثنائي، والهليوم الفائق الميوعة، والمنظومات المغنطيسية. تتميّز هذه الانتقالات بسلوك جماعيّ في السلّم الكبير بجوار درجة حرارة الانتقال (درجة الحرارة الحرجة T_c). ويُتوقّع عندئذٍ إمكانية أن تكون هذه السلوكيات موضوع وصف ماكروسكوبي، فلا تدخل إلا عدداً قليلاً من الوسطاء المنسجمة مع هذا السلّم،

مشمول ناقورة الهليوم الفائق الميوعة. إنه مثال على ظاهرة لا يمكن حساب خواصها في السلّم الماكروسكوبي بإهمال السلّم المجهري إهمالاً تاماً.

بدون إسناد بيّن إلى الوسطاء المجهرية الابتدائية أو إلى السلّم المجهري الابتدائي مثل حجم الذرّات، أو عروة البلورات أو مدى القوى. تقود هذه الفكرة إلى نظرية غَوْسيَّة (لأسباب مماثلة لدعوى الحّد المركزي في نظرية الاحتمالات).

وكذلك بُهت الفيزيائيون كثيراً من خلاف هذه النظرية مع التجربة وخلافها أيضاً مع حسابات نماذج الميكانيك الإحصائيّ على شبكة. أثبت إخفاق النظرية الغَوسيَّة أنّ الخواصّ الماكروسكوبية لا يمكن أن تُحسب بتجاهل السلّم المجهري بالكامل. وفعلاً فقد أظهر حساب تصحيحي للنظرية الغَوسيَّة قيماً لا نهائية عند درجة الحرارة الحرجة. فالتباعدات التي صودفت في نظرية الحقول في فيزياء الجسيمات ونظرية الظواهر الحرجة لها في الواقع أصل مُشترك هو الترابط بين مختلف سلالم الفيزياء. تظهر القيم اللانهائية عندما نُحاول كما يحصل عادة وبيررعامة، تجاهل وجود سلّم في الفيزياء المجهرية التحتيّة.

كواكب المجموعة الشمسية مُجمعة. لقد حسبت مساراتها على افتراض أنها نقاط مادية لأن أنصاف أقطارها صغيرة جداً بالنسبة إلى أبعاد مداراتها.

الشّموليّة وزمرة إعادة الاستنظام

في هذه الشروط كان يمكن أن نخشى أن تكون الفيزياء الماكروسكوبية حساسة لكل بنية ذات مسافة قصيرة، وأن تتعلق الظواهر الكبيرة المسافة بالديناميك المجهري المفصل، وأن لا تكون بالتالي قابلة للتنبؤ بها في الأساس. غير أن التجربة كشفت فعلاً أن سلّم المسافة وحده المرتبط بالتآثرات المجهرية وبعض خصائصه العامة هو مهمّ ويشكل خاصة تدعى الشّمولية. إن صمود الشّمولية، وإن كانت مختزلة بالنسبة إلى النظرية الغَوْسية، ما يزال هو الأكثر إثارة للدهشة.

ولإدراك هذه الملاحظات كلّها، ابتُكر إطار مفاهيمي جديد هو زمرة إعادة الاستنظام الذي يصعب وصفه هنا بدقة، لكن فكرته الأساسيّة هي الآتية: تُصاغ معادلة التطوّر لتغير التآثرات بتابعية سلّم الملاحظة. نعتبر أن الشرط الابتدائي هو التآثرات المجهريّة ونبحث عن التآثرات الفعلية على مسافة أبعد. فإذا كانت معادلة التطوّر تتصف بصفات النقطة الثابتة، وهذا يعني أنّه إنْ حصلنا من أجل صنف كامل من التآثرات الابتدائية، على التآثرات الفعلية نفسها على مسافة بعيدة، عندئذ يمكن اعتبار خاصة الشموليّة قابلة للتفسير.

لقد سمحت هذه الاستراتيجية بتفسير جميع خواص انتقالات الطور البسيطة . لكنّها أقامت بشكل لافت للنظرعلاقة بين نظريّة التآثرات الأساسية وبين انتقالات الطور: إنّ النظرية الفعلية التي تصف الظواهر الحرجة على مسافة بعيدة هي نظرية كموميّة للحقول من نوع النظرية التي تصف فيزياء الجسيمات.

وهكذا يصبح من الصعب أن نقاوم الإغراء على تطبيق نفس الأفكارعلى نظرية التآثرات الأساسيّة.

النظريّات الكموميّة للحقول الفعلية

يمكن الآن أن نتصوّر أن التآثرات الأساسيّة موصوفة في السّلّم المجهري (طبعاً المجهري، مثل طول بلانك[2]، بالنسبة إلى سلالم المسافة السهلة البلوغ تجريبياً في الوقت الحاضر)، أي ذات طاقة كبيرة جداً، بواسطة نظرية منتهية ذات طبيعة مجهولة (نظريّة الأوتار؟). ومن أجل أسباب لا تزال مجهولة، تُولّد، بالمفعول التعاوني الجماعي لعدد كبير من درجات الحرية، فيزياء المسافة الكبيرة مع جسيمات ذات كتلة صغيرة جداً (بالنسبة إلى كتلة بلانك[2]، $10^{19}GeV$).

وعلى مسافات أكبر بقليل في السّلّم المجهري، توصف الفيزياء بنظرية حقول معقّدة جداً مع عدد لا نهائي من التآثرات، حيث تتطوّر الشدّات مع المسافة. إنها نتيجة لوجود نقطة ثابتة ذات مسافة كبيرة، فتتناقص معظم التآثرات إذاً بسرعة وتصبح مهملة على مسافة كبيرة (ثمة تآثر وحيد يؤدّي إلى مفاعيل مهمة، هوالثقّالة، بسبب صفتها التراكمية الجذبية). هناك تآثرات منتهية العدد تتطوّر ببطء (على شكل لُغريتمي) فتبرز صامدة على المسافة الطويلة. إنّها تقود إلى النموذج المعياري الذي يصف تقريباً كلّ فيزياء الجسيمات التي يمكن النفاذ إليها[1]. وأخيراً هناك بعض الوسطاء يمكنها أن تزداد مع المسافة. مثلاً، كان يُتوقّع في النموذج المعياري أن تكون كتلة جُسيم هيغز[1] قريبة من كتلة بلانك، إنها كتلة لا تتواءم والفيزياء الملاحظة. فالمقصود هنا، مسألة غير محلولة تُدعى مسألة الضبط الدقيق[1]. والتناظر الفائق الافتراضي[1] هو أحد الحلول المقترحة. فوجهة النظر الحديثة هذه، القائمة أساساً على زمرة إعادة الاستنظام وعلى مفهوم التآثرات التي تتعلّق بسلّم الملاحظة، لا تزوّدنا فقط بصورة أكثر تماسكاً للنظرية الكمومية للحقول، بل تعطي أيضاً إطاراً يمكن أن تُناقش فيه ظواهر جديدة.

وتنطوي أيضاً على أنّ النظرية الكموميّة للحقول هي وصف مؤقت، وليست متماسكة بالضرورة في السلالم كلها، ومقدّر لها أن يستعاض عنها في نهاية الأمر بنظرية أكثر أصولية من طبيعة مختلفة جذرياً. وينبغي مع ذلك أن نؤكد على أن النظرية الكموميّة للحقول تبقى في الوقت الحاضر الإطار الأخصب لدراسة الكثير من المسائل في الفيزياء حيث يتفاعل بشدّة عدد كبير جداً من درجات الحرية.

(1) راجع حول هذا الموضوع: مجلة defis CEA n°36 p.34

(2) الأبعاد الحدية الدنيا للطبيعة بحسب الفيزياء الكمومية.

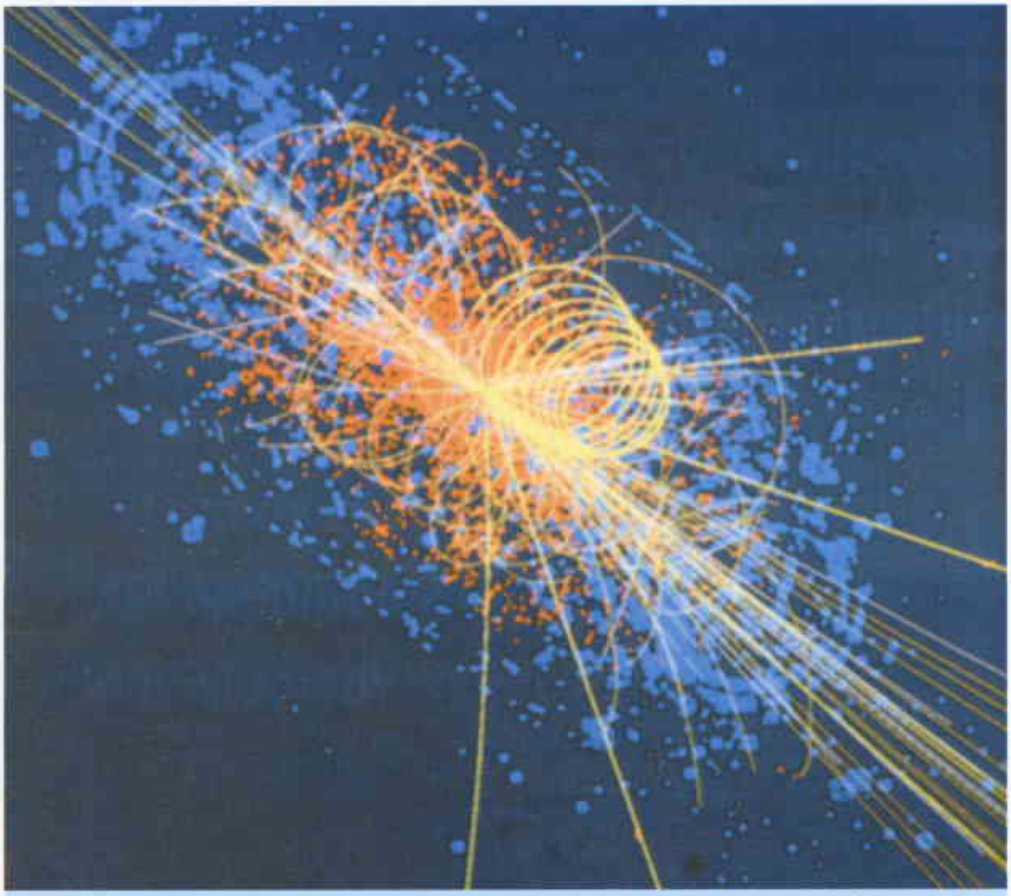
المحاكيات في فيزياء الجسيمات

برونو منسولييه
مدير مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية (مركز سكله)

ملخص

في المحاكيات التي ترافق الأعمال التجريبية في فيزياء الجسيمات، يلعب وصف العمليات الفيزيائيّة المفصّل إلى أبعد الحدود الممكنة دوراً أساسياً، إلى جانب إعداد المكاشيف المتزايدة الحساسيّة. إلا أنّ المصادفة هنا ليست غائبة، لأنّها أفضل وسيلة لعدم إدخال أسلوب غير مباشر في اختيار المعطيات المراد إدخالها في نمذجة الظواهر المعقّدة ولأنّ الفيزياء الكموميّة في جوهرها احتمالية. تُنتج هذه المحاكيات معطيات افتراضيّة قريبة جداً ممّا سيكون عليه الواقع.

الكلمات المفتاحية: برنامج مونت كارلو للمحاكاة، محاكاة تفكك بوزون هغز، معطيات افتراضية، نمذجة الظواهر، مصادم الهدرونات الكبير.

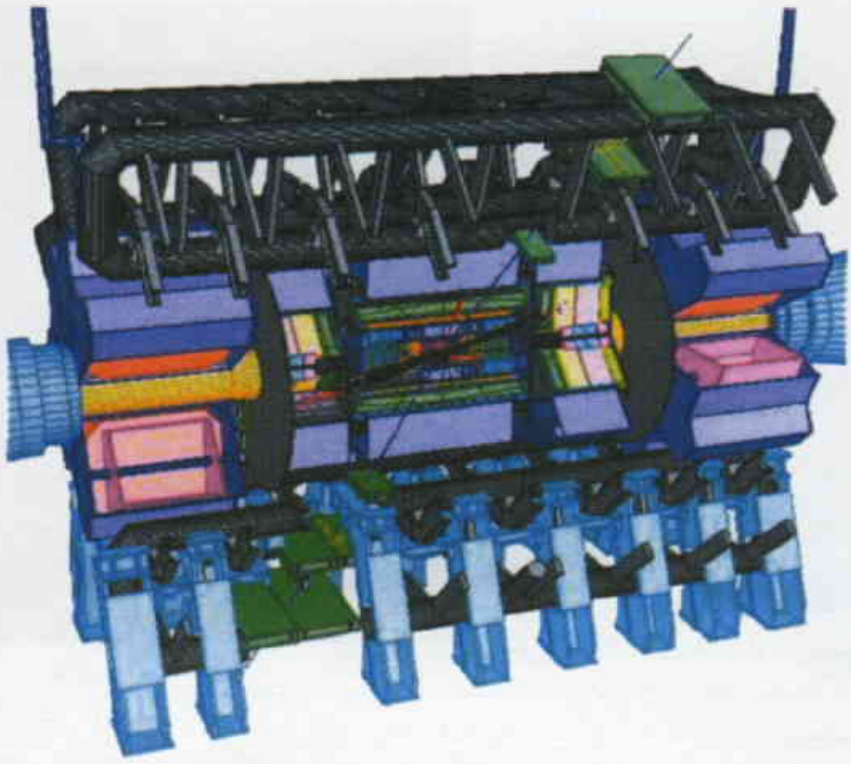


الشكل 1- محاكاة تفكك بوزون هغز إلى أربعة ميونات في المكشاف CMS (وشيعة ميونات متراصة Compact Muon Solenoid) الموجود في مصادم الهدرونات الكبير في المركز الأوربي للبحوث النووية (سيرن). تدلّ الآثار traces على الجسيمات المنتجة من تصادم اثنين من البروتونات ذات الطاقة الفائقة. تظهر باللون الأزرق المطاقات المتوضعة من الجسيمات في المكشاف.

عند سماعك محادثات العمل بين فيزيائيي الجسيمات ستندهش بدون شك لكثرة تكرار كلمة "مونت كارلو Monte-Carlo". إنّها لا تعني الموقع القادم لإقامة مسرّع ولامكان مؤتمر. "مونت كارلو" هو برنامج محاكاة تملكه كل تجربة، والأداة اللازمة لتصميم المكشاف وإحكام خوارزميات تحليل المعطيات وحساب فعّاليات كشف ضجيج الخلفية ورفضه. وهذه التسمية أتت من اسم عاصمة ألعاب الحظ الأوربية (والأمريكيون يتكلمون أيضاً عن مونت كارلو وليس عن "لاس فيغاس"!).

وأصل هذه الكلمة هي "طريقة مكاملة بمونت كارلو" (انظر أيضاً المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية ؟) عن ماذا

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية



الشكل2- محاكاة حدث في تجربة المكشاف ATLAS (جهاز مصادم الهدرونات الكبير السواري) لدى مصادم الهدرونات الكبير (LHC)، الذي هو قيد البناء في الوقت الحاضر في سيرن. ولتسهيل رؤية القسم الداخلي مَثل فقط جزء من المكاشيف.

يُطرح السؤال؟ لنفرض أنك تريد تحسين غرفة طعامك. وأنك ترغب خاصة أن تكون الإضاءة في مركز الطاولة بشدة معيّنة. وللبدء في ذلك ببساطة تُفكر بمصدر واحد للنور معلّق فوق الطاولة. وإذا كان تدفق ضوء المصباح معروفاً يكون الحساب سهلاً. إلا أن لديك أيضاً مصباحاً محمولاً موضوعاً في زاوية الغرفة يصل جزء من نوره إلى الطاولة منتثراً على السقف والجدران. فالأمور تتعقّد، لا لشيء إلاّ للهندسة فقط، إذ يجب عليك الآن إجراء عدة تكاملات لتدفّق الضوء آخذاً بالحسبان المتعب فئات المسارات الممكنة (مصباح ← طاولة، المصباح المحمول ← طاولة، المصباح المحمول ← سقف ← طاولة المصباح المحمول← سقف ← جدار ← طاولة....). وبعد عمليات حساب طويلة، تجد أنّ السقف والجدران غير عاكسين كالمرايا وغير ناثرين للضوء تماماً. إذن يجب أن يكون لديك نماذج للجدار ويجب إعادة عمليات التكامل من جديد لكل نموذج منها! (المؤطّر A، ما هي المحاكاة الرقمية؟).

لا بد من حلّ رقمي؛ فتكتب برنامجاً يحاكي توليد المصابيح للأشعة الضوئية ويتبع بعد ذلك مسار كلّ شعاع وبحسب مصيره بدلالة العوائق التي يلاقيها. ولا يبقى إلاّ حساب عدد الأشعة التي تصل إلى الطاولة.

في هذا المثال ليس من الضروري اللجوء إلى المصادفة لتوليد الأشعة الضوئية. إذ يسهل توليد أشعة تبعد عن بعضها بانتظام على شبكة بزوايا، شريطة أن تكون الأشعة عديدة بصورة كافية للتأكّد من أنّ أيّ مسار "مهم" لا يقع في ثقب الشبكة. ولكن اختيار وضعية أشعة الانطلاق بالقرعة يتمتع بمزية عدم تحريض (على الأقل من حيث المبدأ!) الانتظام في عواقب سيئة التحكّم. ومن هنا طريقة التكامل بمونت كارلو: يطلب الفيزيائي من الحاسوب أعداداً "عشوائية" لتحديد اتجاه الشعاع الأصلي.

يمكن أن تتدخّل المصادفة أيضاً في نموذج الجدار، لنفترض أن يكون هذا الجدار نصف عاكس ونصف ناثر، فهو يولد عن كل شعاع وارد عدّة أشعة صادرة: واحد منعكس والبقية منتثرة (وكلّ منها أخذ جزءاً من شدة الشعاع الوارد). ومن جديد ستثار مشكلة مسك الحسابات. ويكفي للحفاظ على بساطة البرنامج الاحتفاظ بشعاع واحد واختيار مصيره بالقرعة، منعكس هو أو منتثر (واتجاه انتثار هذا الأخير).

وفي محاكيات فيزياء الجسيمات تتدخّل المصادفة أيضاً بصفة محدّدة لسبب آخر. ولمّا كانت الجسيمات هي أشياء كمومية، لا يمكن أن توصف ردود أفعالها إلاّ باحتمالات. وهذه ستكون هي الحالة فيما إذا جرى تبنّي نموذج كمومي للجدار. وعند ذلك سيكون الشعاع الضوئي فوتوناً وحيداً وسيوصف ردّ فعله مع الجدار بقيمة احتمالية (50% انعكاس، 50% انتثار)، لكن الأمر هنا أساسي.

ضروري للتحليل...

منذ السبعينيات ومع تعقيدات التجارب ، أصبح برنامج مونت كارلو للمحاكاة ضرورياً لتحليل المعطيات. ففي البداية كان الأمر يتعلّق بحسابات بسيطة نسبياً، مثل فعّالية مكشاف لجسيم ذي اتجاه محدّد ودفع محدّد. وللأخذ بالحسبان الترابطات بين جسيمات الحدث نفسه، توصّل الفيزيائيون بسرعة إلى محاكاة حدث بكامله مع سلوك كل جسيم في المكشاف وبتفصيل متزايد تدريجياً. وفي الثمانينيات بدأت تظهر البرمجيات المتخصّصة في مجال المحاكاة والمهيأة لاستخدامها في كل التجارب مثل "مولّدات الأحداث". يعطي المستخدم شروط التجربة للبرنامج، مثلاً تصادم بين إلكترون وبوزترون (إلكترون موجب) بطاقة 200 جيغا إلكترون فولط، فيعطي البرنامج أحداثاً محاكية

الشكل3- تركيب المكشاف CMS لدى مصادم الهدرونات الكبير المستقبلي. أدرجت الحلقة الخارجية للمغنطيس في محور المكشاف.

مع جميع جسيمات الحالة النهائية وأنواعها واتجاهاتها وقيم دفعها. ويمكن للفيزيائي بكل تأكيد أن يتحكّم بكل الوسطاء (البارامترات)، وأن ينشّط أو يثبّط كل تفاعل ممكن، وأن يسمح أو يمنع عمليات التفكّك.

ومع الزمن دمج النظريون و التجريبيون في هذه البرامج كامل الفيزياء المعروفة ومعظم الاحتمالات النظرية. ويوجد في السوق[1] حفنة من مثل هذه المولّدات انهمك مؤلفوها في نضالات مجهدة لإدخال تعديلات رهيفة حاذقة على توقّعات آخر نظرية دارجة أو لتحويل هذه التوقعات بسرعة إلى كود.

تلا هذه المولّدات برنامج آخر، يأخذ حدثاً جاهزاً "مفتاحه في اليد" ويحاكي سلوك الجسيمات في المكشاف. تُقدّم البرمجية[2] logiciel إطار ومنظومة انتشار الجسيمات وكذلك أساسيات فيزياء تأثر جسيمات – مكشاف: الانحناء في الحقل المغنطيسي، والتأيّن، وإشعاع الكبح، وخلق الأزواج، والتأثر مع النوى..... يكتب المستخدم وصف التجربة وكذلك الحالات المتعدّدة الخاصة لاستجابات المكاشيف حين يكون النموذج المتاح في البرمجية غير كاف. ويمثّل هذا الجزء جهداً مهماً جداً من مرتبة مليون سطر من الكود من أجل تجربة كبيرة بقدر برامج إعادة البناء.

... ومن أجل متابعة فيزياء جديدة

ومع مثل هذه الأدوات يمكن توليد أحداث محاكية في صيغة معطيات حقيقية وتمريرها فيما بعد في سلسلة إعادة البناء نفسها. وهكذا يكون الفيزيائي قادراً على تقييم أداء الأجهزة وخوارزميات التحليل بدقة. فمثلاً إنّ الأحداث التي تنتجها فيزياء غير معروفة بعد تكون عرضة للاختلاط مع أحداث مماثلة، تخلقها عمليات معروفة، تكوّن ضجيج الخلفية. وهذا يعني إذا التحقّق من أنّ التحليل يحدّد بصورة صحيحة الأحداث المهمة.

وفي مرحلة تصميم التجربة يمكن للفيزيائي أن يحوّر نمط أو تصميم المكاشيف لتشجيع الحساسية تجاه هذه الإمكانية النظرية أو تلك. وبعد ذلك تسمح المحاكيات بتدقيق مرهف في خوارزميات التحليل والسيطرة على فعّاليتها. وأخيراً فهي تقدّم وسيلة للتثبّت من أنّ إشارة تراها التجربة تأتي فعلاً من فيزياء جديدة، أو بالعكس من أنّ هذه الفيزياء الجديدة المحتملة غير موجودة إذا كانت لا تُري أية إشارة في التجربة.

في بعض التعاونيات، يتكفّل فريق بتوليد مجموعة من الأحداث المحاكية، تحتوي على إشارة واحدة أو عدة إشارات من فيزياء جديدة. و تُنقل هذه المجموعة إلى الأفرقة المكلّفة بالتحليل من دون أن يكشف لها عن طبيعة الإشارات المدخلة. وبصورة عامة تجري الأمور على ما يرام، إلا أنه تحدث أحياناً مفاجآت؛ فقد تكون إحدى الإشارات المدخلة مجهولة، ولكن الفيزيائيين الذين يعلمون أن عليهم أن يجدوا شيئاً ما، فإنّهم يجدونه... ولكن حيث لا يوجد شيء.

والخلاصة، تستخدم كلّ تجارب فيزياء الجسيمات المحاكيات، وغالباً مع ملايين الأحداث. إن زيادة أداء الحواسيب ونقصان أسعارها يشجّع على هذا الاتجاه. والأمر يتعلّق باستثمار مهم جداً في الرجال وفي العتاد. وتكون للقرارات المتعلّقة بنمط البرنامج المستخدم ومعمارية البرمجية وقواعد المعطيات تأثيرات على مدة التجربة بكاملها، عشر سنوات أو أكثر. وعلى الجماعة أن تعيد تجديد الجهود لتقييس البرمجيات والطرائق وتوحيدها.

(1) من الملاحظ مع ذلك أنّ هذه البرامج تكون مجانية ، مثل كل المنشورات العلمية.

(2) لا يوجد إلا برمجية مجمّعة progiciel (مجموعة كاملة من البرامج) واحدة عامة من هذا النمط مفتوحة للجميع: " جيان Géant " يستخدمها معظم التعاونيات (الأخريات كتبت برنامجها الخاص بصورة كاملة)، جرى وضع "جيان" في الأصل من قبل المختبر الأوربي لفيزياء الجسيمات الموجود في المركز الاوربي للبحوث النووية (CERN) للانتفاع بها إلاّ أنّ النسخة الأخيرة (IV) منها هي مشروع "مفتوح" لمساهمين متعددين . وهذا النمط من الكتابة الأصلية يحتاج أيضاً إلى إثبات براهينه ....

نمذجة السّطوح والسّطوح البينيّة والبنى النانويّة

ماري - كاترين ديسجونكير ، دانييل غرمبل ، هرفي نس
سـيريل باريتو
مديرية علوم المادة - مفوضية الطاقة الذرّية - مركز ساكلي
دانييل سبانجارد
مختبر فيزياء الجوامد - أورسي

مُلخّص

إن فهم عمليّة ما وامتلاك ناصيتها، كالتركيب البنيوي التلقائي للسّطوح أو النقل الكهربائي بين رأس مجهري وسطح، هما أساسيّان في صناعة التي تقوم على التقانات الجديدة، حيث النمنمة هي الرهان الأوّل. في هذا المجال، ينبغي للنمذجة أن تأخذ بالحسبان الطبيعة الذّرية للمادّة بدقّة كبيرة جداً.

الكلمات المفتاحية: فيزياء السطوح، كيمياء السطوح، السطوح البينية، البنى النانوية، مجهر المفعول النفقي الماسح

إنّ انتقال عينة في مجهر المفعول النفقي، يسمح بدراسة البنى النانوية في المواد النصف الناقلة في مركز مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية بغرونوبل.

انّ فيزياء السّطوح والسّطوح البينيّة مجّال واسع جداً في فيزياء المادّة الكثيفة. ويضمّ ميدان البحث في هذا الفرع من الفيزياء دراسة الظواهر اليومية الشائعة، شيوع انسياح قطرة سائل على سطح صلب أو تآكل إحدى الموادّ، كما يضمّ أيضاً عمليات أقل شيوعاً، مثل التركيب البنيوي التلقائي لسطح بلّوريّ أو النقل الكهربائي بين رأس معدنيّ مجهري وسطح.

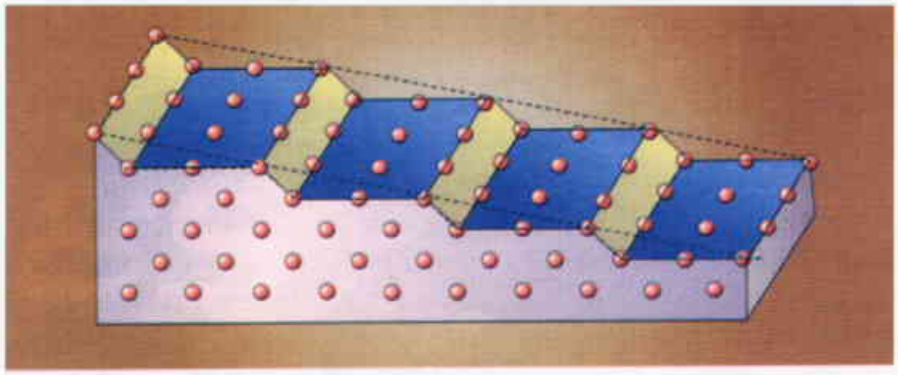
يتطلّب الفهم الدقيق لظواهر السطح وصفاً في السلّم الذّري الذي هو مكمن كل صعوبة نمذجتها. وينبغي أن تأخذ النماذج النظرية بالحسبان الطبيعة الذّرية للمادّة بدقّة كافية. هناك ثلاثة أمثلة من الدراسات جارية في مفوضية الطّاقة الذّرية يقوم فيها فريق نمذجة السّطوح والسّطوح البينيّة والبنى النانويّة (MSIN) في قسم فيزياء وكيمياء السّطوح والسّطوح البينيّة توضّح المنهجية المستخدمة. يتناول المثال الأوّل مسألة شكل التوازن لسطح معدني. ويعالج الثاني مصوّرة السّطوح في السلّم الذّري

و يبحث المثال الثالث في الناقلية الكهربائية على طول السّطوح البينيّة ناقل - عازل - نصف ناقل[1] المستخدمة في الصناعة الإلكترونيّة المكرويّة.

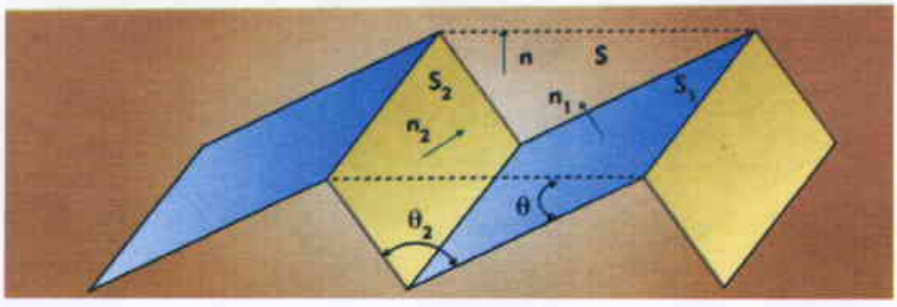
التحكّم في عدم استقرار بعض السّطوح التجاوريّة

إن المقصود في المثال الأوّل، هو أن تدرس جانبية التوازن لسطح. في الواقع، إنّ السطوح بحسب بنيتها التشكيلية يمكن أن تكون حاملاً منا سباً لإعداد أنواع مختلفة من البنى النانويّة، التي لها تطبيقات عديدة محتملة. أمّا نقطة الانطلاق فهي سطح خاص جداً يسمّى "التجاوريّ"، نحصل عليه بشطر بلّورة وفق مستوى بلّوري باتجاه ينحرف قليلاً عن مستوى عالي الكثافة الذريّة. يظهر مثل هذا السطح بشكل تتابع دوري من المصاطب، تفصلها درجات ارتفاع كل منها ذرّة واحدة (الشكل 1a)، ولهذه المصاطب مميّزات مهمة. فأبعادها نانومترية[2] من جهة ومن جهة أخرى يمكن الاستفادة من عدم الاستقرارية الطبيعية لبعض هذه السطوح التي تميل تلقائياً إلى اعتماد جانبية على شكل "سقف مصنع" (الشكل 1b) مع الاحتفاظ باتجاهها الوسطي. وتعرف هذه الظاهرة باسم التضليع الوجيهي. وعندئذ تفضل الذرات المتوضعة على هذه السطوح شغل المواقع الكائنة في الزوايا الداخلة حيث يكون عدد روابطها أعظمياً. وهكذا يمكن إنشاء شبكة دوريّة من أسلاك نانويّة، خواصها المغنطيسية والنقل الإلكتروني ذات فائدة تقانية مهمة.

إن شرط التضليع الوجيهي (المؤطر1) ينطوي على إمكانية حساب طاقة السطح، أي الطاقة اللازمة لتوليد سطح مساحته واحدة السطوح في اتجاه ما. وترتبط هذه الطاقة بانقطاع الروابط الكيميائية عند توليد السطح. وثمة مقاربات مختلفة لحسابها، وترتكز أبسطها على استخدام كمونات تجريبية تصف التفاعل المتبادل للذّرات، تقريباً كما تتبادل الكواكب التأثير بتابعية المسافة الفاصلة بينها. والمقاربة الثانية أكثر تعقيداً، تنطلق من الوصف الكمومي للظواهر المعتمدة. لقد بُرهن أن استعمال كمونات تجريبية يؤدي إلى سلوك مختصر جداً (الإيضاح في الصفحة التالية)، لأنه مبسط كثيراً ولايمكن إلا لحساب كمومي كامل فقط (المؤطر 2) أن يحدد إن كان السّطح التجاوري مستقراً أو غير مستقر بالنسبة إلى التضليع الوجيهي. إن هذه النتيجة المهمة تثبت مّرة أخرى أن خواص السّطوح تحكمها فيزياء وكيمياء الروابط الذّرية التي يستلزم وصفها نماذج معدّة.



الشكل 1a. سطح تجاوري ذو درجات أحادية الذرّة



الشكل 1b. سطح مضلع الوجيهات على شكل "سقف مصنع".

رؤية السّطوح وفهمها في السلم الذرّي

يقوم المثال الثاني على رؤية السّطوح في السلّم الذّري والأفضل على فهمها، وقد أصبحا ممكنين بفضل مجهر المفعول النفقي (أو STM). فمنذ ظهوره في بدايات الثمانينيات، سمح هذا المجهر لعلماء فيزياء وكيمياء السطوح بتحقيق حلم قديم

(1) النصف ناقل مادة تكون فيها الحالات الالكترونية المشغولة (عصابة التكافؤ) منفصلة عن عصابة الحالات غير المشغولة (عصابة النقل) بعصابة ممنوعة ضيقة نسبيا. هذه المادة هي عازل كهربائي في درجة الصفر المطلق، إلا أنها تصبح ناقلة باعتدال عندما ترتفع درجة حرارتها ارتفاعا كافيا لإثارة الكترونات من عصابة التكافؤ نحو عصابة النقل.

(2) النانو 10^{-9}= متر

المؤطر 1 التضليع الوجيهي بالصيغ الرياضيّة

تتحوّل المساحة S لسطح تجاوريّ إلى وجيهين بناظم n_1 (للمساحة S_1) وناظم n_2 (للمساحة S_2)، إن كان التحويل يخفض طاقة المنظومة. فإذا كانت الحروف γ_2، γ_1، γ ترمز إلى طاقات السطح للسطوح المتقابلة، فما تقدّم ذكره يعبّر عنه بالشّكل الآتي:

$$\gamma_1 S_1 + \gamma_2 S_2 < \gamma S$$

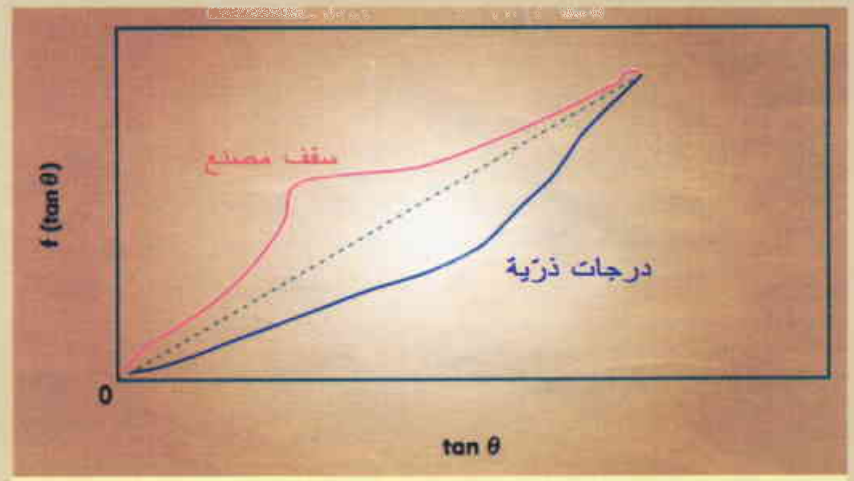
مع انحفاظ وسطي الاتجاه بفعل القيد، أي:

$$S=S_1 \cos\theta + S_2 \cos(\theta_2-\theta), S_1 \sin\theta = S_2 \sin(\theta_2-\theta)$$

حيث θ هي الزاوية بين S وS_1 وθ هي الزاوية بين الوجيهين S_1 ، S_2 . ويمكن جمع هذين الشرطين في شرط وحيد هو:

$$\gamma/\cos\theta > (1-\tan\theta/\tan\theta_2)\gamma_1 + (\tan\theta/\tan\theta_2)\gamma_2/\cos\theta_2$$

ولهذه المتراجحة معنى هندسي بسيط: إن السطح الذي اتجاهه θ يكون غير مستقر إذا كانت النقطة التي تمثله في المنحني البياني $\gamma/\cos\theta = f(\tan\theta)$ تقع فوق المستقيم الواصل بين النقطتين المعرفتين بالإحداثيات $(0, \gamma_1)$ و $(\tan\theta_2, \gamma_2/\cos\theta_2)$ (انظر الشكل)، ويكون مستقراً في الحالة المعاكسة.



الشكل. تمثيل بياني تخطيطي للتابع $\gamma/\cos\theta = f(\tan\theta)$ وشرط الاستقرار (أو عدم الاستقرار) لسطح تجاوري.

المعلومات المستقاة من مجهر المفعول النفقي وتفسيرها تفسيراً صحيحاً عن طريق المحاكاة الرقمية (المؤطر A، ماهي المحاكاة الرقمية؟). يستخدم النظريون لتحقيق ذلك طرائق الحساب الرقمي التي تجمع بين مقاربة تقليديّة لديناميك الذّرات وبين وصف كموميّ (المؤطر 2) للإلكترونات التي تساهم في الروابط الكيميائية بين الذرّات. فانطلاقاً من وصف ابتدائي مقبول للسطح (تركيبه الكيميائي وهندسته عند الانطلاق)، تسمح هذه الطرائق بالحصول على البنية الهندسيّة لتوازن المنظومة، وأيضاً على التشكيلة الإلكترونية الموافقة. وما ينبغي عمله بعدئذ هو حساب التيار الذي يجري بين الرأس المستدق والسطح. فتستعمل عندئذ الصيغ النظرية المعدّة إعداداً جيداً أو ضعيفاً من أجل نقل الإلكترونات في البنى المجهرية، وتُكيَّف مع مسألة النقل الإلكتروني في وصلة مجهر المفعول النفقي. ويمكن حساب التيار الذي يمر من الرأس نحو السطح (أو بالعكس حسب إشارة التوتر المطبق). أما الصّور (بارتفاع ثابت للرأس أو بتيار ثابت) فتحسب وتقارن بالصور التجريبية. وتكرر العملية حتى الحصول على توافق كافٍ بين التجربة والنظرية.

يراودهم حول فهم المادة " والتعامل " معها ذرةً ذرة، بواسطة رأس مستدق نهايته ذات بعد ذرّي، تنتقل فوق السطح المراد ملاحظته (المؤطر 3).

ومع ذلك يتطلّب تفسير المعلومات المحصّلة مقاربة نظرية متينة. وتكمن كل فائدة مجهر المفعول النفقي، في الواقع في حساسيته بتفاصيل بنيتي السطح الهندسيّة والإلكترونية، ، مما يسمح بالحصول على صور ميزها في السلّم الذرّي. إلا أنّ، الإراءة بمجهر المفعول النفقي لا تسمح دائماً بتفسير خال من الغموض للسطح الملاحظ، لأنّ البنية الذريّة والإلكترونية للسطح لا يمكن أن تستنبط مباشرة من الصورة الحاصلة. إن دور النظرية وتفاعلها مع التجربة هو الذي يسمح بتعرف

نمذجة تباطؤ زجاج الإلكترونات

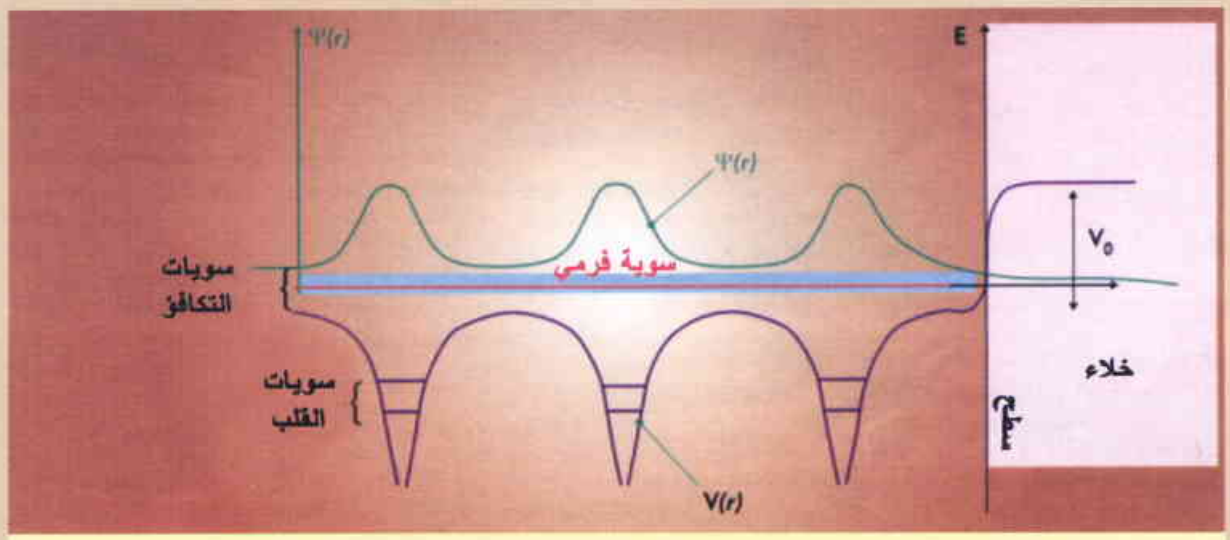
يتناول المثال الثالث نمذجة "زجاجيات الإلكترونات" في مجال الناقلية الكهربائية ضمن المكونات الإلكترونية المكروية. تطلق هذه التسمية على المنظومات الإلكترونية التي ديناميتها، بطيئة جداً في سلّم الأزمنة التجريبية، تشبه دينامية الزجاجيات البنيوية. ففي (المنظومات) الشبيهة بالطبقات الرقيقة المعدنية أو بالسّطوح البينية معدن - أكسيد - نصف ناقل (MOS)، تنحصر إلكترونات الناقلية في مستوٍ، بفعل هندسة المنظومة. غير أن قياسات النقل، قد أظهرت وجود منظومات لا تكوّن الإلكترونات فيها مائعاً ناقلاً (كما هو الحال في المعادن العاديّة) بل زجاجاً من الإلكترونات. ويُظهر هذا الزجاج من

المؤطر 2

الإلكترونات في الأجسام الصلبة

الإلكترونات هي مصدر خاصتي تماسك الموادّ وناقليتها الكهربائية. لا تخضع الإلكترونات إلى قوانين الميكانيك التقليديّ بل إلى قوانين ميكانيك الكم. فلا يوصف سلوكها بمسار بل بتابع الموجة العقدي $\psi(r)$ الذي تحكمه معادلة تفاضلية جزئية $H\psi(r)=E\psi(r)$ تدعى معادلة شرود نغر، وهي تعطي أيضاً طاقة الجسيم ε. أما المؤثر H، الذي يدعى الهاملتوني، فمركب من حدّ الطّاقة الحركية ومن الكمون الذي تخضع له الإلكترونات. ويعطي مربع تابع الموجة $|\psi(r)|^2$ احتمال وجود الإلكترون في نقطة r من الفضاء، ومما يقتضي بأن يستجيب $\psi(r)$ لبعض الشروط حتى يقبل فيزيائياً. ففي حالة الإلكترونات المرتبطة بذرّة، لا يمكن تحقيق هذه الشروط إلاّ من أجل قيم متقطعة لسويات الطّاقة التي يقال عنها إنها "مُكمّمة" (ومن هنا اشتقت تسمية الميكانيك الكمومي). وتحتل هذه الذرّات السويات بحسب ترتيب الطاقة المتزايدة بواقع إلكترونين على الأكثر في السويّة الواحدة. فإذا قربنا إلكترونات بعضها من بعض لتكوين جسم صلب، فسويات "القلب" التي توافق الإلكترونات الأقرب من النواة تكون قليلة الاضطراب، وعلى العكس من ذلك فإنّ إلكترونات التكافؤ التي تؤلف الطبقات الإلكترونية الخارجية، التي طاقتها أكبر، تترك مواضعها وهذا يؤدّي إلى تماسك الجسم الصلب. وتكوّن سوياتها عصابات الطاقة (راجع الشكل)، التي تملؤها الإلكترونات حتى آخر سوية مشغولة وتدعى سوية فرمي. ونحصل على مركبة أساسية للطاقة الكلية للمنظومة بجمع طاقات الإلكتروناتها كلها. هذا، وإنّ التعديل في سويات الطّاقة وتوابع الموجة بجوار سطح ما هو أصل طاقة السطح. أضف إلى ذلك، أنه بوجود سطح، وإذا ظلت الإلكترونات محصورة بالضرورة في الجسم الصلب بفعل حاجز كموني ارتفاعه منته، يكون لهذه الإلكترونات احتمال غير معدوم في أن تنطلق إلى الخلاء. فهذه الإلكترونات التي تخرج من السطح وطاقتها قريبة من سوية فرمي هي التي تكتشف بتولد تيار كهربائي (يقال له "تيار النفق") عندما نقرّب رأساً معدنياً مستدقاً إلى مسافة من مرتبة النانومتر [2].

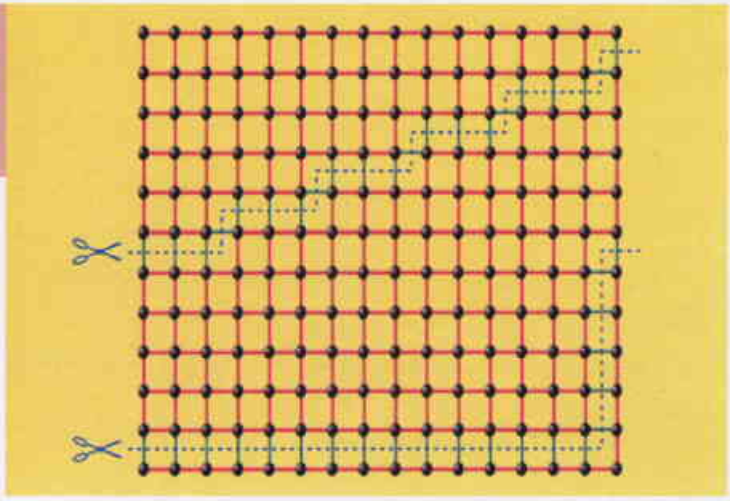
إنّ التعيين النظري لكل خاصّة فيزيائية للجسم الصلب تمرّ إذاً بحلّ معادلة شرود نغر، الذي على الرّغم من مظهره البسيط، لا يمكن إجراؤه إلاّ بحسابات طويلة على الحاسوب، انطلاقاً من فرضيّات تبسيطية ولكنّها معقولة. وفي بعض الحالات، ثمّة كمونات تقليدية للتأثرات بين الذرات، تجريبية تقريباً، تسمح بحساب طاقة المنظومة. وتحوي هذه الكمونات بشكل ضمني وتقريبي مفعول الإلكترونات إلاّ أنها ابتدائية كثيراً كي تشرح طبيعتها الكموميّة شرحاً وافياً.



شكل، تمثيل بياني تخطيطي للكمون $V(r)$ كما يراه الإلكترون ولتابعه الموجي $\psi(r)$ في جوار سطح يتميّز بحاجز كمونه V_0. وكل بئر كمون يقابل ذرّة واحدة.

جهة أخرى مفاعيل الذاكرة: فلا تتوقف خواصه في لحظة معينة فقط على الشروط الموجود فيها (درجة الحرارة، الكثافة، الخ.....) بل تتوقف أيضاً على الطريق المسلوكة للوصول إليها بدءاً من حالة ابتدائية.

فالمنظومات التي شوهدت فيها هذه الخواص البارزة كانت مقاوماتها عالية جداً (عدّة ملايين أوم)، وهي علامة على بنية فوضوية جداً. ففي وجود فوضى كبيرة، تعاني الإلكترونات من مفاعيل خفيفة من التداخل الكموميّ تمنعها من الانتشار

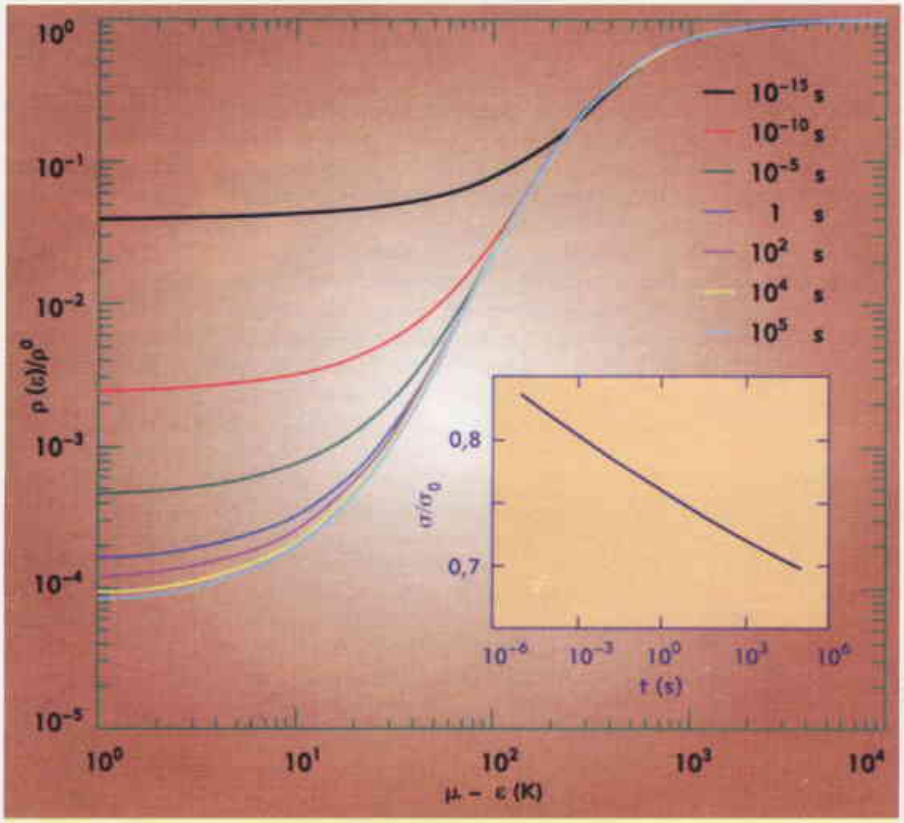


أبسط نموذج طاقي لوصف بلّورة ، تكتب الطاقة الكلّية كمجموع التأثرات بين أزواج ذرّات الجوار الأول . في هذا النموذج، تتعيّن طاقة السطح بعدد الروابط المقطوعة (بالأخضر). يظهر مباشرة بهذا النوع من الكمون التجريبي أنّ للسطح التجاوري والسطح المضلّع الوجيهات، الطاقة نفسها بالضبط (العدد نفسه من الروابط المقطوعة)، وهذا لا يسمح بحل مسألة الاستقرار.

جداً. وفي درجة حرارة منخفضة، وعندما تتطور المنظومة نحو التوازن بدءاً من حالة ابتدائية مفروضة، ينبغي لها أن تستكشف هذه الحالات بالتتابع. غير أنّ حواجز الكمون التي تفصل بينها (وبالتّالي، الزمن اللازم لإجراء انتقال بين حالتين من هذه الحالات) تكون موزّعة على امتداد كبير حتى أنه بعد انتظار فترات من الزمن طويلة اعتباطاً، يبقى هناك دائماً حواجز ينبغي تخطيها. وهذه الظاهرة هي أصل الدينامية البطيئة التي تلاحظ في التجارب.

ويتضح هذا البطء من تطوّر كثافة الحالات[4] مع الزمن في نموذج مبسّط لزجاج الإلكترونات (الشكل 2). تقع المنظومة في اللحظة الابتدائية في حالة فوضوية في درجة عالية من الحرارة، تسقى[5] بعدها فجأة في درجة حرارة 4K. يلاحظ البطء الشّديد جداً في تطوّر كثافة الحالات التي طاقتها ε قريبة من سوية فرمي μ . وفي الواقع، لم تبلغ هذه الحالات التوازن حتى بعد انقضاء أكثر من يوم واحد من عملية السقي إن ناقلية

في المنظومة، كما في بلّورة قليلة الفوضى. وبسبب هذه المفاعيل المهمة خاصّة في المنظومات الثنائيّة البعد، تبقى الإلكترونات مأسورة حول مواضع معيّنة موزّعة عشوائياً في الحيّز. وطاقات هذه الحالات، الملقبة بالمتموضعة، هي أيضاً عشوائية وتمتد في مجال يتعيّن عرضه بدرجة الفوضى. وكلّ حالة إجمالية للمنظومة توافق واحداً من الأساليب المتعدّدة لتوزيع الإلكترونات على الحالات المتموضعة. والتشكيلات ذات الطاقة المنخفضة للمنظومة تنتج من البحث عن التوفيق بين شرطين اثنين يمكنهما أن يظهرا متعارضين. فمن جهة أولى يحسن وضع الإلكترونات أبعد ما يمكن بعضها عن بعض لينخفض إلى الحدّ الأدنى تدافعها الكهراكدي. ومن جهة أخرى، ينبغي أن تشغل الإلكترونات الحالات المتموضعة الأكثر عمقاً من حيث الطاقة كي تنخفض إلى الحدّ الأدنى تأثراتها مع الكمون العشوائي. وعندما يكون هذان التأثران من المرتبة نفسها، يغدو التقيد بالشرطين معاً أمراً مستحيلاً. فيقال عندئذ، إن المنظومة محبطة ويؤدي هذا الإحباط إلى نتيجة مهمة وهي تكاثر عدد الحالات الشبه مستقرة[3] التي تكون طاقاتها متقاربة جداً، لكنّ بناها مختلفة



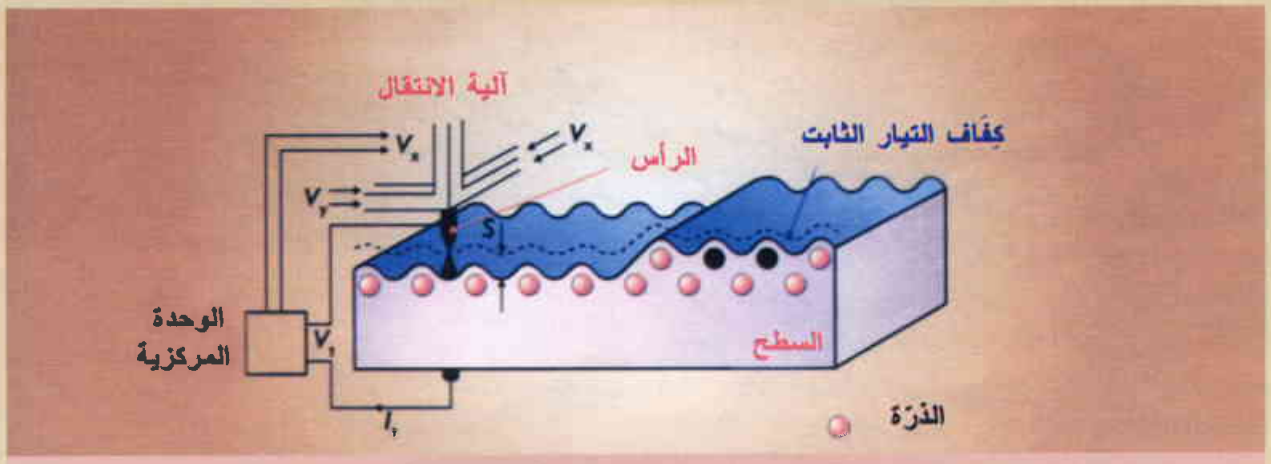
الشكل 2. التطور مع الزمن لكثافة الحالات $\rho(\varepsilon)$ لزجاج إلكترونات نموذجيٍّ بعد سقاية في درجة حرارة منخفضة. والوسطاء المختارة توافق سطحاً بينياً من النوع MOS أساسه الأكسيد In_2O_3 ويمتد زمن المراقبة بين جزء من ألف من الثانية وأكثر من يوم واحد بقليل. المنحني المؤطر ، انسياق الناقلية σ مع الزمن. تمثل كثافة الحالات والناقلية بوحدات اعتباطية، والطاقات بالكلفن.

(3) الحالة الشبه المستقرة، هي الحالة التي تبقى المنظومة فيها " مجمدة " في حالة مثارة (في سوية طاقة أعلى من حالتها الأساسية) خلال زمن معين.
(4) كثافة الحالات تابع للطاقة $\rho(\varepsilon)$ بحيث يكون $\rho(\varepsilon)\delta\varepsilon$ هو عدد الحالات الإلكترونية لمنظومة طاقتها محصورة بين ε و $\varepsilon+\delta\varepsilon$، حيث $\delta\varepsilon$ مجال صغير جداً من الطاقة.
(5) تكمن عملية الإسقاء في تجميد بنية تم الحصول عليها في درجة عالية من الحرارة في سبيكة أو في زجاج، عن طريق التبريد المفاجئ.

المنظومة، المحدّدة بهذه الحالات حسّاسة جداً بهذه الظاهرة. للنمذجة أن تأخذ بالحسبان مميّزات المادة بدقّة كبيرة جداً. وهذا يترجم بانسياق بطيء جداً مع الزمن. وهنا أيضاً ينبغي

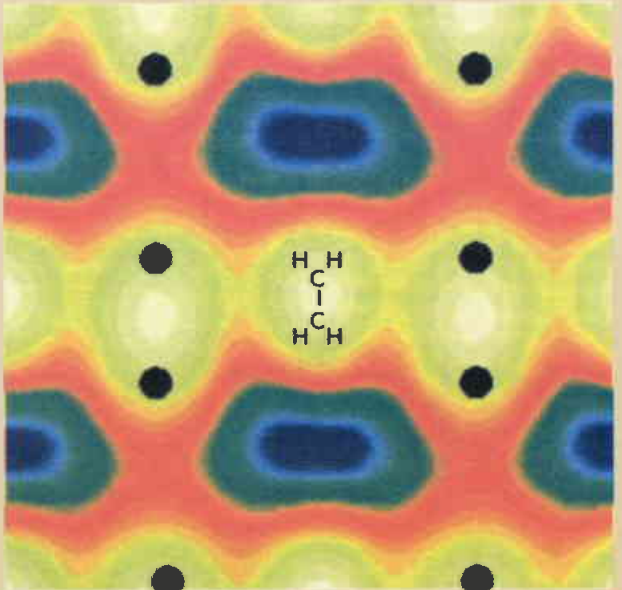
المؤطر 3 تقنية مجهر المفعول النفقي

إن تقنية مجهر المفعول النفقي (أو المجهر النفقي الماسح (scanning tunneling microscope)(STM تقوم على استخدام رأس نهايته ذات بعد ذرّي (من عدّة عشرات الذرّات إلى ذرّة واحدة) وينتقل فوق السّطح بدقّة قصوى (أقل من جزء مئوي من النانومتر). وعندما يطبّق توتّر بين العيّنة والرأس، يخرج تيّار كهربائي ليرسم خريطة بيانية للسطح (الشكل A). تحوي صور STM دائماً مزيجاً دقيقاً من المعلومات عن طبولوجيا السّطح وقدرته على نقل التيار الكهربائي



الشكل A تمثيل بياني تخطيطي لمجهر المفعول النفقي. إن آلية انتقال الرأس تسمح بمسح السطح (V_x, V_y) وإبقاء التيار I_t ثابتاً بضبط بعد الرأس عن السطح (V_z).

نقلاً محلياً جيداً تقريباً (المؤطر 2). ومع ذلك ليس هناك دعوى لعملية القلب تسمح بالعودة، بتقابل وحيد من صورة مجهر المفعول النفقي إلى البنية الذرّية والإلكترونية للسّطح. من هنا كان اللجوء الاضطراري إلى النظرية لتفسيرها. يبيّن الشكل B المثال الخاص لصورة محاكاة لسطح من السليسيوم توضعت عليه جزيئات من الأستيلين (C_2H_4).



الشكل B محاكاة الصورة بتيار ثابت لسطح من السليسيوم (Si) استقر عليه جزيء من الأستيلين (C_2H_4)، في الحالة الراهنة، حتى ولو كانت الجزيئات قد وضعت على ذرات السليسيوم من السطح (النقاط السود)، فإنها تبدو أقل لمعاناً من السطح الأجرد. وهذا متفق مع التجارب

وحديثاً، جرى تناول الذرّات والجزيئات الموجودة على سطح معيّن بواسطة رأس (STM) أي برأس المجهر بمفعول النفقي الماسح. ففي هذه الحالة، يمثّل مجهر النفقي "الأداة الأخيرة" لإعداد بنى اصطناعية على السطوح بطريقة متحكم بها ويمكن تكرارها. يفتح المجهر النفقي الماسح حقلاً للتحري المثمر من أجل فهم الصفات الكموميّة لهذه الأشياء الصغيرة. ويفكر العلميّون منذ الآن في تطبيقات تقانيّة. و ثمّة بالفعل تطور في الإلكترونيات في السّلم الذرّي أو الجزيئي، هو في أوج ازدهاره. ففي إلكترونيات الغد هذه، تتأمن الوظائف المنطقية للمكوّنات أو ببساطة أكثر نقل التيار، عن طريق جزيئات فردية أو بخطوط من الذرّات تقع على السّطوح. إن دراسة هذه المنظومات جارية لدى فريق نمذجة السطوح والسطوح البينية والبنى النانوية (MSIN).

النَمْذجة السلوكية

ن. لوكلير ، آ. ماسون ، ج. ف. د. فليت
مديرية التطبيقات العسكرية • مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية

مُلخّص

عندما ترتبط أداءات المنظومات المُعقّدة بوسطاء عديدة، يصعب غالباً تحديد أيّ التجاريب "الجيدة" الوحيدة التي ينبغي تحقيقها. إنّ النمذجة السُلوكية المُنفذة في مديرية التطبيقات العسكرية لمفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية تشكل مساعدة فعّالة لأمْثَلة مثل هذه المنظومات.

الكلمات المفتاحية: نمذجة سلوكية ، تجريب ، أمثلة ، منظومات .

ما هي الأهداف؟

إنّ أمْثلة منظومة مُعقّدة للتوصّل مسبقاً إلى أداءات نوعيّة تمرّ بالتعرف إلى وسطاء الاشتغال التي تُؤدّي إلى هذه الأداءات. وحتى إذا أمكن مع أداة المحاكاة الأكثر تنبئية، حساب أداءات المنظومة بتابعية وسطاء الاشتغال فالعكس غير ممكن. إن هذا البحث عن أفضل وسطاء التشغيل ودراسة حساسيتها إزاء التأرجحات حول قيمتها الاسمية يستندان إلى تِقْنيات شبه تجريبية.

وبُغية المُساعدة على الإجابة عن هذه الإشكالية، كانت مديريّة التطبيقات العسكريّة (DAM) في مفوضية الطاقة الذريّة قد طوّرت طرائق "لنمذجة سلوكية" للمنظومة. تستند هذه النمذجة إلى تحديد علاقة رياضيّة بين الأداءات وبين الوسطاء، بدون معرفة مُسبقة بالظواهر الفيزيائية التحتيّة (راجع المؤطر). وتكمن الصعوبة كلّها بطبيعة الحال، في الحصول على نموذج تجريبي ولكنه سهل وواقعي في مجال الدراسة. إن استثمار هذا النموذج يسمح بتقييم مختلف الوسطاء، وإيجاد تشكيلتها المثلى والقيام بدراسات حول الحساسيّة بشكلٍ مباشر وكلفة أقل.

مثالان للتطبيق العملي

إحكام عمليّة اللحام بالليزر YAG النبضاني

نفّذ هذه الدارسة قسمان اثنان من مديرية التطبيقات العسكريّة (DAM) مقامان في مركز مُفوضية الطاقة الذريّة في فالدوك. وكان الهدف تحديد التفاعلات السائدة بين وسطاء

تحضير عملية اللحام بالليز YAG النبضاني عند تنفيذ مستوى التجارب

عمليّة اللحام لضمان شكل فتيل اللحام وتوغّله المحدّدين مُقدَّماً، ونمذجة هذه التفاعلات بصورة تجريبية والمساهمة في إحكام كودات الحساب بعناصر منتهية تصف حراريّات اللحام (راجع أيضاً اللّحام الافتراضي).

وكان الاختصاصيّون قد تعرفوا على خمسة وسطاء مفترضةً مُؤثّرة (مدى الرَّمْي، وتواتر النبضات ومدتها، وطاقة الحزمة وسرعة تقدّمها) وافترضوا وجود ترابطات عديدة. وقد تمَّ إعداد نماذج على شكل كثيرات حدود تربط كل واحدة من الاستجابات (عرض فتيل اللّحام وتوغّله) بهذه الوسطاء.

تنفيذ النمذجة السلوكية

تستلزم النمذجة السلوكية للمنظومات استعمال أدوات نوعيّة مُرتبطة بسياق الدراسة، تستمد فعّاليتها من استعمال الأدوات الجبريّة والإحصائية. يمكن أن تذكر منها أداتين خاصة: سطوح التجارب وشبكات العصبونات.

مستويات التجارب

تسمح مستويات التجارب بتحقيق نمذجة سلوكية لمنظومة تربط الاستجابة بمتحولات الدخل، سواء أكانت كميّة (نموذج كثير الحدودي) أم كيفية (نموذج مصفوفاتي).

مثال: نموذج كثير الحدودي

$$Y = \alpha_1 X_i + \alpha_2 X_2 + \ldots + \alpha_i X_i + \alpha_{11} X_1^k + \ldots + \alpha_{ii} X_i^k + \alpha_{12} X_1 X_2 + \ldots + \alpha_{ij} X_i X_j + \varepsilon$$

حيث Y هي الاستجابة المدروسة

X_i متغيرات الدخل

α_{ij} المعاملات المطلوب تقديرها

ε القسم العشوائي من الظاهرة

k درجة كثيرة الحدود للمتغير المَعْني

ويجر تحديد الاختبارات (أو الحسابات) المطلوب تحقيقها بتنفيذ خوارزميات الاستمثال المتقنة التعقيد[1] ويستجيب إلى معايير جبرية يتحكّم التقيد بها في جودة تقدير معاملات النموذج المنشود.

إنّ تخفيض عدد الاختبارات إلى أدنى حدٍ، ومراعاة ترابطاتها يتطلبان أن يتمّ تغيير عدة عوامل معاً من اختبار إلى آخر. عندما تكون الاختبارات أو الحسابات موجودة بالفعل، يسهل إدماج بعضٍ منها في المستوى المقترح إن كانت مناسبة بالقدر الكافي (وفق المعنى الرياضي الموصوف أعلاه). ويسمح استثمار النتائج إحصائياً، في حالة التجريب، بفصل الآثار الحقيقية للوسطاء عن الآثار المرتبطة بتكرارية العملية المدروسة.

شبكات العصبونات

تسمح بتحقيق نمذجة سلوكية بتركيبات توابع لاخطّية. وعندما تبدي الظواهر عتبات، ثمّة اختيار مُلائم هو خيار التوابع من النوع السيغماوي (sigmoide)، أي من الشكل الآتي

مثال: نموذج الظل القطعي الزائدي

$$Y = \beta_1 \tanh(\alpha_{11} X_1 + \alpha_{21} X_2 + \ldots + \alpha_{i1} X_i) + \beta_2 \tanh(\alpha_{12} X_1 + \alpha_{22} X_2 + \ldots + \alpha_{i2} X_i) + \ldots + \beta_k \tanh(\alpha_{1k} X_1 + \alpha_{2k} X_2 + \ldots + \alpha_{ik} X_i)$$

حيث Y هي الاستجابة المدروسة

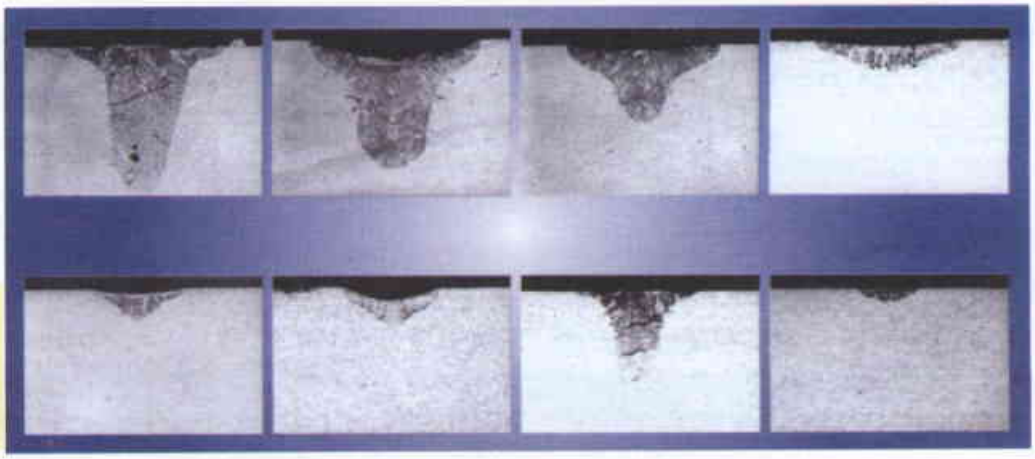
X_i متغيرات الدخل

α_{ij} و β_2 المعاملات المطلوب تقديرها

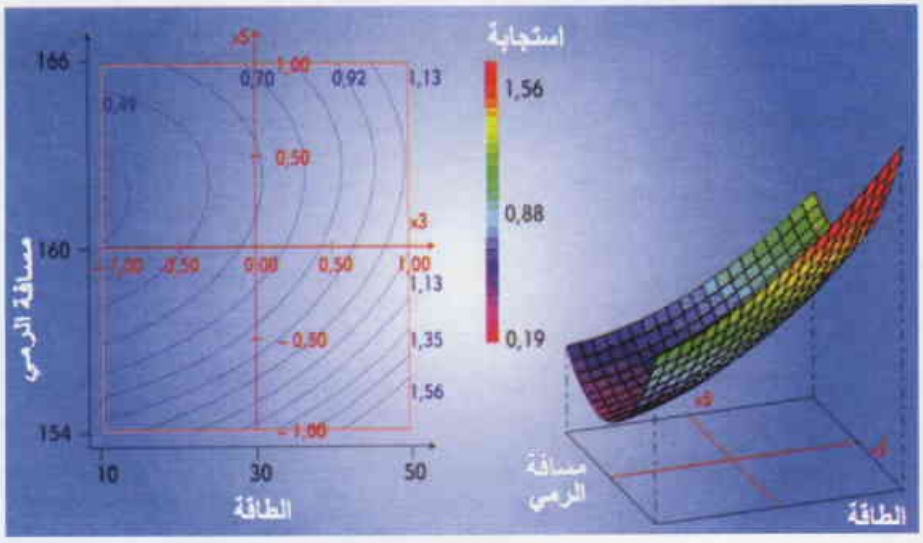
إنّها تُبدي فائدة كُبرى عندما تكون العلاقات بين الاستجابات والوسطاء لاخطيّة (سطوح الاستجابة مضطربة، ظواهر ذوات عتبات). إنّ تنفيذ هذه النماذج يستدعي خوارزميات استمثال نوعية[2].

إنّ هذه الأداة، التي نُفذّت تقليدياً لاستعادة ظواهر معقّدة عندما يكون كثير من المُعطيات متوفّراً، يُمكن أن تُستعمل مع عدد قليل من المُعطيات مختارة بمهارة.

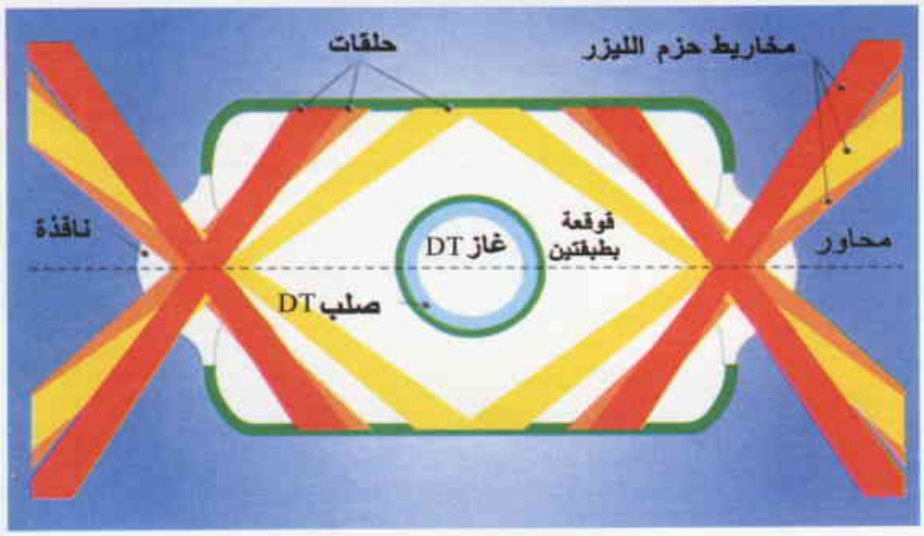
(1) فدروف، إحماء مُحاكى، خوارزمية وراثية.
(2) تدرّج بسيط، شبه - نيوتن، لفنبورغ - ماركارد.



الشكل 1- أمثلة على مقاطع فتائل اللحام الحاصلة عند مستوى تجارب اللحام بالليزر YAG النبضاني.



الشكل 2- مثال على واحد من سطوح الاستجابة العشرة التي تنمذج عرض اللحام عند منتصف ارتفاعه بتابعية طاقة الحزمة ومسافة الرمي.



الشكل 3- مخطط مبدئي للدريئة المُعَدّة لليزر ميغاجول أثناء تجربة إيقاد المزيج المؤلف من (دوتريوم وتريتيوم) الموجود في البالون المكروي المركزي.

وقادت الاستراتيجية التجريبية المختارة، وتنفيذ أدوات النمذجة السلوكيّة (المؤطّر) إلى تحقيق 28 اختباراً. وأدّت هذه الاختبارات إلى الحصول على فتائل لحام غير مألوفة نظراً لاتساع المجال المدروس (الشكل 1).

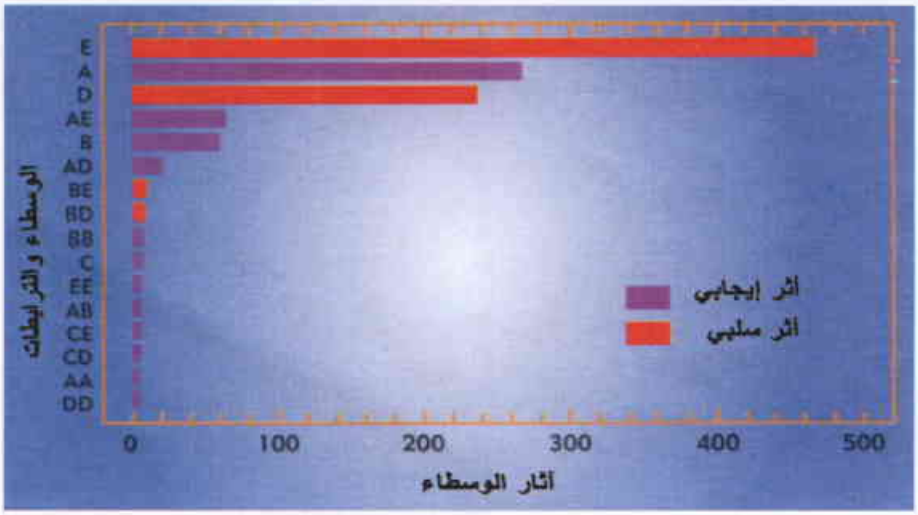
وقد سمحت هذه الاختبارات ببناء النموذج السلوكيّ المرغوب فيه. وبعد أن تمَّ إقرار صلاحية هذا النموذج بأربعة اختبارات إضافية، سمح هذا النموذج بمحاكاة العمليّة ودراسة تأثيرات الوسطاء وترابطاتها، وإيجاد أمثل ضبط يسمح بالحصول على توغّل اللّحام وشكله المرغوب فيهما وإثبات صموده إزاء الترنحات المُمكنة للوُسطاء ضمن مجال تسامحات صنعها.

وتمَّ تسهيل تفسير هذه الظواهر كثيراً بعملية إراءة سطوح الاستجابة بتابعية الوسطاء المأخوذة ثناءً (الشكل 2). وإن النفاذ إلى هذه التمثيلات، بدون طريقة، استوجب 243 اختباراً (3^5 :5 وسطاء، و 3 مراقبات لكل منها).

تقييم صمود اشتغال دريئة ليزر عند إجراء تجربة إيقاد

كان المقصود من هذه الدراسة في إطار مشروع ميغاجول (LMJ) (راجع المشروع المحاكاة: ضمان الأسلحة بدون التجارب النوويّة) تقييم صمود الدريئة ضد التشوّه (الشكل 3) أمام مختلف عُيوب التسديد والطاقة في أشعة الليزر الواردة، عند انبجاسها (هناك وسيطان مرتبطان بتغيرات القدرة المُطبّقة، وثلاثة أخرى مرتبطة بعُيوب التسديد لكل مخروط من حزم الليزر الواردة).

تمَّ الحصول على النموذج السّلوكي (كثير الحدودي) انطلاقاً من 27 حساباً (بدلاً من 3^5=243) أجراها الكود المستخدم لمحاكاة الانبجاس. أتاح هذا النموذج تنفيذ عدد كبير من المحاكيات (مونت كارلو) لتقييم هذا الصمود. وعلى الرغم من تعقيد الظواهر الفيزيائية المَعْنيّة (تأثر الليزر – المادة...)، فالنموذج الكثير الحدودي الحاصل يُمثّل الاستجابة في مجال الملاحظة.



الشكل 4- تراتبية الآثار الأساسية والترابطات لمختلف الوسطاء التي تؤثر في تشوّه اشتغال درينة ليزر ميغاجول.

وسمحت هذه النمذجة أيضاً بتراتب آثار الوسطاء (مثال: B, A,...) وترابطها (مثال: AD, AE, AB,...)(الشكل 4).

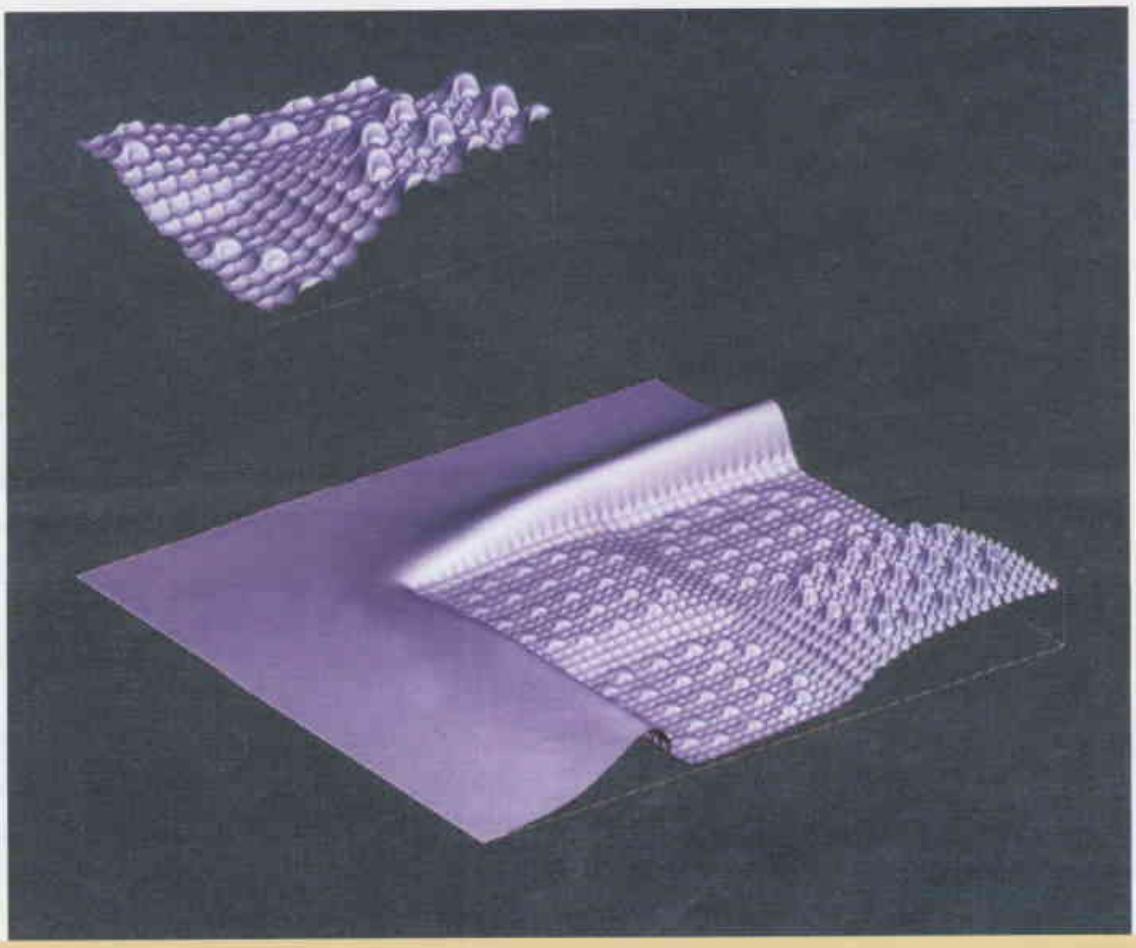
أدوات تشغيلية

إن النمذجة السلوكّية تُقدّم مساعدةً ثمينة لفهم اشتغال المنظومات وتساهم في التوصّل إلى مفهوم أمثل. وحالياً ثمّة برمجيات مكرسة وكفؤة تسمح ببدء وضعها قيد التشغيل. وهناك أبحاث جارية لتحسين نسبة عدد الاختبارات (الحسابات) إلى جودة النماذج.

II المحاكاة من أجل التصميم

عندما يبدأ الفرد العلمي بالفهم يمكنه أن يمرّر الفكرة إلى المهندس لتصميم الأشياء أو تصوّرها. وهذا يعني هنا استكمالاً خارجياً للنماذج أقل ممّا يعني استكمالها الداخلي، لأنّنا لا نعلم كيف نخرج بدون مخاطر من مجالها المناسب المثبت.

وهذا صحيح بصورة خاصة في الطاقة النووية المدنية. تستعمل الوسائل التجريبية والأدوات الرقمية بكثرة لاختبار واستمثال المفاهيم التي ستدخل في مفاعلات المستقبل. فبرنامج المحاكاة الذي تستخدمه إدارة التطبيقات العسكرية التابعة لمفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية، يهدف من جهته إلى تطوير الأدوات التي ستسمح لفرنسة بالحفاظ على المدى الطويل على مقدرة ردع موثوق وآمن في غياب التجارب النووية. وفي علوم الأحياء، يرتكز تصميم رقاقات الدنا، وهي أدوات التشخيص والتكهّن، على نمذجة هذه الجزيئات المعقّدة. أمّا فيما يتعلّق بتقدّم محاكاة العمليات الصناعية مثل عمليات اللحام أوالتبادل الحراري، فهو يسمح بتصميم المنتجات التي تستجيب دائماً بصورة أفضل إلى دفاتر الشروط.



الحساب الجاري بالبرمجية "كرونوس 2" من النظام "سفير Saphyr" التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية، والمتعلّق بالبنية الدقيقة للتدفّق الحراري (المفضل في المنظر العلوي) عند السطح البيني لتجميعات اليورانيوم والوقود موكس MOX لمفاعل بالماء بجوار عاكس.

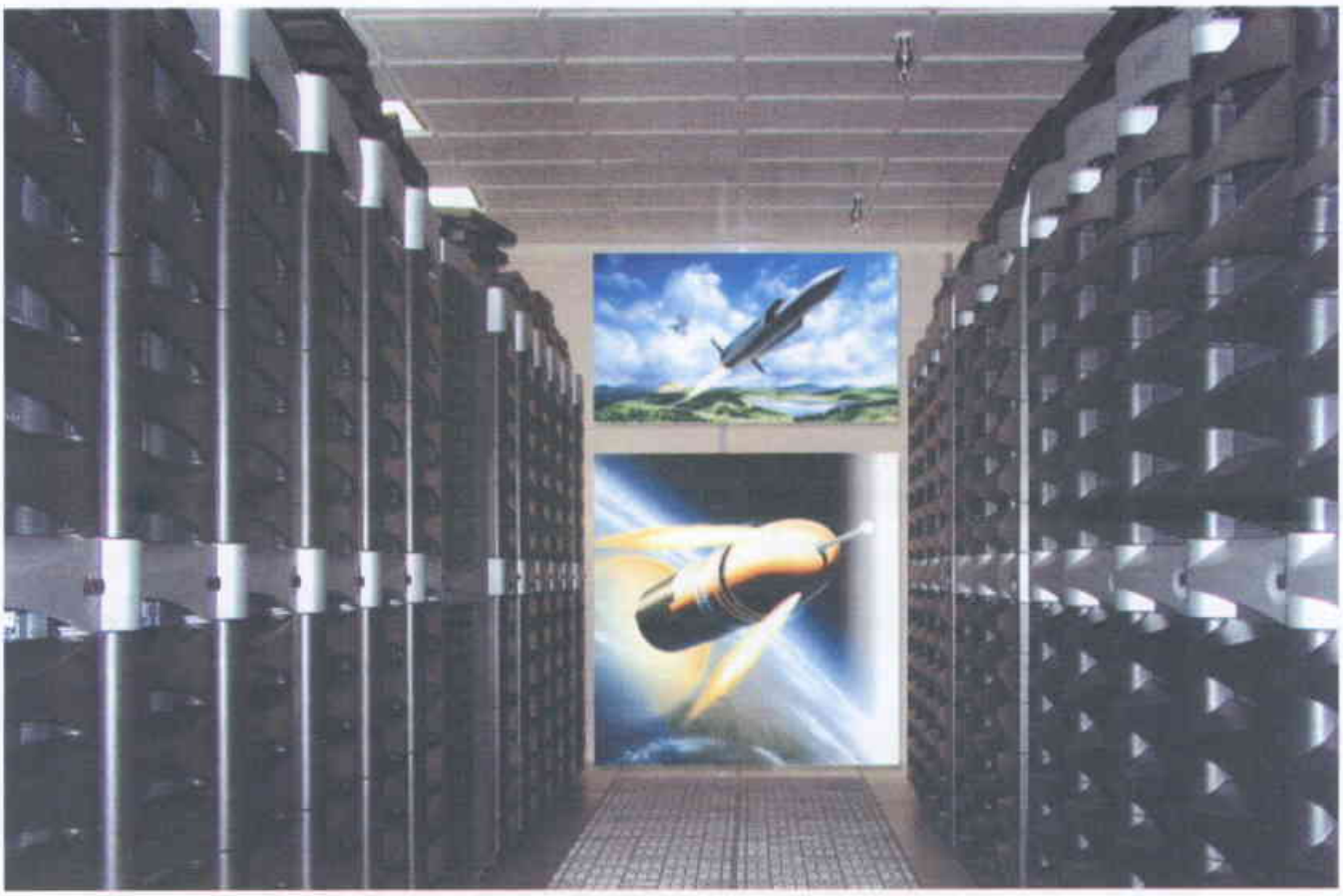
البرنامج المحاكاة: ضمان الأسلحة بدون التجارب النووية

د. بسنار
مدير البرنامج المحاكاة
مديرية التطبيقات العسكرية
مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية ـ (مركز دام ـ إيل دو فرانس)

ملخص

تُكوّن المحاكاة، من الآن فصاعداً، المنهجية الأساسية التي سيرتكز عليها ضمان وثوقية وأمان وأداء الأسلحة النووية الفرنسية ويُطلب منها أن تحلّ في حينه محلّ الرؤوس العملياتية. سيجري هذا العمل بدون تجارب جديدة، ولكن باللجوء إلى إعادة تفسير التجارب السابقة. أمّا النمذجة والمحاكاة الرقمية والتجريب فتبقى في الواقع مجموعة لا تنفصم عُراها، تُزود تدريجيّاً بأدوات جديدة ومقتدرة.

الكلمات المفتاحية: وثوقية السلاح النووي، معاهدة حظر التجارب النووية، المحاكاة الرقمية، أدوات المحاكاة



يتمتع الحاسوب الموازي تيرا Tera ـ العائد إلى مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية المقام في المركز دام في إيل دو فرانس من قبل شركة HP (Compaq) ـ بقدرة كلية عظمى تبلغ 5 تيرا فلوب والتي تجعل منه الأقوى في أوربة بمعالجاته البالغ عددها 2560 معالجاً تواتر كل منها 1GHz، تصل ذاكرته الحيّة إلى 2.5 تيرا أوكتت (To) أوسعة خزن أقراصه إلى 50 تيرا أوكتت téraoctets.
في الشكل، الرؤوس (TNA) المحمولة جوا والرؤوس عابرة المحيطات (TNO) التي تحملها على التتالي صواريخ ASMP-A (في الأعلى) و M51 (في الأسفل)، ستكون الأولى التي صُمّمت بمساعدة نتائج برنامج المحاكاة لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية.

إطار البرنامج الفرنسي

وقّعت فرنسة وصادقت على معاهدة حظر التجارب النووية الشامل (TICE) بعد أن أنهت حملة تجاربها الأخيرة التي امتدت من أيلول 1995 حتى كانون الثاني 1996. وكان الهدف من البرنامج المحاكاة الذي تقوده إدارة التطبيقات العسكرية (DAM) التابعة لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية أن يؤكد، في حالة غياب تجارب جديدة، ضمان الأسلحة المحمولة جواً والمنطلقة من الغواصات التي ينبغي أن تحلّ محل الأسلحة الموضوعة قيد الخدمة حالياً.

إن الوصول إلى هذا الهدف يقتضي إجراء قطيعة واضحة مع الماضي. أسّس الإجراء الجديد انطلاقاً من الضرورة المطلقة لاتخاذ وسائل لضمان أمان الأسلحة واشتغالها. وهو يرتكز على ثلاثة عناصر:

- مفهوم شحنات صلدة يستند إلى تشغيل قليل التحسس بالتغيّرات التقانية جرى اختباره أثناء حملة التجارب النهائية؛
- إقرار صلاحية الانحرافات الناجمة عن عسكرة الشحنة النووية أو التي تكون مهيأة للظهور خلال الحياة العملياتية للسلاح. وهذا الإقرار بالصلاحية سيتمّ بمساعدة أدوات البرنامج المحاكاة؛
- توثيق الأفرقة الجديدة، التي لم تكن لديها معرفة بالتجارب النووية، بوساطة الخبراء الذين يمتلكون هذه الخبرة. ومرحلة "تمرير الفكرة" بين الأجيال هي التي تكيّف توقيت البرنامج.

إن هذا الإجراء المستخدم لنتائج الحملة الأخيرة للتجارب بصورة محدّدة، يستبعد بطبيعته وضع تصاميم أسلحة جديدة ولا يسمح إلا بانحراف عن مبادئ التصميم الكبيرة التي أقرّت صلاحيتها من قبل. ومع الشحنات الصلدة، يشكّل البرنامج المحاكاة كلاً لا تنفصم عراه ويكوّن تماسكه أساس استراتيجية إعادة تجديد الأسلحة النووية الفرنسية.

المحاكاة، طريقة الاستعمال

الهدف هو إعادة إحداث اشتغال سلاح نووي حسابياً (المؤطر 1). وهذا العمل يرتكز على تسلسل من عمليات فيزيائية متعدّدة يجب وصفها مع مراعاة مقياسي الزمن والمكان المناسبين. وهكذا فإنّ كل نموذج يصف بطريقة تقريبية جزءاً من عمل السلاح عبر منظومة من المعادلات (انظر المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية؟). اختيرت درجة التقريب حسب احتياجات الدقة، إلا أنّها يمكن أن تتحدّد أيضاً بمعرفة الظاهرة الفيزيائية نفسها. و حدّ آخر يأتي من واقع أنه لا يمكن بكل بساطة وصف كل هذه الآليات الفيزيائية على المستوى الذرّي؛ إذ لا يتمتّع أي حاسوب بقدرة كافية.

المؤطر

مراحل اشتغال السلاح النووي

يستعمل السلاح النووي عند اشتغاله الاندماج النووي الحراري وليس فقط الانشطار النووي، فيطلق طاقة من رتبة مليار مليون جول في بضعة أجزاء من مليون جزء من الثانية. يشتمل مثل هذا السلاح على مرحلة أولية أو شعيلة ومرحلة ثانية تدعى المرحلة النووية الحرارية أو مرحلة القدرة. يتميّز اشتغاله بثلاثة أطوار مختلفة تستعمل عمليات فيزيائية متعددة: الطور التقني الناري والطور النووي والطور النووي الحراري (الشكل).

الطور التقني الناري: يُطلق الصاعق عمل الشعيلة، وينتشر الصعق في المتفجّر الكيميائي ضاغطاً المادة الانشطارية (اليورانيوم أو البلوتونيوم).

الطور النووي: يُطلق انشطار المواد النووية الطاقة، ويُجهّز المادة الاندماجية للطور النووي الحراري.

الطور النووي الحراري: يحرّر اندماج الذرّات طاقة من رتبة بضعة مليارات ميغاجول.

	الطور التقني الناري	الطور النووي	الطور النووي الحراري
درجة الحرارة	نحو 10^3 درجة مئوية	نحو 10^7 درجة مئوية	نحو 10^8 درجة مئوية
الضغط	بضع 10^5 جو	نحو 10^7 جو	بضع 10^8 جو
المدة	بضع 10^{-6} ثانية		بضع 10^{-8} ثانية
السرعة	بضع كم/ثا	بضع 10 كم/ثا	بضع 10^2 كم/ثا

تسمح كل مرحلة بزيادة الطاقة المنطلقة زيادة كبيرة وببلوغ العتبة التي تنطلق بعدها المرحلة التالية. وعليه فإنّ التأكد من بلوغ كل عتبة هو أمر أولوي لضمان اشتغال السلاح.

تجري الحسابات ببرمجيات مكوّنة من التفسير المعلوماتي لمجموعة هذه النماذج. فطالما كان اللجوء إلى التجارب ممكناً، فإنّ جزءاً من التجريبية في بعض منها يبقى مقبولاً. لقد أقرّت التجربة النووية إجمالاً صلاحية خطوات النمذجة. ولم تعد الأمور تجري كذلك في الوقت الحاضر، إذ يجب حالياً جلب مجموعة النماذج الأولية التي تصف تشغيل السلاح، إلى مستوى كاف من التنبؤ.

نماذج أكثر تنبؤاً

يستعمل البرنامج المحاكاة من أجل ذلك نتائج الأبحاث التي أجريت بنشاط في مجالات متعدّدة من الفيزياء (انظر النمذجة الفيزيائية: مثال العتامة). تتقدّم هذه الأبحاث بفضل عمليات تكرارية بين النماذج وتجارب إقرار الصلاحية (المؤطّر D التجارب التحليلية والتجارب الشاملة) . وقد أُجري جزء منها بالتعاون مع معاهد بحث عديدة أو جامعات فرنسية وأجنبية وأدت إلى مجموعة من معطيات الدخول إلى البرمجيات، هي أساسية لتصميم الأسلحة.

والاحتياج إلى الدقة في وصف عمل هذه الأسلحة يكمن في ضرورة استعمال حواسيب كبيرة القدرة. وبالفعل فإنّ التكلّم عن نماذج أكثر تنبؤاً يعني أنّ الآليات الفيزيائية الجاري استخدامها تُعرّف بطريقة أكثر دقة. والمقاييس الزمنية والمكانية الواجب وصفها كثيرة جداً، ومَيز النماذج إذن أكثر كلفة. يمر الميز باستعمال مخططات رقمية تسمح بالمرور من الصيغة الرياضياتية للنموذج، المعطاة بالنظرية، إلى صيغة يمكن معالجتها بالحاسوب. وهكذا يدخل تقريب إضافي؛ يتعلّق بإنقاص الميز حسب قدرة الحواسيب وتقدّم الأبحاث في التحليل الرقمي.

إنّ تحسين قدرة تنبؤ النماذج لا يمرّ بالفيزياء والرقميات فقط ولكنه يمرّ أيضاً بوصف معلوماتي أكثر أمانة لهندسة السلاح وبيئته. وبصورة خاصة، يمكن أن تقود بعض التفصيلات التقانية إلى تغيّرات صغيرة في نتائج المحاكيات يجب أخذها بالحسبان. وكل هذا يساعد على ضرورة استعمال برمجيات ثلاثية الأبعاد برتابة، تتطلّب في الوقت نفسه قدرة حسابية كبيرة وذاكرة كبيرة . ولهذه الغاية جرى اختيار طريق الحواسيب المتوازية بكثافة من قبل DAM (المؤطر B الوسائل المعلوماتية عالية الأداء للمحاكاة الرقمية).

إقرار الصلاحية تجريبياً بالتجزئة...

ستُجمّع البرمجيات الجديدة كل المعارف المكتسبة حول فيزياء الأسلحة. يمر إقرار صلاحيتها بالضرورة بتنفيذ مجموعة من التجارب تتيح كل منها إقرار صلاحية جزء من وصف عمل السلاح؛ وهذا ما يدعى إقرار الصلاحية بالتجزئة. قادت القفزة النوعية التي تتطلّبها أغراض البرنامج المحاكاة إلى تطوير منشآت جديدة تسمح، كما سنرى فيما بعد، إمّا بزيادة الدقة المتوقّعة من النتائج التجريبية بصورة محسوسة جداً وإمّا بتناول موضوعات فيزيائية في المختبر لم يكن بالإمكان دراستها من قبل إلاّ بصورة إجمالية وغير مباشرة عبر التجارب النووية. تزوّدنا المحاكاة الرقمية للاندماج النووي الحراري، ومقارنتها بالتجارب المنفّذة بوساطة ليزرات قوية جداً، بمثال واقعي على هذه المنهجية للبرنامج "المحاكاة " (انظر الاندماج النووي الحراري بالحصر العطالي في المختبر).

قاعة خط الدمج الليزري (LIL) التي تصوّر بصورة مسبقة واحداً من الثلاثين خطاً ذات الثماني حزم من الليزر ميغاجول LMJ
في الأسفل مخطّط وحدة الجزء الليزري من المنشأة الموضوعة في الخدمة في سيستا بالقرب من بوردو في الفصل الثاني من عام 2002.

يكن بالإمكان الوصول إليها حتى الآن في المختبر. وهذه هي الترجمة الواقعية لاستعمال المحاكاة لضمان الأسلحة النووية.

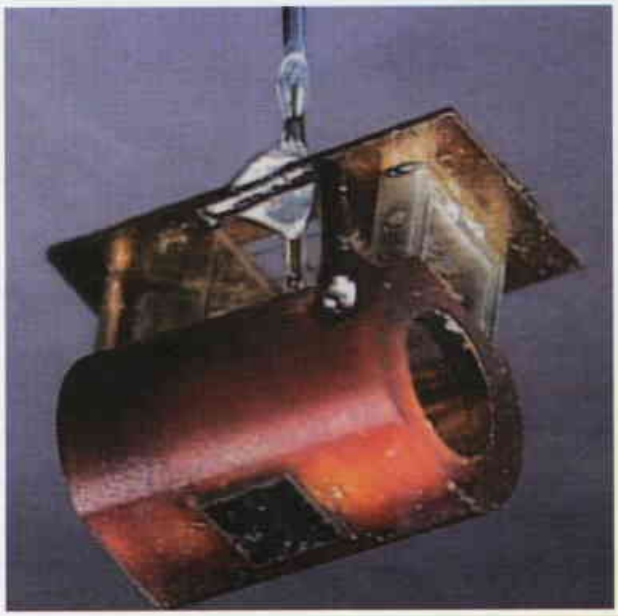
الأدوات الكبرى للمحاكاة

أصبح من الضروري لتطوير وإقرار صلاحية البرمجيات استعمال أدوات جديدة للحساب (الحواسيب) ولدراسة (مولدات أشعة X والليزرات) المراحل المختلفة من عمل آلة نووية.

حواسيب أكثر قوة أيضاً

على الرغم من أنّ إدارة التطبيقات العسكرية (DAM) تمتلك حواسيب قوية جداً فإنّ الاحتياجات التي ذكرناها تبرّر سياسة الحصول على آلات أحسن أداءً أيضاً والتي تجري على ثلاث مراحل متعاقبة، مترافقة مع تطورات النماذج. ويبيّن تحليل هذه الاحتياجات في الواقع ضرورة الوصول بحلول عام 2010 إلى قوة عدة مئات من التيرافلوب (تيرافلوب واحد يقابل مئة ألف مليار عملية في الثانية الواحدة)، بينما كانت القوة المتاحة في عام 1996، 50 جيغا فلوب (50 مليار عملية في الثانية). والحواسيب المسماة المتوازية بكثافة هي وحدها التي تزوّد بمثل هذه القوة علماً بأنّ الإدارة DAM كانت أحد الرواد الأوائل الذين استخدموها. فقد قامت شركة Compaq (HP) بتسليم أول حاسوب قوته 5 تيرافلوب في نهاية عام 2001، وستجري المرحلتان التاليتان في العامين 2005 و2010 .

ولتنفيذ التجارب بحد ذاتها تلعب منشأتان تتنافسان على إقرار الصلاحية بالتجزئة دوراً حاسماً في البرنامج هما: آلة

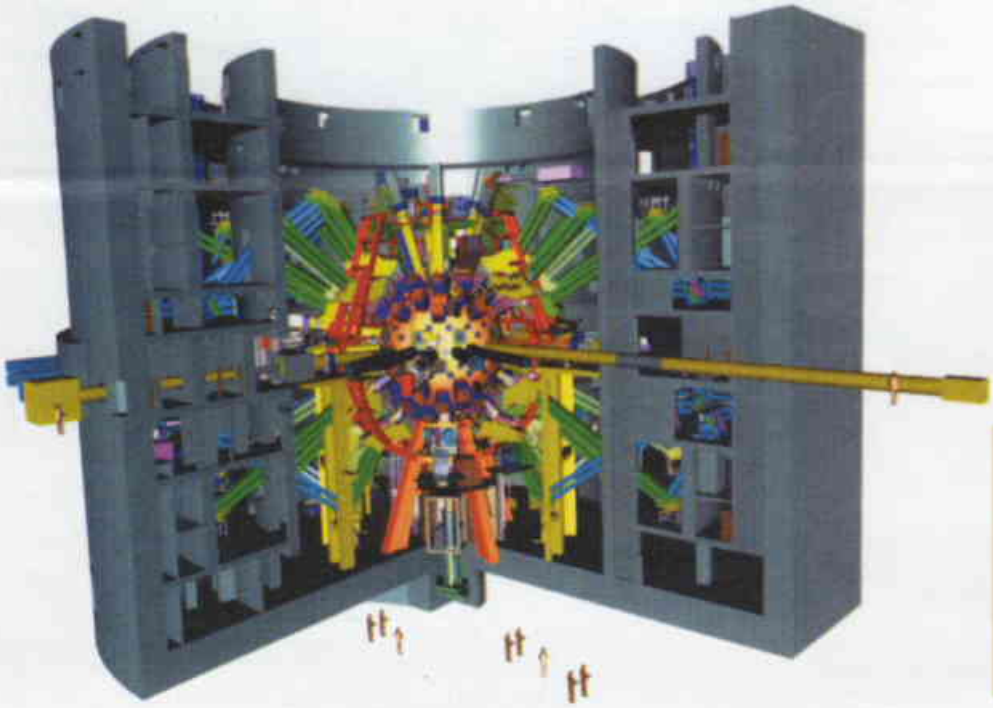


تجويف (طوله 2.7 مم) مخصّص لاستخدامه كدريئة لخط الدمج الليزري الذي تم تجريبه على منشأة أومغا في جامعة روتشيستر في إطار الاتفاق الفرنسي الأمريكي بشأن الاندماج بالحصر العطالي.

...وإقرار الصلاحية الشاملة بفضل التجارب الماضية

بعدما يتم إقرار صلاحية سلسلة الحساب بالتجزئة يجب إقرارها بإجمالها. ويمكن أن يتم ذلك بفضل إعادة تفسير التجارب النووية الماضية. إنّ هذه التجارب، وبصورة خاصة تجارب الحملة الأخيرة، تشكّل مرجعاً تجريبياً ضرورياً. ستستخدم بضع عشرات من التجارب من أصل 210 تجارب نفّذتها فرنسة لإقرار صلاحية جودة السلسلة الرقمية في النهاية.

وهكذا فقد بني البرنامج المحاكاة على ثلاثة محاور كبيرة: تحسين وصف عمل السلاح النووي، وزيادة قوة الحواسيب، وتطوير وسائل تجريبية جديدة أكثر دقة أو تتيح استكشاف مجالات لم



منظر مقطعي لبناء يؤوي حجرة تجارب الليزر ميغاجول المنتظر استخدامه في نهاية العقد في موقع سيستا بالقرب من بوردو . يبلغ طول مجموع المنشأة مع قاعتيها الليزريتين المقامتين في جانبي هذا البناء نحو 300 م.

التصوير الإشعاعي إيريكس Airix التي تهدف إلى إقرار صلاحية مرحلة العمل ما قبل النووية للشعيلة، والليزر ميغاجول (LMJ) الذي يهدف إلى دراسة مجال التشغيل النووي للسلاح.

الإيريكس، من أجل التصوير الإشعاعي للآلة النووية في بداية تشغيلها

كان الهدف من آلة الإيريكس، المقامة في مورونفيلييه Moronvilliers بمقاطعة المارن في فرنسة، القيام بالتصوير الآني لحالة المواد المكوّنة للشحنة النووية قبل تشغيلها النووي، فهي مهيأة لإقرار صلاحية البرمجيات التي تصف هذه المرحلة، قبل كل إطلاق للطاقة النووية بوساطة نماذج مصغّرة مصنّعة بمواد استبدال متميّزة بصفات حرارية وميكانيكية قريبة من صفات تلك المواد النووية المستخدمة في السلاح.

يرتكز مبدأ المنشأة على مسرّع ينتج حزمة من الإلكترونات بطاقة 20 مليون إلكترون فولط (MeV). وبإسقاطها على دريئة من معدن التنتال تولّد هذه الإلكترونات أشعة X. تخترق الأشعة المنتجة الجسم المطلوب تحليله حيث تتوهّن بالمواد المختلفة بحسب ثخانتها وكثافتها.

تُسجّل صورة الظاهرة بمكاشيف مثل آلات التصوير غاما الحساسة للأشعة X. تتوصّل آلة التصوير الإشعاعي إيريكس إلى ربح في الدقة بعامل 10 نسبة إلى مولّد ومضات X المتاح من قبل. يترافق مع الآلة تشخيص قياسات فائق السرعة (انظر التشخيص فائق السرعة، مفاتيح تجارب التفجير). تقدّم المنشأة لوحات تصوير تلتقط في زمن قدره 60 جزءاً من مليار جزء من الثانية يؤمّن لها وضوحها تُصوّر المواد المتحركة بسرعة 2000 إلى 3000 م/ثا، ولها موضعياً كثافات قدرها 60 (أعلى من الكثافات المصادفة في مركز الكرة الأرضية). وتصل الدقة المستحصل عليها إلى 0.5 مم. لقد تمّ التوصّل إلى كل الأداءات المطلوبة من الآلة المسلّمة في نهاية عام 1999. وقد أمكن التحقّق خاصة من أنّ جودة الصور التي تمّ الحصول عليها تتيح أن نميّز، من بين الكثير من المحاكيات الرقمية، أفضلها ملاءمة مع البارامترات المدروسة بالتجربة.

الليزر ميغاجول لدراسة مجال العمل النووي

إنّ الهدف من الليزر ميغاجول، الذي هو قيد البناء في "بارب" (منطقة الجيروند بفرنسة) في مركز الأكيتين للدراسات العلمية والتقنية (سيستا Cesta) بغية استخدامه في نهاية عام 2009، هو دراسة، في المختبر، للعمليات الفيزيائية التي تتدخّل في العمل النووي للسلاح. فقد حسبت أبعاد الأداة لكي تُؤدّي الطاقة الناجمة عن حزم الليزر إلى اندماج بضعة ملّيغرامات من مزيج من نظيري الهدروجين (الدوتريوم والتريتيوم). يتقارب مجموع الحزم على دريئة قطرها نحو ملّيمتر واحد مكونة من قوقعة تحوي وقوداً نووياً حرارياً، هو مزيج من الدوتريوم والتريتيوم (DT) (انظر الاندماج النووي الحراري بالحصر العطالي في المختبر). وُضع في الفصل الثاني من عام 2002 قيد الخدمة، وفي الموقع نفسه، نموذج أولي لمنشأة "LIL" (خط الدمج الليزري).

إقرار صلاحية نماذج وطرائق حساب

سيكون الليزر ميغاجول أداة فعالة في إقرار صلاحية نماذج وطرائق حساب المحاكاة. فهو سيسمح بصورة خاصة بتأييد بعض النماذج في أنظمة من درجات الحرارة والضغط تعذّر الوصول إليها حتى الآن في المختبر. وبفضل تجارب الاندماج سيساهم الليزر ميغاجول في إقرار الصلاحية الشاملة للمحاكيات. وبالإضافة إلى ذلك سيصبح ضرورياً في تقدير الكفاءة في المجال النووي الحراري للفيزيائيين الذين يعملون في الإسهام بضمان الأسلحة.

الكلّ متماسك

إنّ أدوات محاكاة الأسلحة النووية الموصوفة هنا تجمع بصورة متوافقة بين النمذجة والمحاكاة الرقمية والتجريب. ولما كان إقرارالصلاحية الشاملة للسلسلة الرقمية يجب أن توفّره لها إعادة تفسير التجارب المنفّذة سابقاً، فإنّ أدوات المحاكاة والتجارب النووية السابقة تستمر في تشكيل كلّ متماسك لا ينفصم. ستسمح منهجية المحاكاة هكذا بتأمين ضمان وثوقية وأمان الأسلحة النووية الواجب في النهاية أن تحل محل المكوّنات الحالية، من دون تجارب وخلال كل مدة حياتها.

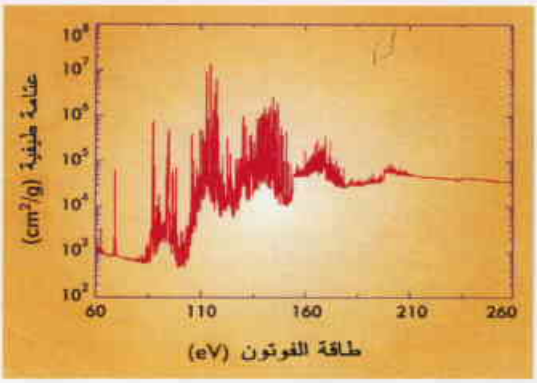
جرى تشغيل آلة التصوير الإشعاعي الوميضي إيريكس في مورونفيلييه بالقرب من ريمس في آذار عام 2001.

برنامج المحاكاة:

نمذجة فيزيائية: مثال العتامة

د. دانييل بوش وك. كلود غوييه
مديرية التطبيقات العسكرية في مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية
مركز دام-إيل دو فرانس

يُعدّ وسيط العتامة، الذي يُعبّر عن قدرة المادة على امتصاص الإشعاعات، أساسياً في برمجيات المحاكاة من أجل تطوير الأسلحة النووية. فهو يتعلّق، في الوقت نفسه، بمكان ووجهة وزمن وتواتر الإشعاع المتأثر مع المادة. فإذا كانت العتامة ضعيفة تكون المادة شفافة تقريباً (مثل حالة الماء من أجل الضوء المرئي) وتسمح بمرور الإشعاع. وإلا ستكون المادة عاتمة وتمنع مروره.



العتامة الطيفية للألمنيوم محسوبة عند التوازن التحريكي الحراري المحلي (ETL) عند درجة الحرارة 20 eV وكثافة 0.01 g/cm³ ويقابل مجال طاقة الفوتون المعتبر الامتصاص الضوئي بدءاً من الطبقتين الفرعيتين 2s و 2p.

يشكّل الضوء جزءاً من مجموعة الموجات الكهرطيسية. ولتفسير الظواهر الفيزيائية المتعلقة بانتشار الضوء وتأثره مع المادة، يلجأ الفيزيائيون بنفس الوقت إلى مفهوم الموجة التي تفسّر الظواهر الضوئية التقليدية، وإلى مفهوم الفوتونات (مقاربة جسيمية للضوء)، وهي حبّات حقيقية من الطاقة. أمّا المادة فهي مكوّنة من الذرّات وكل ذرّة مكوّنة من نواة تحيط بها سحابتها الإلكترونية حيث تدور الإلكترونات في مدارات محدّدة تماماً. إنّ انتقال إلكترون من مدار إلى آخر يقابل زيادة الطاقة الداخلية للذرّة أو نقصانها.

عندما يتأثر الضوء مع ذرّة يمكن أن تحصل بينهما تبادلات في الطاقة، تتبدّى بامتصاص أو بإصدار فوتونات من قبل إلكترونات الذرّة. ففي درجات الحرارة والكثافات المرتفعة جداً التي يتم التوصّل إليها في الأسلحة وفي الأهداف (الدرايا) الليزرية، يتأثر الإشعاع بشدة مع المادة، وهذه الأخيرة تمتص و تُصدر باستمرار فوتونات وتقوم بدور أساسي في نقل الطاقة. فامتصاص المادة للإشعاع هو إذن الذي يعرّف العتامة (الشكل).

فعند هذه الدرجات من الحرارة يتأيّن جزء كبير من الذرّات أي تنتزع منها إلكترونات فلا تعود تدور في مدار محدّد : وعند ذلك تكون المادة في حالة بلازما . إذا امتص إلكترون مرتبط بذرّة من هذه البلازما فوتوناً فإنّه إمّا أن ينتقل إلى حالة مرتبطة أخرى (مدار) وإمّا أن يُنتزع من الذرّة ويصبح عند ذلك إلكتروناً حراً. وإذا كان الإلكترون حراً أصلاً فإنّ سرعته ستزداد. فحساب العتامة يمرّ إذن بمعرفة الحالات الإلكترونية المختلفة، الحرة والمرتبطة، ولتجمّعاتها وتأثرها مع الفوتونات. فمن أجل الذرّات ذات العدد الكبير من الإلكترونات، يكون عدد الحالات الإلكترونية الواجب أخذها بالحسبان كبيراً جداً. ومن أجل العناصر الثقيلة، فإنّ الوصف الكامل يبقى بعيد المنال، ولكنّ وصفاً إجمالياً خشناً لا يأخذ بالحسبان العتامة بصورة صحيحة، ولذلك فمن الضروري إذن إجراء نمذجة فيزيائية مفصّلة للحصول على تمثيل دقيق لكنه مرن للحالات الإلكترونية.

لننظر مثلاً في مسألة الانتقالات بين المدارات. تعطي هذه الانتقالات خطوط امتصاص طيفية للفوتونات التي طاقتها قريبة من فرق الطاقة بين الحالات. ويتطلّب الحساب الدقيق لخطوط الامتصاص معرفة جيدة بطاقات حالات الانطلاق والوصول. ويتوقف عرض هذه الخطوط في الواقع على بيئة الذرّة المعتبرة وليس فقط على بنيتها؛ فهذه إذن مسألة معقّدة جداً.

تُجمّع النمذجات هذه على هيئة أشكال من الكودات الرقمية التي تحسب العتامة بدلالة تواتر الإشعاع. ويجري التأكّد من النتائج التي تمّ الحصول عليها بمقارنة نتائج الكودات التي تستعمل طرائق ونماذج مختلفة. ويجري إقرار صلاحيتها، عن طريق النماذج، بتفسير تجارب امتصاص الإشعاع ببلازما موصوفة بصورة جيدة في كثافتها ودرجة حرارتها.

وفي الختام، تُستخدم هذه النماذج في كودات محاكاة الأسلحة، حيث تتدخّل كوسطاء نماذج أكثر جهرية. وإن لدراسة عتامة العناصر الخفيفة أهميتها أيضاً في الفيزياء الفلكية مثلاً لاستعادة إشعاع النجوم.

البرنامج المحاكاة:

الاندماج النوويّ الحراريّ بالحَصْر العَطاليّ في المختبر

دانيال فاندرهايفن . سيلفي جاكومو . فيليب باكلي
مديرية التطبيقات العسكرية
مفوضية الطاقة الذرية • فرنسة.

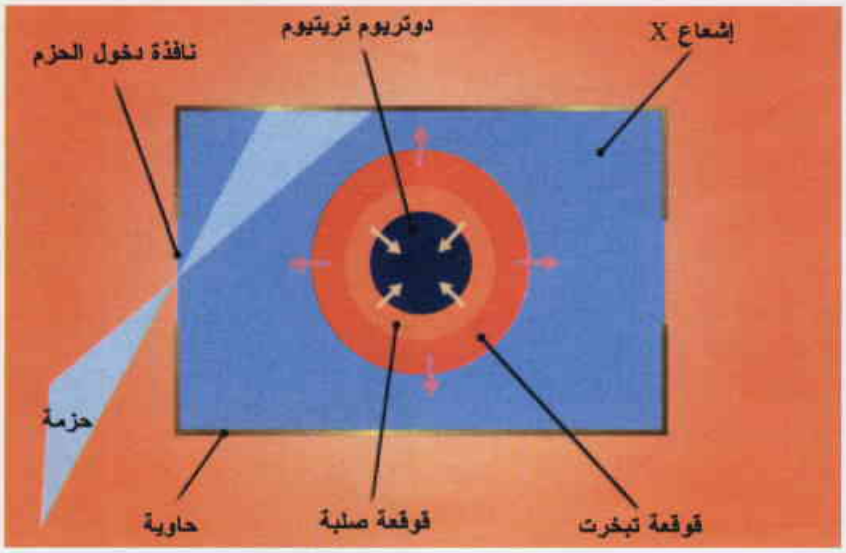
منظر لعدة أجهزة للتشخيص، تحيط بحجرة تجارب الليزر ميغا جول، حيث توجد في كرة مُكروية من المادة اللدنة عدّة مئات مكروغرام من الدوتريوم والتريتيوم التي نرغب في دراسة اندماجها. تدخل 240 حزمة ليزر، مُجَمّعة في رُباعيات، في الحُجَرة في مستوى العناصر المكعبة باللون البنفسجي.

إن الأسلحة النوويّة الحديثة هي من نوع النوويّة الحراريّة. ولكي يتولّد تفاعل نوويّ حراريّ ينبغي أن نُقَرِّب كفايةً نواتين اثنتين، أي أن نتغلب على كمون تنافرهما، حتّى تندمجا في نواة أثقل، والتفاعل بالإضافة إلى ذلك ناشر للحرارة. إنّ التفاعل الأسهل توليداً هو تفاعل نَظيرَي الهدروجين، الدوتريوم والتريتيوم، اللذين يندمجان فيُعطيان جُسيم ألفا (نترونان وبروتونان، أيّ نواة الهليوم) ونتروناً ذا طاقة عالية جداً. وهو الذي سيتحقق بالليزر ميغا جول (LMJ). ما هو مَبْدأ الليزر ميغا جول؟ هو أن تُرفَع في المختبر، بفعل الطاقة التي تحملها حزم من ليْزَر، درجة حرارة عدّة مئات المكرو غرام من مزيج الدوتريوم ـ التريتيوم (DT)، التي كثافتها تعادل ألف مرّة كثافة الجسم الصلب، إلى أكثر من 50 مليون درجة، وهذا في أثناء زمن قصير جدّاً. وهذا هو الاندماج بالحصرْ العَطالي (FCI).

توضع كُرَة مكْرَويّة مَلْيئة بمزيج من الدوتريوم ـ التريتيوم في مركز جَوْف أسطَوانيّ من الذهب بثخَن عدّة عشرات المكرومتر، يحوي الهليوم، تدخل فيه حزم الليزر عبر نافذتين تقعان عند طرَفَيْ الأسطوانة (الشكل 1). يمتص الذهب ضوء الليزر فوق البنفسجي ويحوّله إلى إشعاع X. يسلك الجوف سلوك فرن، فيتجانس هذا الإشعاع شيئاً فشيئاً. ويُحدث تسخين قوقعة الكرة المكرويّة تبخيراً عنيفاً للجزء الخارجي منها "بمفعول الصاروخ"، ويأخذ الباقي في حركة جابذة، تولّد الانبجار implosion* المطلوب للقوقعة وللمزيج DT الذي تحويه في آن معاً. وعندما يصبح انضغاط المزيج DT وتسخينه كافيين، تتحقق تفاعلات الاندماج الأولى في "نقطة ساخنة" مركزية. وانطلاقاً منها، تحدث هذه التفاعلات تدريجيّاً في الوقود كلّه قبل اندماج المجموع.

إنّ ضبط نقطة صدم حزم الليزر داخل الجوف، وكذلك ضبط نبضة الليزر، يسمحان بضمانٍ تناظر إضاءة أشعة X للكبسولة، ممّا يجعل الانبجار كُرويا ويعلم في الواقع، كلّ من حاول أن يضغط كرة ممْرغية بيَدَيْه، أنّه ينبغي، فعل ذلك بأكثر الأساليب تجانساً. فإن لم تُعانِ منطقة من الكرة ضغطاً، فالغاز فيها سيعمل على تشويهها ويُولّد فيها تؤلولاً يحدث الأمر عينه هُنا. إنّ اختيار الإشعاع X كشعاع نقل طاقة حزم

* الانبجار Implosion : انفجار نحو الداخل.



الشكل 1- مبدأ تجربة اندماج بـ LM. تدخل حزم الليزر عبر نافذتين على طرفي الجوف فتولّد، بصورة غير مباشرة عبر الإشعاع X الذي يُبجر الكرة المكروية التي تحتوي على DT، شروطَ اندماج الدوتريوم والتريتيوم المحتويين في الكرة المكروية المصنوعة من مادة لدنة والموضوعة في مركز الجوف.

الليزر إلى الكرة المكرويّة يأتي من قُدرته على تجانسه بسرعة. وحقيقة وضع الهليوم (أو الهدروجين) في جوف من الذهب يسمح بتقليل تمدد الذهب الذي تُسخّنه الحزم، فيمكنها هكذا أن تدخل في الجوف مُدّة أطول. ومع ذلك فثمّة خطران كبيران يُمكنهما أن يُعاكسا هذا السيناريو. الأوّل هو أن ترى تآثر حزم الليزر مع هذا الغاز، وكذلك مع بلازما الذهب المستأصل*، يُطلق حالات عدم استقرار تضرُّ في عملية الحصول على حرارة مشعّة قويّة وبتناظر جيّد. فيمكنها في الواقع أن تؤدي إلى انتثار راجع خارج الجوف لجزء من طاقة الليزر، أو إلى انخفاض تجانس الحزمة نفسها انخفاضاً شديداً. وأما الخطر الثاني فهو مرتبط بعدم استقرار بعض أطوار الانبجار، بمعنى أنّ مناطق من مائع "ثقيل" تجد نفسها مدفوعة ضدّ مناطق من مائع "خفيف". والمثال النوعيّ لهذه العمليّة الفيزيائيّة هو مثال علبة تحوي مائعاً ثقيلاً يطفو على مائع خفيف يكفي أن يُصيب أقلّ اضطراب السطح البَيْنيّ بين المائعين حتى يهبط المائع الثقيل إلى قعر العلبة. ففي الحالة الراهنة المعنية، يمكن للعيوب العائدة إلى خُشونة القوقعة أن تزداد بصورة أسيّة. "فحالات عدم الاستقرار الهدروديناميّ" هذه قادرة على أن تؤدّي إلى تصدّع القوقعة ومنع ظهور نقطة الإيقاد الساخنة. وهكذا يجد المرء نفسه في مجابهة مسألة الأَمْثَلة التي تربط الليزر ذاته والهدف. وللمحافظة على قوقعة الكرة المكرويّة سليمة يكفي جعلها أكثر ثخانة، لكن ينبغي عندئذ استخدام ليزر باستطاعة أكبر وهو مكلف جداً. من الممكن إنقاص ثخن القوقعة، لكن ثمّة خطر عندئذ في أن تُثْقَب أثناء الانبجار، وألاّ يُدرَك الاحتراق النووي الحراري. ثمّة أسلوب أمْثَل، يتعلّق بوسطاء عديدة. فإن حُدّدت طاقة الليزر مرّة، يبقى أن يُدقّق في تصميم الأهداف (الشكل 2). فنوعيتها، لبلوغ احتراق مُغذّى لـ DT، تتوقّف في الواقع على أنها تحوي DT صلباً. بكل بساطة لأنّه كُلّما كانت كثافة DT الابتدائية مرتفعة، قلّ العمل الذي ينبغي صرفه للوصول إلى الكثافات المطلوبة. أمّا DT الغازي فينبغي أن يُضغَط بعامل عشرة ملايين عوضاً عن 1000 المطلوبة في حالة DT الصلب. فالكُرَة المُفرّغة المصنوعة من البلاستيك والموضوعة في مركز جوف التحويل، ينبغي أن تحوي طبقة من DT الصلب بثخانة 180 مكرون كاملة التجانس تقريباً وبخشونة أقلّ من المكرون. ولأجل

مثال على هدف صُمّم لتجربة الليزر ميغا جول. يتأمن التبريد اللازم للكرة المكروية، المكوّنة من قوقعة لدنة ودوتريوم - تريتيوم داخل الجوف الأسطواني من الذهب، بجريان مائع مُبَرِّد.

* الاستئصال: تحوّل تدريجي وسطحي للمادة بالتحلّل أو الانصهار أو التآكل أو التصعيد أو التبخر تحت تأثير إيداع طاقة.

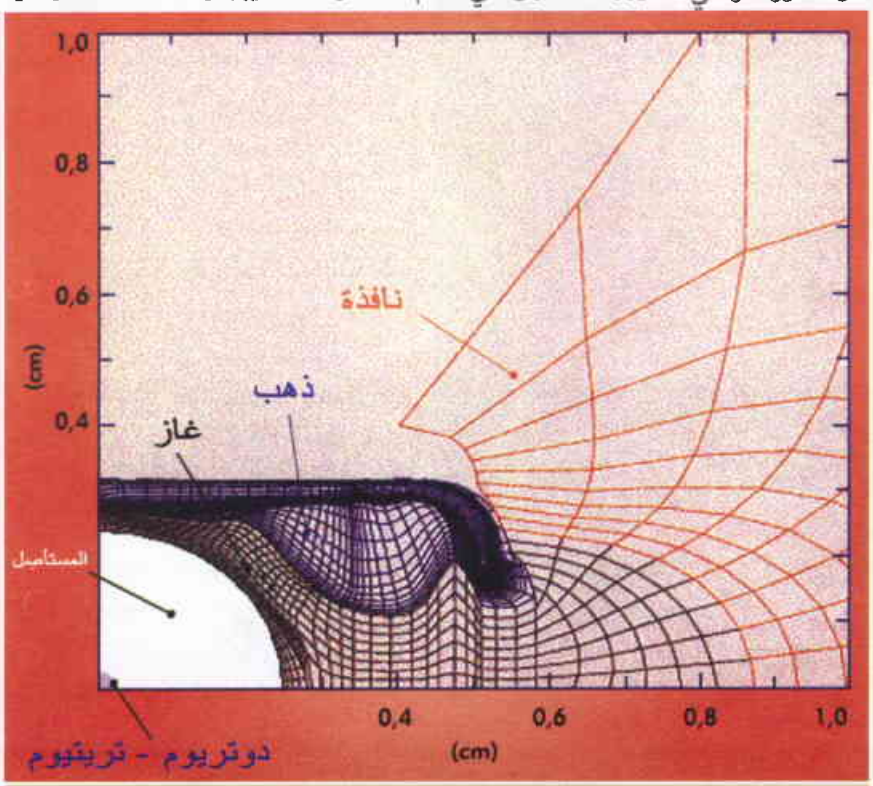
منظر لجزء من 240 حزمة ليزر (باللون الأزرق والأخضر والرمادي) في الليزر ميغا جول الذي سيبدأ العمل نهايات 2009 على موقع سيستا، قرب بوردو. تتجمع الحزم باتجاه مركز حجرة التجارب (غير ظاهرة).

ذلك من الضروري تبريد الهدف إلى درجات من الحرارة أقل من 20 كلفن (تقريباً 250°C-) وتأمين تساوٍ تام في درجة الحرارة حول الكرة المكرويّة بتقريبٍ عدّة عشرات الأجزاء من مليون جزء من الكلفن. إنّ وسطاء أمثلة المنظومة ليزر + هدف هي (على سبيل المثال) زوايا الورود وعدد حزم الليزرات، وحجم الأجواف وشكلها، وأبعاد القواقع وبُنيتها، وكتلة الوقود، والتطور الزمني لنبضة الليزر...

هناك مقاربة إجمالية تقوم على نماذج بسيطة أحكمت لتأخذ بالحسبان مختلف القيود: تجاوز عتبة الاشتعال، تناظر الإضاءة وعدم الاستقرار تقود المقاربة إلى إنشاء قطاع عمل لليزر (طاقة واستطاعة) حول نقطة اسميّة. وينجم عن ذلك أنّه لاغنَى عن ضبط المميِّزات الهندسيّة لثخانة وخَشونة الكرة المكرويّة وطبقة جليد الدوتريوم والتريتيوم بدقّة كبيرة جداً (أخطاء التراكزية والكروية أقل من جزء واحد من عشرة آلاف جزء). وبعد أن يُحصل على الكرة المكرويّة كما ينبغي أن تكون، من الضروري أن تُملأ DT تحت ضغط قدره 500 ا ضغطاً جويّاً في درجة حرارة الوسط المحيط.

إنّ الأدوات الضروريّة لهذه الأمْثلة هي كودات محاكاة رقمية. إنها تأخذ بالحسبان مجموع العمليات الفيزيائية التي تجري عند انبجار الهدف بالليزر: مثل انتشار حزم الليزر وامتصاصها، تأيّن المادّة المُشعّعة وسلوكها، التطوّر الهدروديناميي للبلازما المتولدة كما هي، نقل الإشعاع X، النقل الحراري، احتراق ونقل الجسيمات المتولّدة بالتفاعلات الجارية. تسمح هذه الكودات بتقييم "صلابة" نقطة التشغيل إزاء الريب المحتمل المرتبط بالليزر (التسديد، التوازن، تزامن الحزم) أو المرتبط بالهدف (أبعاد الجوف والكبسولة، التمركز...) وهذا ما يُساهم في تحديد مواصفات المجموع بدقة. إن الترابطات بين مختلف الارتيابات، تُؤخذ بالحسبان بطرائق إحصائية تسمح بإجراء التخصيصات بين مختلف الأخطار.

وكُلُّ طور من أطوار حياة هدف (دريئة) كان، أو يمكن أن يكون موضوع تجارب نوعية للإقرار بصلاحه بالتجزئة على ليزرات أخرى في سلم مُصغّر مثل فيبوس Phebus، مفوضيّة



الشكل 2- مختلف مكوّنات هدف اندماج بالحصر العطالي لحظة الاشتعال. يقع المزيج دوتريوم - تريتيوم في الأسفل إلى اليسار.

الطاقة الذريّة، نوفا Nova (مختبر لورنس الوطني بليفرمور في الولايات المتحدة) أوميغا Omega (جامعة روشيستر في الولايات المتحدة) ولولي Luli (مدرسة البوليتكنيك) وبعدئذ على خط اندماج الليزر (LIL) مفوضية الطاقة الذريّة الفرنسية، وهو نموذج أولي من رباعي الحزم من LMJ. وأيضاً، هناك تجارب في تشعيع الكرات المكرويّة بأشعة X على الخشونة المفروضة اختيارياً تسمح بدراسة مفعول حالات عدم الاستقرار الهدروديناميي. إن تصويب التشخيص التجريبي بالكود يُعدُّ إقراراً بصلاح دينامية السوائل (الهدروديناميي) وأيضاً بصلاح المعطيات الأساسية المستعملة (معادلة الحالة، وعتامة المواد التي وُضعت في حالة حركة).

وحالياً، لايمكن أن تُؤخذ بالحسبان معاً المظاهر المهمّة كُلّها. وهذا هو، بصورة خاصة حال نوعَي عدم الاستقرار الحرجين: الوسيطي والهدروديناميي، اللذين يستلزمان معالجات مكانية ـ زمنية مختلفة. إنّ التمكّن من حالات عدم الاستقرار الهدروديناميي، مثلاً يتطلّب توصيفاً دقيقاً جداً لحركات المادة. فتقييم جيد لاتساع العيوب على حدود النقطة الساخنة الناتجة من نواقص في الهدف يفترض نمذجة ثلاثية الأبعاد لدينامية السوائل. تجري الآن كتابة هذا الكود في DAM.

إن حركات الذهاب والإياب هذه الدائمة بين البعدية الإجمالية وتجارب التثبّت من الصحة بالتجزئة أصبحت ممكنة باعتماد نماذج عدديّة فيزيائية متطورة أكثر فأكثر، والتي تُستمثر بفضل الوسائل المعلوماتية القوية أكثر فأكثر. إنّها تُؤدي إلى تطوير تدريجي للمجموع هدف ـ ليزر وستسمح هكذا بالوصول إلى الاندماج بالحصر العطالي في المختبر.

البرنامج المحاكاة:

التشخيص الفائق السرعة، أسس تجارب علم التفجير

ج . ب ليرا - ك كليمان
مديرية التطبيقات العسكرية
مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية – مركز DAM – إيل دوفرانس

القسم المسرع من الآلة إريكس للتصوير الإشعاعي المقامة في موروانفيليه (مارن)، 64 خلية مسرعة لحزمة الالكترونات (في الأعلى) و 32 مولد توتر عالٍ تسمح بتفريغ الطاقة الكهربائية المسرعة (في الأسفل).

إنها ملاءمة النماذج الفيزيائية المستعملة التي، تكسب كود المحاكاة الرقمية قيمته. ولا يمكن الاستغناء عن التجربة لإقرار صلاحية هذه النماذج " بالقدر الحقيقي" وتشذيبها لكي تفيد من التقدم الحاصل في الحاسبات.

وعندما يتعلق الأمر بالتفجير، وهو علم يبحث في عمل المتفجّر وسلوك المادة التي تخضع لتفجيره، علينا أن ندرس معاً إطلاق سرعة المادّة وحركتها وهندسيتها (أشكالها وأكِفتها

الشكل 1 - دراسة مميزات " إعطاء السرعة " للمادّة المتحركة (بناء يفجّر) تتمّ بطريقتين: بقياس زمن الصدام، بمجموعة لواقط تدعى " قنفذ " (إلى اليسار) أو بقياس السرعة بمفعول دوبلر (إلى اليمين)

وكثافتها). إن مراتب مقادير الظواهر في هذا المجال قليلة الشيوع في الفيزياء التجريبية التقليديّة. إنّها في الوقت نفسه قصيرة الأمد (الميز اللازم هو عدة أجزاء من مليار جزء من الثانية) وشديدة (ضغوط عدة مئات الآلاف من البار، وسرعات تقاس بـ كم في الثانية)، يتطلب هذا الأمر استعمال تشخيصات نوعية تلائم مراتب المقادير هذه.

دراسة المادّة أثناء الحركة

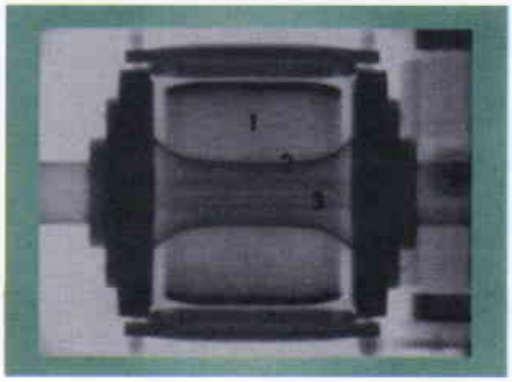
تستعمل طريقتان لدراسة المادّة أثناء حركتها: قياس الزمن وقياس السرعة (الشكل1). لنأخذ حالة أسطوانة معدنيّة رقيقة تنفجر نحو الداخل (تنبَجر) تدريجياً تحت دفع متفجّر محصور (لتحاشي امتداده في الهواء، وبالتالي المحافظة على ضغط فعّال على الأسطوانة) يُقدح على محيطها. فلقياس الزمن، ثمّة لواقط داخل الأسطوانة يصل عددها حتّى 500 لاقط بليف ضوئي على حامل (" قنفذ ")، ترسل إشارة ضوئية عند تماس المادة واللواقط (الشكل 2). وهذه اللواقط رفيعة بما فيه الكفاية (بقطر عدّة أعشار المليمتر)، ولينة وخفيفة حتى لا يضطرب الجريان بشكل محسوس. تسجّل الإشارات الضوئية كاميرا إلكترونية فائقة السّرعة، فتسمح بالحصول على لحظات مرور المادة في مختلف المواضع بدقة تبلغ عدة أعشار من النانو ثانية (أجزاء من مليار جزء من الثانية).

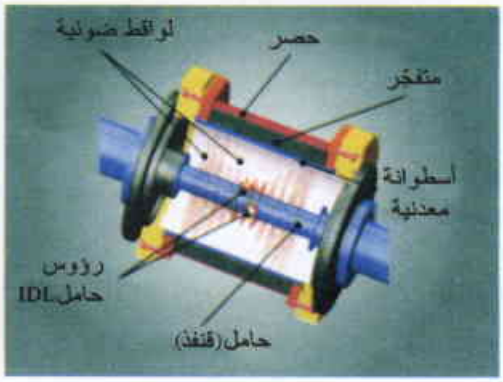
يتمّ قياس السّرعة بمقياسّية تداخل دوبلر - ليزر (IDL)، التي يقوم مبدؤها على مفعول دوبلر: فعندما يضاء سطح متحرك بليزر، يتغير طول موجة الضوء المنعكس تبعاً لسرعته. وهذا المبدأ هو مبدأ رادارات الطرق في مراقبة السرعة. ففي تقنية مقياسية تداخل دوبلر - ليزر، تولّد الحزمة المنعكسة في مقياس تداخل فابري- بيرو أشكال تداخل (حلقات متمركزة)، تغيرات أقطارها مرتبطة مباشرة بسرعة السطح المتحرك. وهكذا يمكن تحديد تطوّر هذه السّرعة بدّقة تبلغ الواحد في المئة.

يمكن أن تستعمل مقياسّية تداخل دوبلر - ليزر بالاشتراك مع مقياس الزمن بأن تدمج على الـ" قنفذ " بالإضافة إلى اللواقط الضوئية، رؤوس من مقياسّية تداخل دوبلر - ليزر (IDL) تصل حتّى عشرة "رؤوس".

تصوير المادّة

إن التصوير الإشعاعي وسيلة تقليديّة لمشاهدة المادّة في العمق. فالشروط الخاصّة بالتفجير تفرض قيوداً على منبع الإشعاع، فلمّا كانت المادّة تتحرّك بسرعة كبيرة، فإن زمن التعرض سيكون قصيراً جداً للتقليل من ضبابيّة التحرك في الصورة (مدة ومضة التصوير: عدّة عشرات من النانو ثانية). ولمراعاة هذه المدة القصيرة جداً للإضاءة، ينبغي أن تكون الجرعة (كمية الفوتونات التي يتلقاها الجسم) مهمّة؛ وإذا كان





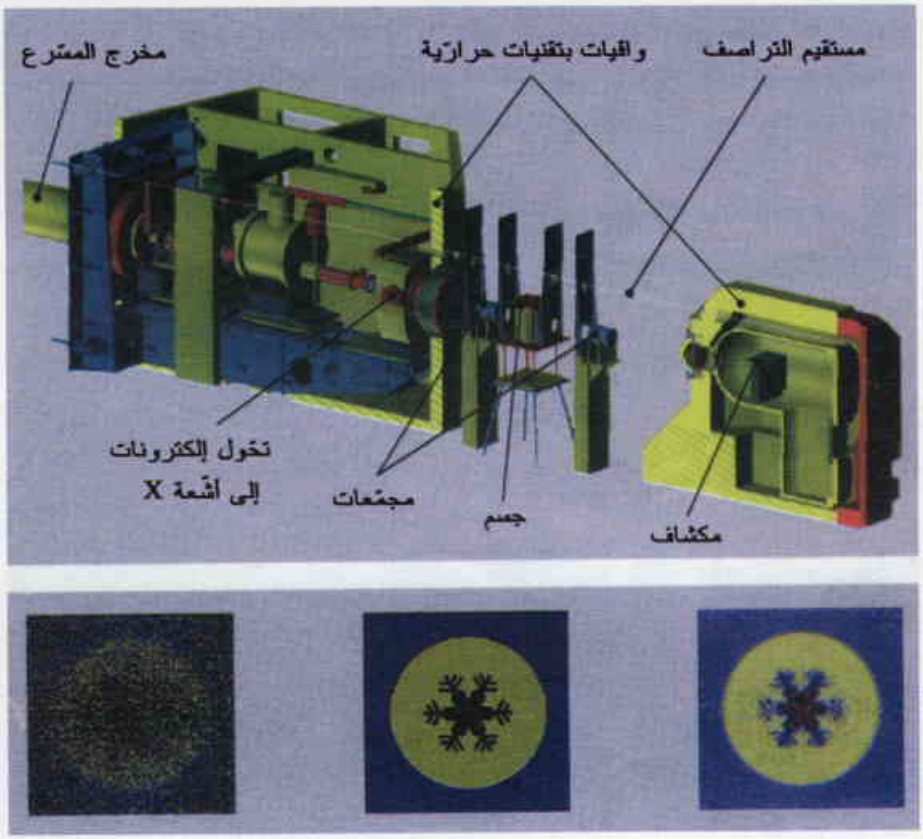
الشكل 2 - (مخطط زرع لواقط في أسطوانة لدراسة الانبجار (الانضغار نحو الداخل). يسمح تصوير الأسطوانة إشعاعياً أثناء التجربة (إلى اليسار) بتمييز نواتج التفجير (1)، تأثير مفاعيل الحافة (2) وأيضاً يسمح برؤية (3) حامل مقاييس الزمن (الذي يحدد زمن صدام المادة على أحد اللواقط) والسرعة (الذي يسمح بتحديد لحظة إعطاء السرّعة للمادة)

المقصود مشاهدة ما في داخل جسم كثيف، ينبغي أن تكون أشعة X نافذة، أي طاقتها عالية.

وأخيراً، ينبغي أن يكون منبع أشعة X نقطياً قدر الإمكان لتحسين ميز الصورة.

فانطلاقاً من هذه القيود الأربعة تمّ تحديد صفات المسرع إريكس Airix و حساب أبعاده. وإن استعمال مكاشيف ذات حساسية كبيرة سمح بتحسين جودة الصور أيضاً. ولكي تبدو الصورة أنقى مايمكن، ينبغي أن توضع مجموعة التصوير الإشعاعي (الشكل 3) في أمثل وضع بالنسبة إلى الجسم ولحظة المشاهدة المختارة. وهذه المجموعة تصبح محدّدة تماماً منذ أن يتمّ تحديد المسافات بين العناصر التي تكوّنها وطبيعتها (مميّزات المنبع X، واختيار المكاشيف، والمواد وهندسة المجمّع والواقيات). ويجري هذا بالحساب، آخذين بالحسبان حدود منظومة الالتقاط. وهكذا يمكن مشاهدة تفاصيل مليمترية.

إن مجموع النتائج الحاصلة، بعد استثمارها عن طريق برمجيات التفحص والمراجعة، يسمح بإقرار صلاحية النماذج التي أحكمها النظريون.



الشكل 3: جهاز تجريبي لآلة التصوير الإشعاعي الوميضي إريكس. إنّ ومضة أشعة X(60 ns) المصدرة بعد تحول الإلكترونات المسرّعة (إلى اليسار) تسمح بأخذ، بمساعدة مكشاف (إلى اليمين)، صورة للجسم المصنوع من معدن ثقيل في حالة الانبجار (في المركز). تسمح الصورة (في الأسفل) بإعادة بناء الجسم رياضياً. وبقعة بؤرية (محرقية) قطرها من 1 مليمتر إلى 2 مليمتر، يستطيع إريكس أن يميز تفاصيل (محاكة بالحساب في المركز) غير مرئية بالآلة المستعملة سابقاً (بقعة بؤرية بقطر 16 مليمتر)

الوقود النوويّ: نمذجة تجميع متطوّر للبلوتونيوم

ر. لونان
مديرية الطاقة النووية - مفوضية الطاقة الذرية - مركز ساكلي

ملخص

إن فائدة النمذجة في المجال النووي تتوضح على الوجه الأكمل بمثال الدراسة الذي يتناول تجميعاً جديداً للوقود بالبلوتونيوم، (APA)، قادراً على تأمين استهلاك أعظمي من هذا الأخير في مفاعلات الماء المضغوط. وتتيح النمذجة، إضافة إلى المفهوم الفيزيائي للتجميع وإدماجه في المفاعل، إقامة تدفق كامل للمادة كما، وتساعد على نمذجة إنتاج مجمّع توليد الكهرباء من الطاقة النووية بإجماله.

الكلمات المفتاحية: بلوتونيوم، يورانيوم، إعادة تدوير، وقود نووي، برمجيات .

السيطرة على مخزون البلوتونيوم وإنقاص النفايات

في إطار محاور البحث المحددة بقانون 1991 حول النفايات المشعّة، قاد التفكير في سيناريوهات دورة الوقود إلى البدء بدراسة استعمال مجمّع مفاعلات الماء لاستمثال إعادة تدوير البلوتونيوم[1]، بهدف السيطرة على المخزون وإنقاص النفايات (المؤطر 1). تجري هذه الدراسات التطلعية بالاستناد أولاً إلى تحليل معمق للخواص الفيزيائية للبلوتونيوم وإلى إقامة قيود ووسطاء حرة تساعد على التوجه التقني.

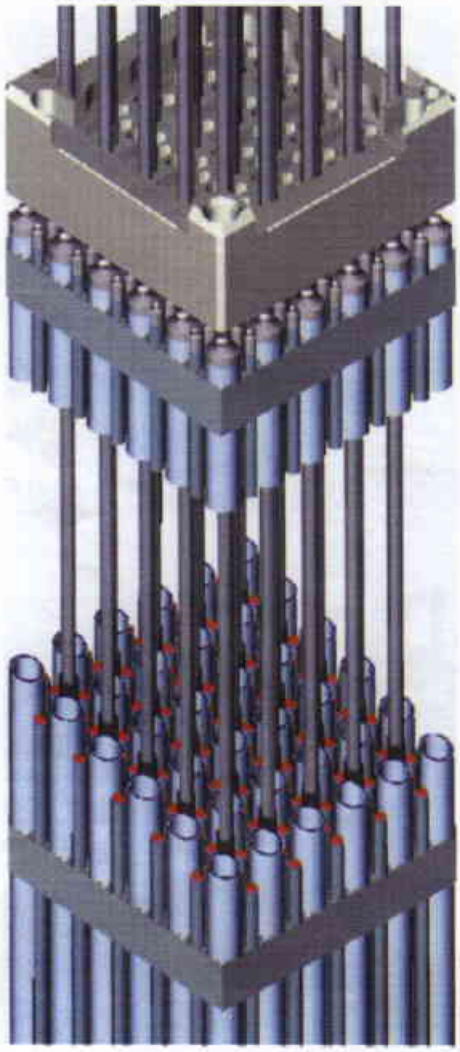
ويتم البحث عن تصاميم تجميع تكون ملائمة لأبعاد المنظومات الداخلية للأحواض بحيث لا تدعو الحاجة فيما بعد إلى إعادة تطوير سلسلة نوعية من المراحل. وينبغي أن تأخذ الحلول بالحسبان أيضاً جوانب التنافسية الاقتصادية.

إنّما المقصود فعلاً "بكل بساطة" تصميم عنصر وقود جديد (خاصة تحديد الركازة التي تحمل النوى الشطورة وكذلك تحديد هندستها) يكون أكثر ما يمكن مواءمة للمفاعلات الحالية. ثمّة حلّ يمكن التفكير فيه، هو التجميع APA، التجميع المتطور للبلوتونيوم. ويقوم على ضم أقلام من أكسيد اليورانيوم مع أقلام "كلها بلوتونيوم" في بنية هندسية تزيد مقطع عبور الماء وتؤمن إبطاءً زائداً للنترونات (الشكل 1).

نمذجة مجموعة كاملة تماماً

المراد هنا نمذجة مجموعة كاملة تماماً، بدءاً بالتأثرات بين النترونات والوقود، في تراكيب مختلفة جداً عن تلك

(1) حول هذا الموضوع، راجع العدد 46 من مجلة Clefs CEA.



الشكل 1- إن التجميع المتطور للبلوتونيوم APA، في صيغته APA-a، يحوي أقلاماً كلها من البلوتونيوم وحلقية (ذات المقطع الأزرق) موزعة بين أقلام من أكسيد اليورانيوم الاعتيادية (ذات المقطع الأحمر). أما في الصيغة APA-c، فإن أقلام البلوتونيوم متصالبة الشكل.

المؤطر 1

مبادئ إعادة تدوير البلوتونيوم

إنّ استعمالاً ناجعاً للبلوتونيوم في المفاعلات بالماء يتطلب تعدد إعادة تدوير البلوتونيوم[1]. وبعد كل مرور للوقود في المفاعل، تعاد معالجته، ويعاد حقن البلوتونيوم في عملية صنع عناصر الوقود وبعد ذلك يُشحن ثانية في المفاعل. ويحافظ على الخواص النترونية للتجميعة بفضل أقلام وقود تقليدية مغنية باليورانيوم 235.

ويحصل جرد البلوتونيوم الكلي في لحظة مفروضة من مجموعة مساهمات مركبات وقود المجمع: إنه يتألف من خليط من البلوتونيوم المتحدر من استعمال التجميعات باكسيد اليورانيوم (UOX) وتلك المرتبطة بإعادة التدوير (الشكل 1). إن البلوتونيوم المستعمل في عملية تعدد إعادة التدوير في المفاعلات بالماء يتوازن بتعويض فقدان جودة الحامل النظيري للبلوتونيوم بزيادة إغناء اليورانيوم (ومثال ذلك على حالة تجميع متطور للبلوتونيوم (APA)، هو أن الإغناء باليورانيوم 235 ينتقل من حوالي 2% بإعادة التدوير الأولى إلى 4% بالدورة الرابعة، التي هي قيمة قريبة من الخط المقارب)، وهذا ما يسمح بالاحتفاظ بقدر احتياطي من الطاقة كاف لإعادة شحن المفاعل، والاحتفاظ في الوقت نفسه بوسطاء أمان مُرضية.

التي يلقاها حالياً في المفاعلات المستخدمة، ثم بالمفاعل إجمالاً، للتأكد من إمكانية عملها (المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية؟). وأخيراً، بغية تحديد سيناريو لاستخدام البلوتونيوم أمثل استخدام، يجب نمذجة تدفقات المواد من مجمّع المفاعلات، ومن وحدات الإنتاج والمعالجة وكذلك نمذجة تطور النفايات المنتجة. يسمح هذا المسعى بقياس الأداءات التي تمّ بلوغها فعلاً، وتقييم أهمية برامج البحث المطلوب إجراؤه.

إن علم فيزياء المفاعلات النووية هو التخصص الأساسي في لبّ هذه النمذجة. وهو يشمل علمي النترونيات وترموديناميك السوائل، فيسمح بتوضيح احتماليات الحلول. وجزء من المعرفة في هذه المجالات مستدام في منظومات من كودات الحساب الهادفة إلى نمذجة مختلف الظواهر الفيزيائية المتدخلة. (المؤطر E، أوجه التقدّم في هندسة البرمجيات).

المعطيات والمعادلات الأساسية

إن تحقيق هذه الكودات يستند إلى أسس من البيانات تضم البيانات النووية الأساسية، وهي معلومات خاصة بكل تآثر بين النترونات والنوى. وتنتج هذه الكمية الضخمة من المعارف من قياسات أجريت في منشآت تجريبية مُكرّسة (المؤطر D، تجارب تحليلية وتجارب شمولية). وهذا العمل، الذي يجري منذ مدة بعيدة في إطار التعاون الدولي، يبقى دوماً من أحداث الساعة، وخاصة عند تلبية الحاجات التي تبرز من الدراسات الخاصة بما بعد دورة الوقود[2].

هناك أداة أخرى أساسية، هي معادلات موازنة النترونات. وتستند نمذجة العمليات التي تجري في المفاعلات إلى معادلة بولتزمان، التي تصف بأمانة الموازنة النترونية، كما تستند إلى معادلة باتمان التي تصف التطور النظيري للأوساط المشعة بفعل تدفق النترونات. ثمة عدة مئات من النظائر المعنية ممثلة في الحسابات: سلاسل النوى الثقيلة وسلاسل نواتج انشطار الوقود، وبدون أن ننسى المائع المبرِّد (المائع الحامل للحرارة)، ومواد البناء والتحكّم.

مخطط بعدة مراحل

لا تمتلك الحواسيب في الوقت الحاضر، القدرة الكافية لحساب مُميّزات المفاعلات حساباً مباشراً. إنّ حل معادلات الموازنة في كودات النترونيات يستدعي عمليات تبسيط تستند إلى فرضيات فك الترابط. ففي مختلف تشكيلات التشغيل، تُحلّ معادلة بولتزمان بدقة كبيرة جداً على نموذج صغير القدّ يُمثّل تآثر نترون – وقود[3] – بُني. وهكذا تتكوّن السوية الأولى من النمذجة من شبكة لانهائية من التجميعات، إنّها السويّة التي تقيّم فيها قبل كل شيء كمونات (احتماليات) الحل المطلوب (الشكل 2). ويُعالَج تطور الوقود بدقة آخذين بالحسبان كل التفاعلات النووية في تمثيل هندسي مفصّل جداً. ويستخدم لهذا الطور الكود "أبولو" لنترونيات القلب. ويتيح الحل الناتج، بعملية اختصار للبيانات (عملية مجانسة وتركيز في الطاقة)، التزوّد بمميّزات وسطى للتجميعات بغية الحصول على تمثيل سلوك المفاعل كله. ولمّا كانت مميّزات المفاعل تتعلق بشروط التشغيل، فمن الضروري إدخال في مستوى حساب القلب لعملية تكرارية بين علم النترونيات وترموديناميك السوائل[4]. بهذه الطريقة، ثمّة خوارزميات ملائمة تسمح بمحاكاة سلوك المفاعل في التشكيلات الطارئة. إن دراسات القلوب تتطلب ترابط علمي النترونيات وترموديناميك السوائل، ويتم إجراؤها بالكودين كرونوس Qronos وفليكا Flica.

(2) (3) (4) حول هذه الموضوعات، راجع العدد 45 من مجلة Clefs CEA.

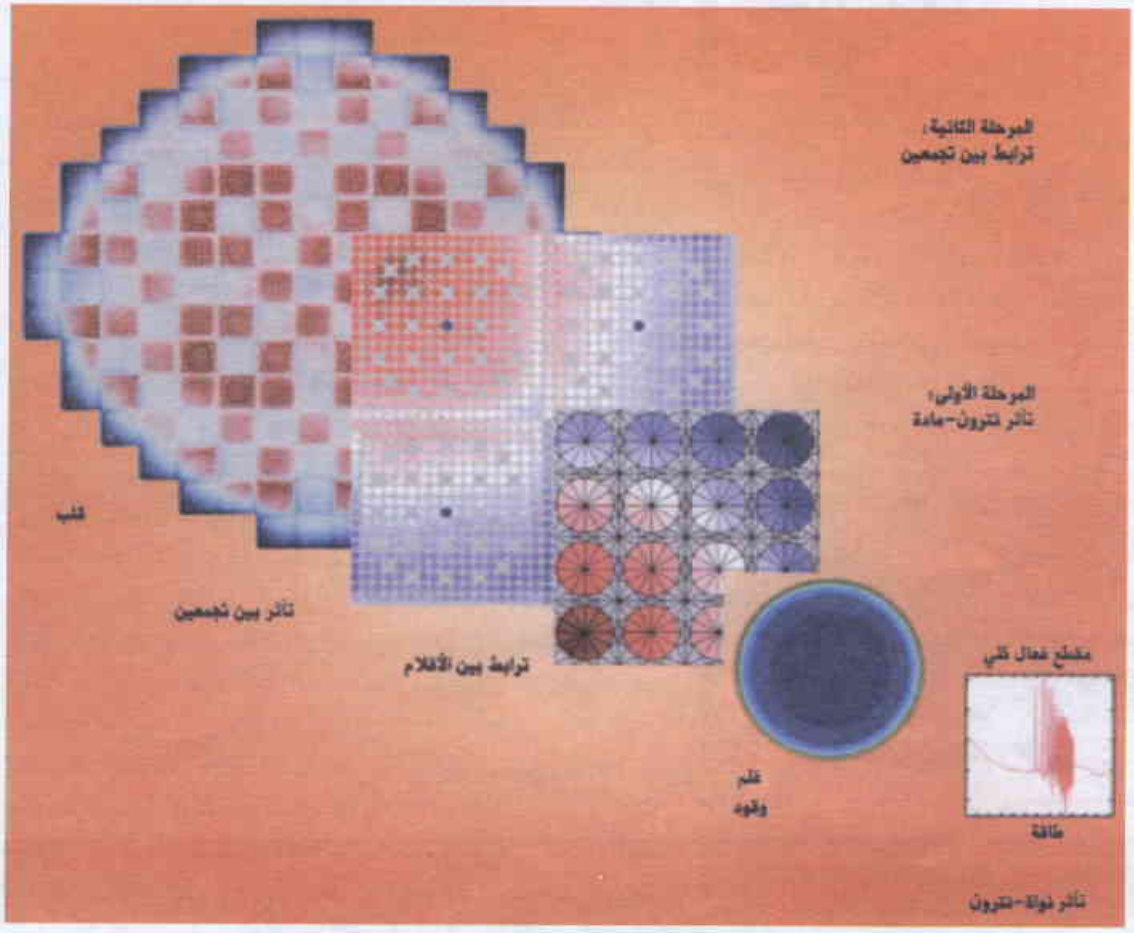
الموظر D

التجارب التحليلية والتجارب الشموليّة

سعيا وراء فهم المعارف وتعميقها، تجري أولا التجارب التي تتناول دراسة ظاهرة وحيدة بصورة أولوية، وتكون غالبا في قد مصغر. إنّ هذه التجارب، التي تدعى تحليلية، أولية أو مفصلة، تسمح بتقييم أي ظاهرة لوحدها، أو على الأقل بدراسة مفاعيل منفصلة بعضها عن بعض، مع محاولة الحد من تأثير ظواهر أخرى. ثم تجمع نتائجها في كودات (برمجيات) الحساب على شكل بيانات تستخدمها النماذج الفيزيائية.

في المجال النووي، تُقدّم معادلة موازنة النترونات في مفاعل انشطاري (معادلة بولتزمان) مثالا على الخطية، وهكذا، فإن تجربة تجرى على مفاعل حرج منخفض القدرة مثل مفاعل إيول Eole هي تجربة نموذجية للتشكيلات التي تصادف في المفاعلات المولدة للكهرباء من أجل وسطاء أساسية بعديتها مثل توزع القدرة أو فعالية العناصر الماصة. وفي المقابل، فإن فيزياء الاندماج النووي هي لا خطية: لذلك يستحيل الاستقراء الخارجي نظرا لوجود عتبات ينبغي تخطيها.

إنّ التجارب التي تأخذ بالحسبان مجموعة الظواهر الأولية وبالتالي - وهذا هو الجوهري - مجموعة تأثراتها، توصف بأنها تجارب شمولية أو أيضا بأنها "منظومة". وتهدف، وربما في سلم مُصغر ولكن مع عناصر المنظومة كلها، إلى إعادة تسلسل العمليات الفيزيائية (وعند اللزوم، الكيميائية والبيولوجية) الجوهرية التي تُميز عملها، في الشروط الاعتيادية كما في الشروط الحدية، بل خارج هذه الحدود (حالات طارئة، مثلا مع عروة بيتسي Bethsy في ترموديناميك السوائل ومفاعل كابري في ترموميكانيك الوقود. وتظهر هذه التجارب مفاعيل المنظومة، وتجعل ممكنا اكتساب المعطيات وكذلك سن المعايير، وهي ضرورية للتحقق من أن برمجيات الحساب التي تدمج هذه المعارف كلها تعرض الحقيقة عرضا جيدا.



الشكل 2- مختلف سلالم النمذجة لتجميع الوقود

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

المؤطر E

التقدم في هندسة البرمجيات

في بدايات الحساب العلمي (السنوات 1950 - 1970)، كان الفيزيائي "يقوم بعمل كل شيء": النمذجة الفيزيائية والرياضية، التحليل العددي، البرمجة، استعمال الأداة المتطورة، تحليل النتائج (المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية؟).

ثم كان أن دفع تعقيد المسائل المعروضة، وضرورة التمكن من دقة النتائج واستقرار الطرائق الرقمية، والبحث عن استمثال زمن الحساب (حتى الزمن الحقيقي في الوقت الحاضر)، الأرقاميين (المتعاملين مع الأرقام) إلى مساعدة الفيزيائيين على تصميم كودات الحساب. وبالطبع فقد أثار هذا التطور بعض الصعوبات العابرة: أصبح النشاط متعدد التخصصات، فخسر الفيزيائيون جزءا من استقلاليتهم لحساب التآزر بين حرفتين متقدمتين.

وبعد ذلك اغتنت أيضا المسائل المعالجة: فتحسب اليوم قلوب المفاعلات النووية بتوصيف كل واحد من 40000 قلم وقود ذات التركيبات المختلفة، ومعها جريان الماء – البخار المضطرب الذي يحيط بها! (المؤطر F، نمذجة ومحاكاة الجريانات المضطربة). واستدعى الأمر التصدي لمسائل دراسة محيط العمل، ومرونة الاستخدام، والتتابعات، والترابطات والتلاؤم مع حواسيب ذات معماريات متسارعة في تطورها (المؤطر B، الوسائل المعلوماتية للمحاكاة الرقمية بكفاءة عالية). كما أن إدخال هذه المهنة الثالثة التي هي هندسة البرمجيات، لصالح إجراء حسابات أكثر دقة أو أكثر ملاءمة، قد جلب بدوره حصته من صعوبات التنظيم.

وبالطبع، فإن هذه المهن الثلاث (الفيزياء، والتحليل العددي وهندسة البرمجيات) متشابكة تشابكا وثيقا، و"فن" كل منها يؤثر تأثيرا مباشرا في الآخرين. فقد أصبح ضروريا تأهيل مهندسين وباحثين متمكنين في مهنتين من هذه المهن على الأقل، ولهم معرفة غير أولية بالثالثة.

وفي إطار التطوير المشترك بين كهرباء فرنسا ومفوضية الطاقة الذرية لمنطلقات جديدة للحساب والنمذجة في الإلكترونيات النووية (النترونيات، وترموديناميك السوائل، والوقود)، وهندسة البرمجيات هي بنفس أهمية النماذج الفيزيائية أوالطرائق الرقمية أو التوصيف. وكانت هذه المسألة قد درست مشروعا بعد مشروع وإجماليا بين المشاريع مدة سنتين للتوصل أخيرا إلى معمارية مشتركة ذات خمسة مستويات تسمح بمراعاة حاجات دراسة محيط عمل المستخدم، وتتيح للفيزيائيين والأرقاميين أن يعبروا عن مهاراتهم بصورة مثلى.

وتقيم هذه الطبقات البرمجية الخمس الانتقالات ما بين أشياء العالم الحقيقي، (تجميع وقود وأنابيب بخار، الخ ..) وأشياء الحساب (التشبيكات والمصفوفات والزمر الحلية، الحقول، الخ ..).

إن الطريق التي تم اجتيازها شاسعة، تبدأ من الحسابات الأولى في الخمسينيات، التي كانت تجري بالمسطرة الحاسبة والقائمة في معظمها على القاعدة الثلاثية، وتصل إلى كودات الحساب الحالية التي تحل جملا لا خطية من معادلات المشتقات الجزئية على الحاسبات الفائقة. وتبقى مهارة الفيزيائي والمهندس دون أن تنس: إنها إقرار الصلاحية التجريبي، "الحدسي" أو الاستنتاجي، للنمذجات الرياضية والفيزيائية المتصورة والمدمجة في كودات الحساب هذه. يحتفظ الفيزيائي الحقيقي بالقدرة على التنبؤ والتثبت من رتب المقادير للنتائج التي تقدمها هذه الكودات ... بالاعتماد على القاعدة الثلاثية.

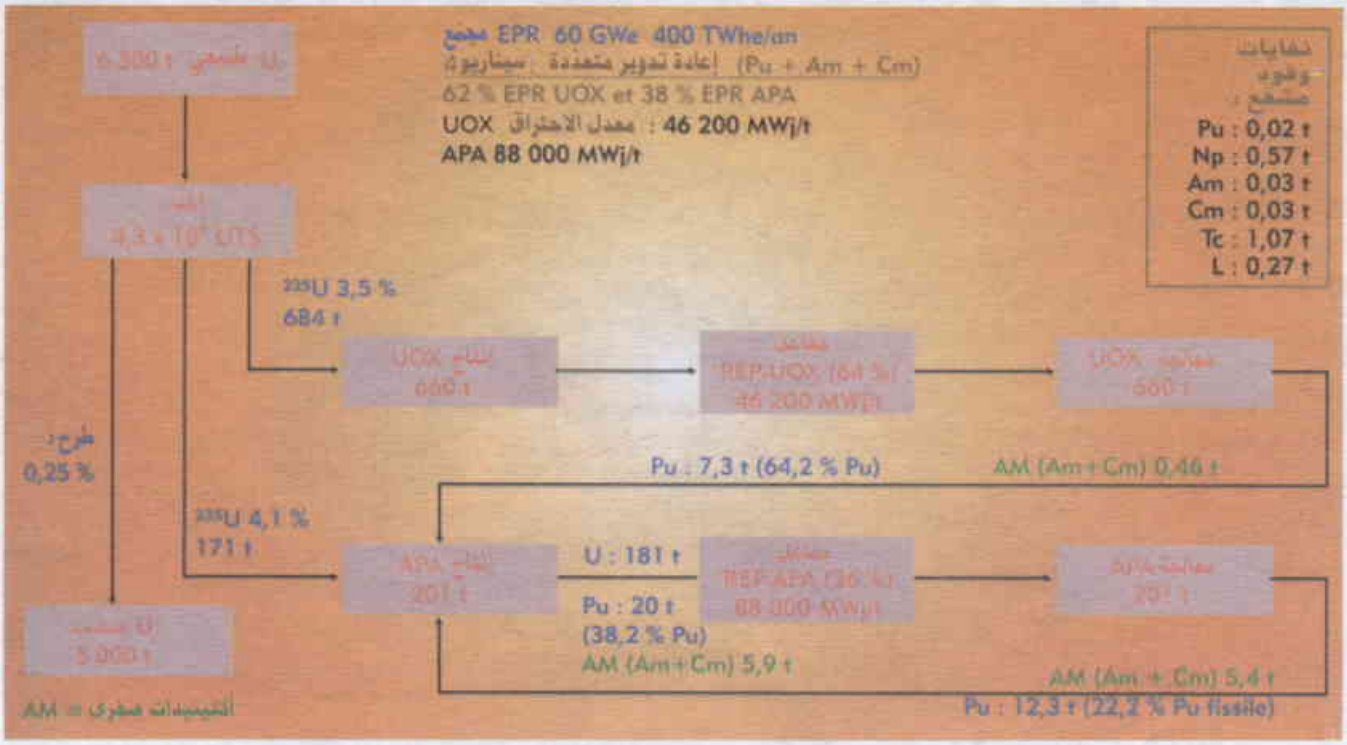
تيري إنكاوا
مديرية الطاقة النووية
مفوضية الطاقة الذرية – ساكلي

الحلول التي يحكم عليها في مستوى المُجمّع

في حالة دراسة تصميم التجميع APA، فإن الحُكم على أحد الحلول لا يمكن أن يُسند إلا بعد أن تتم نمذجة مجمل مُجمّع المفاعلات. تسمح هذه المرحلة بتمييز الجودة النظيرية للبلوتونيوم والجزء من المجمّع الذي ينبغي أن يُخصّص لتعدد إعادة التدوير[1]، وتسمح كذلك بتقدير الكسب بالمواد رقميًا من تخفيض النفايات. ويُطبّق هنا الكودان بيبان (Pepin) وكوسي (Cosi).

وهكذا تُظهر نتائج التحليل الذي أجري أن جلب الماء إلى جوار قلم البلوتونيوم يحسّن الاستهلاك وأن وقودا محمولا على حامل خامل عاملٌ حاسم عند البحث في أداء تشغيل المجمّع ومرونته (الشكل 3). والقدرة المطلوب إخلاؤها تتطلّب تصميم قلم سطحه التبادليّ كبير، فالقلم الحَلَقيّ هو حلّ واعد جدا (الشكل 1). إنّ إحكام هذا التصميم يشكل موضوع بحث يستدعي النمذجة الرقمية والتجريب أيضا، وخاصة في مجال الوقود وترموديناميك السوائل. وهكذا، فإن إحكام تصميم للتجميع يسمح بالسيطرة على مخزون البلوتونيوم ويفرض أصغر عدد من المفاعلات بالماء، والحصول في نفس الوقت على تخفيض مهم في النفايات، من الضروري أن يستخدم مجموعة من البرمجيات المعقّدة ذات كفاءة عالية وموثوقة (المؤطر 2) يستلزم إعدادها جهوداً هامة جداً للتطوير والتأهيل.

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية



الشكل 3- تخطيطة للمعلومات الناتجة من مجموعة المحاكيات المنفذة في نمذجة تجميعات الوقود APA. تتوضح فيها الغاية: توليد تدفق كامل من المواد ونمذجة المجمع بإجماله (توافق القيم المسجلة تدفقات سنوية).

****

إسهام النماذج المصغّرة الحرجة في محاكاة المفاعلات النووية

إن زُويه (Zoe)، وهو أول مفاعل فرنسي، مثال حاضر ليثبت أنّه، منذ بدء تاريخ المفاعلات النووية، لم يحدث أن جرى تطوير مفاهيم وتقنيات نوويّة بدون نماذج مُصغّرة حرجة، إنها مفاعلات قدرتها شبه معدومة قادرة على تغذية تفاعل متسلسل وتُمثّل شبكات وقود المراحل والمفاعلات المطلوب تَفَحُّصها. لاشك أن النترونيات تستند إلى معادلات تُمثل الظواهر تماماً. لكن اتّساع مجالات الطاقة المستخدمة، وتعدّد المواد ومميّزاتها، وتعقّد هندسة التجميعات جعلت التجريب على هذه النماذج المصغّرة، ضرورة لا غنى عنها حتى الآن، بمجرد أن تعلق الأمر بوصف مجموعة المعطيات الفيزيائية والنماذج الحسابية وصفاً دقيقاً. وسيبقى الأمر كذلك في المستقبل في سياق تطوير المحاكاة الرقمية (المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية؟).

تشترك مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية في دراسة فيزياء المفاعلات بتصميم وتنفيذ تجارب متكاملة لتوصيف مجموعة الصيغ[1] الخاصة بالحساب النتروني والحماية (توهين أشعة غاما والنترونات في المواد) وبالبيانات النووية الأساسية كلّ ذلك على ثلاثة نماذج مصغّرة حرجة في كاداراش: إيول Eole (أطياف[2] REP و REB)، مينيرف Minerve (كل أنواع الطيوف) ومازوركا Masurca (أطياف "سريعة" ومنظومة يقودها مسرّع – في الإنكليزية ADS (Accelerator Driven System)). وهذه النماذج المُصغّرة الحرجة هي مفاعلات تستخدم طاقات ضعيفة جداً. وتقبل سلوكياتها النترونية الاستقراء الخارجي مباشرة إلى الظواهر الفيزيائية التي تُصادف في المفاعلات ذات القدرة العالية، بتقريب عامل تمثيلي. وهذه النماذج المُصغّرة، الأمينة تماماً، هي مرنة جداً، تقبل التلاؤم، سهلة النفاذ إليها وسهلة التصنيع.

إن تصميم التجارب المتكاملة يقوم على استعمال تسلسل

(1) مجموعة الصيغ: أداة معالجة من مكتبات البيانات النووية وبرمجيات الحساب وإجراءات الحساب أقرت صلاحيتها وتمّ توصيفها.

(2) الطيف: توزع بحسب الطاقة لمجموعات النترونات الموجودة في حلّ المفاعل.

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

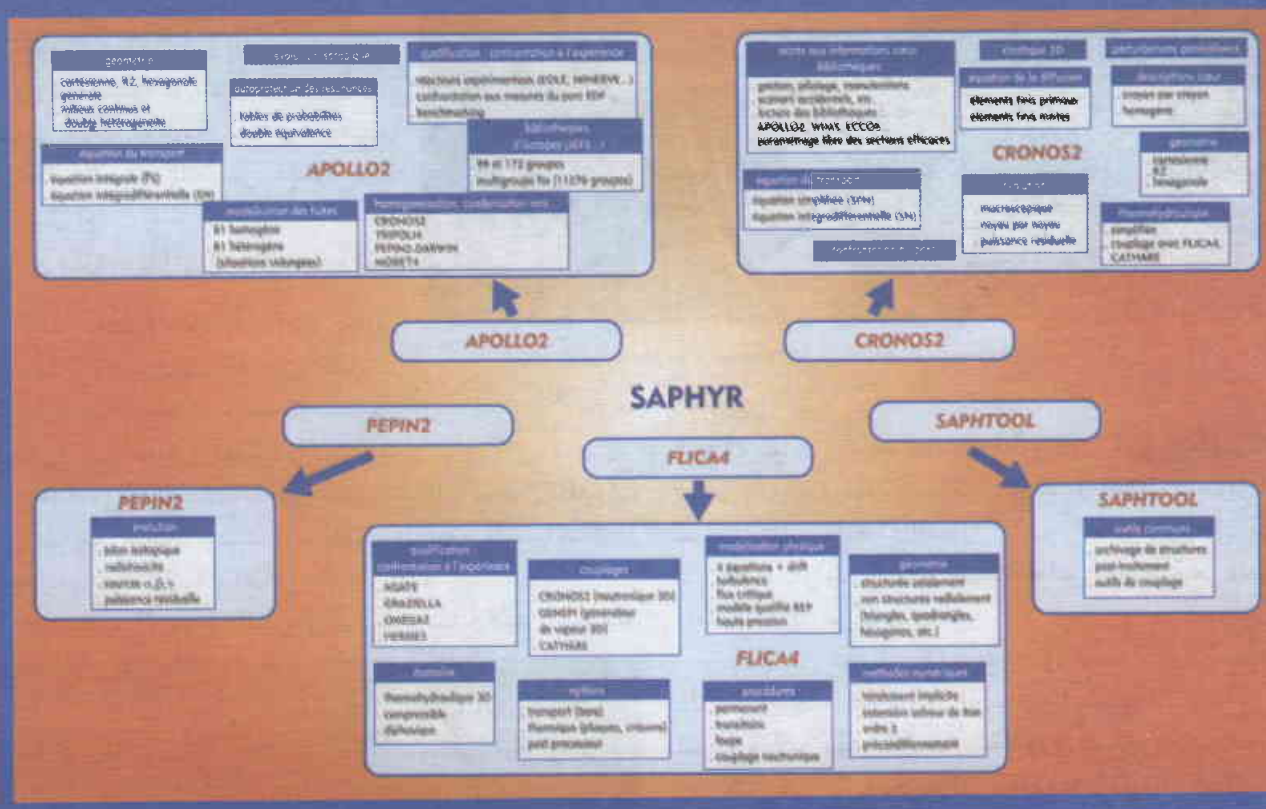
المؤطر 2

منظومة كُودات سافير

تُعد منظومة كودات سافير Saphyr (منظومة متقدمة لفيزياء المفاعلات) أساس الأدوات التي جُهزت بها كهرباء فرنسا (EDF) وفراماتوم -ANP (الشكل). إنها ثمرة عدة عشرات السنين من الجهد لإعداد برمجيات للحساب (أبولو Apollo، كرونوس Cronos، بيبان Pepin وفليكا Flica) تمثل عدة مئات الآلاف من سطور البرمجة. لقد بلغت أشدها (المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية؟).

ونظراً لبنية سافير النمطية، وطرائقه الرقمية الطليعية، ونمذجاته الفيزيائية الدقيقة وبفضل أداة الترابط إيزاس Isas، فإنه يُعد وسيلة ناجحة تسمح لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية بإجراء دراسات ابتكارية جداً كتلك التي تؤدي إلى تحديد التجميع APA وبرامجه البحثية المرافقة.

ومنذ الآن، ثمة جيل جديد من الأدوات يجري تطويرها بمشاركة الصناعيين الفرنسيين في إطار مشروع ديكارت[5] الذي سيسمح بداية من عام 2005 بتحسين استعمال المعارف المكتسبة في فيزياء المفاعلات، وتصميم مفاعلات المستقبل بدقة أكبر وتخفيض تكاليف إحكام تصاميم جديدة.



(5) ديكارت اسم برنامج في النترونيات والترموهيدروليك لثمة نبتون Neptune والوقود بليار Pléiades.

من نماذج حسابات الحساسية وحسابات الارتياب ويسمح بالتحقق مسبقاً من ملاءمة التجربة لحاجات بالتوصيف المعبر عنه.

إن تحقيق برامج تجريبيّة في النترونيات يقوم على تحديد وقياس الوسطاء أو الظواهر المفيدة لتوصيف أدوات الحساب و"مكتبات" البيانات النووية. ثمّة نوعان رئيسيان من التجارب المتكاملة يمكن تمييزها (المؤطر D: تجارب تحليلية وتجارب شمولية). أما تجارب النوع الأساسي فتهدف إلى توصيف البيانات النووية الأساسية بقياس الوسطاء التي هي نفسها أساسية. وأما تجارب النموذج المُصغّر فتهدف إلى توصيف

طرائق الحسابات عبر وسطاء المشروع.

يستند تحديد هذه الوسطاء إلى استعمال تقنيات تجريبية عديدة، يمكن أن تصنف في زمر ثلاث أساسية حسب ما ترمي القياسات إلى تحديده:

• التفاعلية المُطْلقة (سلّم التفاعلية) أو التفاعلية النسبيّة (الفرق بين سويتين من التفاعلية).

• توزّعات معدّلات التفاعل[3] والتدفق[4] في القلب أو بطريقة ما بعد التشعيع.

• جَرْعات غاما أو نترونات.

وينبغي لقيم الوسطاء التجريبية أن تترافق بقيم الارتياب المضبوطة. ومن أجل وسيط مفروض، فإن استعمال عدة تقنيات قياس متآونة، يسمح بتخفيض من حدّ الارتياب النظامي. فإجراء عدة سلاسل قياس بالتقنية التجريبية نفسها يسمح بالوصول إلى الغاية المرجوّة.

وهذا بالطبع يقود، في إطار تطوير المحاكاة واستهداف تحسين التنبؤات بتخطيطات الحساب عن طريق تحسين النماذج الرياضية والبيانات الأساسية المعتمدة في مجموعات الصيغ النترونية، إلى تحقيق تطويرات في طرائق قياس جديدة وسلاسل الحيازة المصاحبة، أو تحسينات في التقنيات التجريبية الموجودة.

إن تحديد الارتياب التجريبي مرتبط والحالة هذه باستعمال هذه التقنيات والاحتفاظ بها وتطويرها، وكذلك بتطوير تقنيات قياس جديدة. ويمكن أن يذكر على سبيل المثال التطوير الأخير لسلسلة قياس المقطع الفعال[5] لأسر[6] اليورانيوم 238 مباشرة على قضيب وقود، وتطوير سلسلة قياس التفاعلية في الديناميك بواسطة مولد نترونات نبضية .

يستدعي تحسين هذه الطرائق أيضاً خبرة متقدّمة في علم الأجهزة. وبغية قياس الوسطاء المحلية للقلوب إلى أقرب تقريب وبأكبر دقة، كان من الضروري إحكام مكاشيف للتدفق النتروني من نوع حُجيرات الانشطار بأبعاد صغيرة جداً (8mm, 4 mm,1.5 mm) مرتبطة بدارة إلكترونية لتلقّي ومعالجة الإشارة التي تسمح بتحليل مرضٍ للقياسات.

فيليب فوجيراس ودانيال ريبير
مديرية الطاقة النووية
مفوضية الطاقة الذرية – مركز كاداراش

عملية وضع إبر من وقود أكسيد اليورانيوم في قلب النموذج المصغر الحرج إيول

(3) معدّل التفاعل: عدد النوى الشطورة المتولدة إلى عدد النوى الشطورة المتلفة.

(4) معدّل التدفق: عدد التفاعلات بين النترونات والمادة، في واحدة الحجم وواحدة الزمن.

(5) المقطع الفعال: قياس احتمال تأثر جسيم وتواجه هدف، في حالة النترون، فإنه يعرف احتمال تأثره مع نوى المادة لمختلف مكوّنات القلب.

(6) الأسر: امتصاص نتروني لا يؤدي إلى انشطار.

التنبؤ بالبنية الثلاثية الأبعاد للبروتينات

هنري أورلاند
مديرية علوم المادة - مفوضية الطاقة الذرية - مركز ساكلي

مُلخّص

إنّ تحديد البُنية الفضائية، في الأبعاد الثلاثة، لبروتين انطلاقاً من صيغته الكيميائية هو مسألة ليس لها جواب تجريبي حقيقي في الوقت الحاضر. ومع ذلك فهذا الموضوع ذو فائدة كبيرة، خاصة لفهم بعض الأمراض أو ابتكار أدوية "مناسبة" حسب الطلب. إن آليات عمل بروتين هي فعلاً مرتبطة ارتباطاً وثيقاً بشكله وبالطريقة التي ينثني بها على نفسه. لقد تقدّمت المُحاكاة الرقمية لهذه العملية تقدّماً هائلاً هذه السنوات الأخيرة.

الكلمات المفتاحية: البروتينات، جينوم، نمذجة جزيئية، حموض أمينية.

إن متوسطات الانثناء هي مصدر الأشكال الممرضة من البروتينات الملاحظة في الأمراض العصبيّة التنكسيّة، مثل مرض كروتزفلد - جاكوب الذي يُعدُّ نوع منه الشكل البشري لـ ESB.

ثمة مسائل عديدة من الصعب جداً، بل من المستحيل، أن نجد لها أجوبة تجريبيّة. ومن أمثلتها التنبؤ بالبنية الثلاثية الأبعاد للبروتينات (راجع المؤطر1 في نمذجة الجزيئات الماكروية البيولوجية). فبعد تفسير الجينوم البشري وجيناته التي تُعدّ 35000 تقريباً، يتوقع الباحثون اكتشاف عشرات، بل مئات الآلاف من البروتينات الجديدة، خلافاً لما كان يُعتقد لمدّة طويلة، لأن الجينة نفسها تستطيع أن تُكوِّد عدداً منها. وهكذا فإنّ وظيفة البروتين وكذلك آلية عمله مرتبطتان ارتباطاً وثيقاً بالشكل الهندسي لجزيئه (المؤطّر). غير أنه لا توجد بَعْدُ إمكانية منهجية تتنبأ البنية الثلاثية الأبعاد للبروتينات انطلاقاً من صيغتها الكيميائية فقط. إنّ التقنيتين المتوفرتين لتحديد البُنية، وهما علم البلّورات والتجاوب المغنطيسي النووي (NMR)، لا يُمكن تطبيقهما على البروتينات كلّها كما أن استعمالهما غالباً ما يكون شاقاً. وهناك مشاكل أخرى تتعلق بالمفاهيم كطرق الثني ووسطائها، لا يمكن التصدّي لها بعد من وجهة نظر تجريبية.

لهذه الأسباب كلّها، حاول رجال العلم إعداد نماذج وتقنيات مُحاكاة رقمية (المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية؟). وهذه الجزيئات باعتبارها تجميعات من الذرّات التي تتأثر بقوى، يبدو من الطبيعي نمذجتها كمنظومة مكانيكية والتنبؤ يكون بحلّ المعادلات الأساسية لمكانيك نيوتن.

وهذا النوع من المقاربة، التي تمّت المبادرة إليها في السبعينيات، تطوّر تطوراً هائلاً مع صعود قدرة الحواسيب (المؤطّر C، النمذجة الجزيئية).

نمذجة في مستويات مُختلفة

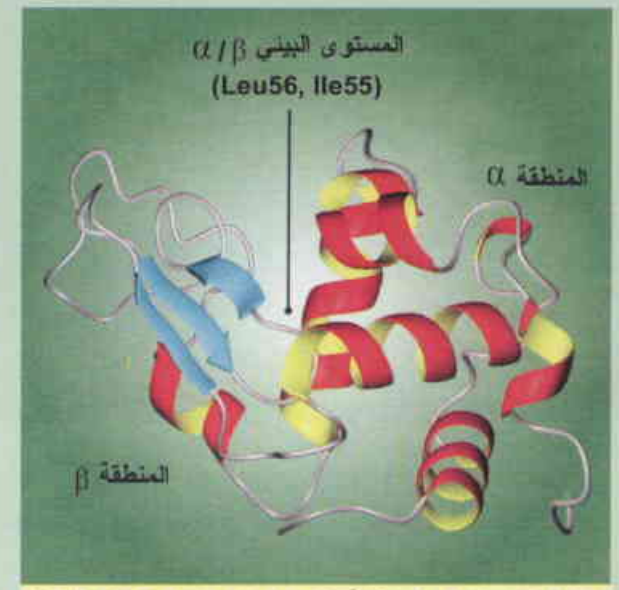
إن المرحلة الأولى في محاكاة ما هي نمذجة الجُزيء. ووفق الميز ومستوى التعقيد المتقن المرغوب فيهما، يمكن أن يُنمذج البروتين على اعتبار أنّه تجميع ذرّات مرتبطة بنوابض أو أنه مجموع عُصيات تُمثّل الحموض الأمينية، أو حتّى أنه، في سلّم أكبر مجموعة روابط في شبكة مُكعّبة، عندما يكون المقصود دراسة بعض الظواهر دراسة كيفية.

وبغية تركيز الأفكار نقول إنّ الموضوع هو النمذجة في المستوى الذرّي، أي في مستوى الذرّات كلّها all atoms التي تدرس هنا. فيُمثّل البروتين هنا بتجميعة من ذرّات الكربون والأكسجين والآزوت والهدروجين والكبريت. وهذه الذرّات مرتبطة بعضها ببعض بنوابض صلْبة، طولها يوافق طول الروابط الذرّية المقيسة تجريبياً، وتُمثل طوبولوجيا السلسلة. وبعد تمثيل الجزيء على هذا النحو، ينبغي أيضاً تحديد التأثرات بين مكوّناتها. إنّ النماذج الاعتيادية لحقول القوى

نموذج للمجمّع Bgk-Kv11، مرئي من الأمام والأعلى، أُنشىء بالتحريك الجُزيئي تحت قيود في إطار دراسة تأثرات البروتين Bgk، المستخرج من سمّ شُقّار البحر مع مُتسلّمه وهو القناة البوتاسيومية.

تكوّن وحيد بين آلاف التكوّنات

بعد أن يتمّ تركيب البروتينات من الريبوزوم (ribosome)[1]، والبروتينات هي جُزيئات تُؤمّن معظم الوظائف الأوّلية للخليّة، فإنها تنثني وتكتسب بسرعة شكلها الثلاثي الأبعاد (الشكل 1). وقد دلّت التجربة أن البروتينات تنثني تلقائياً وأنّ التكوّن الفعّال وحيد. بحيث إنّ البنية الثلاثية الأبعاد مرتبطة بأسلوب وحيد التقابل مع التتابع الأولي: فبين آلاف التكوّنات المنثنية مبدئياً والتي يمكن أن ينفذ إليها الليف البوليبيتيدي [2]، هناك تكوّن وحيد يُصطفى ويتحقق.

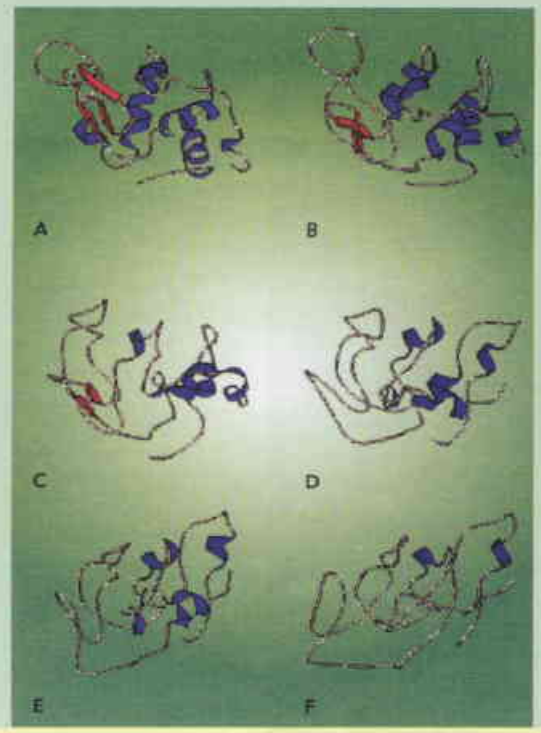


الشكل 1- تمثيل تخطيطي للبنية البلورية لليسوزيم. إلى اليمين، المنطقة α مؤلفة من خمسة حلزونات (بالأحمر والأصفر) وإلى اليسار، المنطقة β مؤلفة من ثلاثة طيقان β (بالأزرق) وحلزون واحد.

فبأيّ آلية يكتسب البروتين تكوّنه الفطري؟ لقد حصل تقدّم بالنسبة إلى هذه المسألة بدراسة انثناء عدة جزيئات دراسة تجريبية، ومنها جُزيء الليسوزيم(lysozyme). ينطوي هذا الجزيء على منطقتين [3](الشكل1)، وتبيّن تجريبياً أنّه عند انثنائه، يتبنّى حالةً انتقالية تكون فيها المنطقة α (حلزونيات) تنثني جُزئياً بينما المنطقة β (وريقات) تبقى دون انثناء. إنّ الطرائق التي تؤدي إلى هذه النتيجة لا تسمح بإدراك الآلية في المستوى الذرّي التي لا يمكن إلا لمحاكيات النشر على الحاسوب فقط أن تصل إليها.

إنّ ترتية تطوّر البُنى الثانوية على مسار الثني التي يُحصل عليها بالديناميك الجزيئي (الشكل 2) تبيّن أنّ المنطقة β تَنْثَني قبل المنطقة α (المؤطّر C، النمذجة الجزيئية). تشير هذه

(1) الريبوزوم هو مركب من الحمض النووي الريبي RNA وبروتينات ريبوزومية التي تتحد بالحمض النووي الريبي الرسول وتحفز تركيب البروتينات.
(2) البوليبيتيدات هي بوليميرات خطية مؤلفة من عدة حموض أمينية.
(3) منطقة: جزء من بروتين ذي بنية ثلاثية (شكل ثلاثي الأبعاد معقد) خاصة.
(4) تُدعى هذه الألياف أميلوئيدية بالمماثلة مع الألياف β- أميلوئيدية الملاحظة في مرض الزهايمر Alzheimer



الشكل 2- تمثيل تخطيطي لانبساط الليسوزيم (من A إلى F) أو لانثنائه (من F إلى A) على مراحل ست مختلفة من مسار انبساطه جرى الحصول عليها بمحاكاة الديناميك الجزيئي. تُمثل الحلزونات α بشريط ملتف بالأزرق وتمثل الوريقات β بأسهم حمراء.

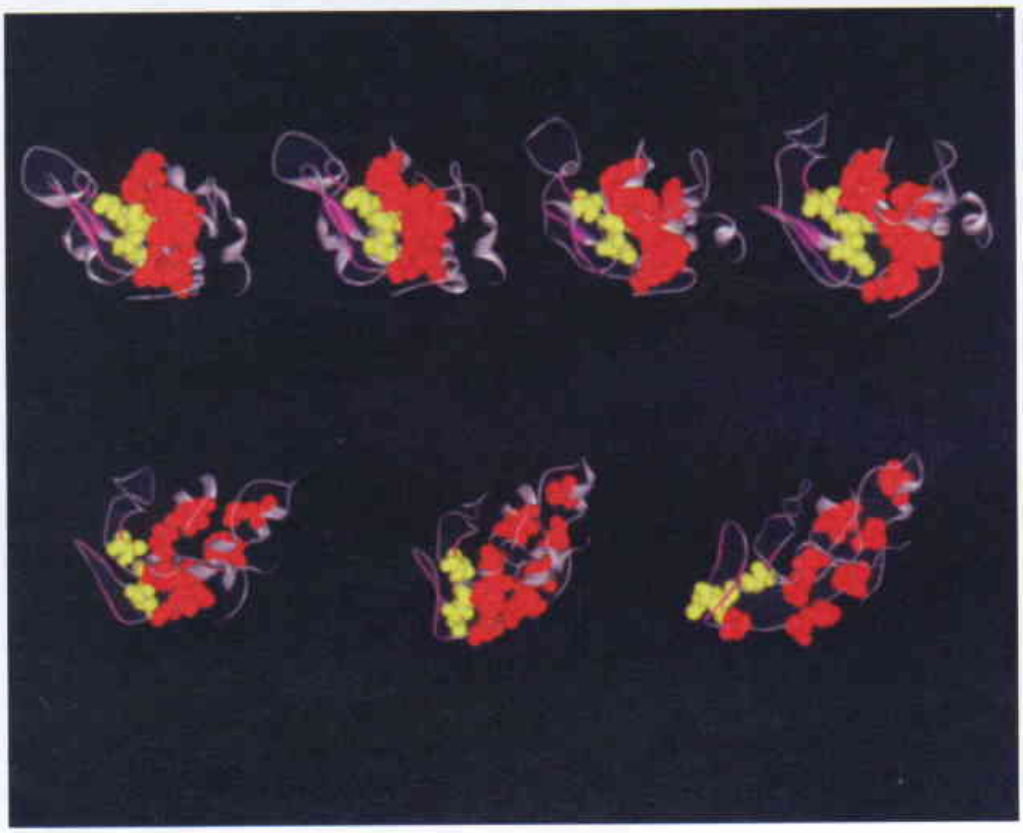
المحاكاة إلى أنّ انثناء المنطقة β مرتبط ببنية السطح البيني بين المنطقتين. ولكي تنثني المنطقة β، تبدأ بأن تُدخل اثنتين من بقاياها (Leu56 و Ile55) في المنطقة α أثناء انثنائها.

الانثناءات المُولِّدة للمرض

وهكذا، إن طرأ على هذه البقايا تطفر من كاره للماء إلى مُحبّ للماء (بخاصة، طفر الـ Ile 55 إلى Thr)، تصبح قدرتها على الاندراج في المنطقة α أثناء انثنائها أقلّ وينثني البروتين بسرعة أقلّ. ويبقى البروتين مدّة أطول في شكل مُنثن جُزئياً تكون فيه المنطقة β غير منثنية. ففي هذه الحالة المتوسطة، يمكن للمنطقتين β من البروتينين المختلفين أن تتّحدا معاً فتؤديان إلى تكوين ليف: وهذا فعلاً ما يحدث لهذا الطافر من الليسوزيم.

وعلى العموم، فإن متوسطات الانثناء يمكنها أن تؤدي إلى أشكال من البروتينات رديئة الانثناء. فهذه الأشكال الرديئة الانثناء أو المنثنية جُزئياً، لها على العموم ميْل إلى أن ينضم بعضها إلى بعض وأن تُكوّن أليافاً أميلوئيدية[4] amyloïdiques. وهكذا فإن متوسّطات الانثناء تكوّن مصدر الأشكال المُمرضة للبروتينات الملاحظة في الأمراض العصبية التنكسية. فيمكن أن يكون بروتين ما في شكله المنثني بصورة صحيحة والفعّال أو (في شروط خاصّة) مُتبنّى في شكل رديء الانثناء، منضم غالباً على شكل ألياف.

برنار جيلكان - مديرية علوم الحي - مفوضية الطاقة الذرية - مركز ساكلي



مختلف أطوار انثناء الليسوزيم، تُظهر تطوّر السطح البيني الكاره للماء بين المنطقة β (بالأصفر) والمنطقة α (بالأزرق). ويوافق المنظر الأول بنية البروتين الفطرية (انظر الشكل 1 في المؤطر)، وتوافق المناظر الأخرى مناظر الشكل 2.

تستدعي طاقات تمديد للروابط، ومرونة لزوايا التكافؤ[1] وطاقات فتل لهيكل السلسلة. يُضاف إلى ذلك، أنّ الذرّات وهي تسلك في تقريب أولّي مثل كُرات قاسية، فإنّ تأثراً من نوع لينار- جونس Lenard-Jones (بمدى قصيرٍ وتنافري جداً على مسافة قصيرة) يُعتمد هنا لتمثيلها. وأخيراً، تؤخذ بالحسبان الكهربية الإيجابية للذرّات بشحنة جُزئيّة تُعْزى لكل منها. وتتفاعل هذه الشحنات الجزئية فيما بينها بصورة كهراكدية، بثابتة عزل كهربائي [2] علماً بأن قيمتها وطبيعتها ما زالتا قيد المناقشة الحارّة.

بعد أن يتحدّد حقل القوى للمنظومة أو الهاملتوني، يمكن البدء بالمحاكاة الرقمية. وتجري إما بمكاملة عددية لمعادلات المكانيك التقليدي، أو باستخدام طريقة عشوائية، من نوع مونت كارلو، تسمح باعتيان تقلّبات الجزيء مع الزمن. وبوجود تأثرات تنافرية شديدة جداً في المدى القصير، ينبغي أن تكون الخطوة الزمنية المعتمدة لتكامل معادلات الحركة صغيرة جداً، بحيث تتراوح من الفمتوثانية (10^{-15} ثانية) إلى البيكو ثانية (10^{-12} ثانية) تبعاً لدرجة الدقّة المطلوبة.

(1) التكافؤ: عدد الروابط التي يمكن أن تؤلفها الذرة الواحدة.
(2) ثابتة العزل الكهربائي هي المقدار الناتج من تقسيم قيمة الحقل الكهربائي في وسط مفروض على قيمته في الخلاء، إنها قياس الطبيعة القطبية لمحل.

عدّة آلاف من المتغيرات

إنّ الطول النموذجي لبروتين هو 150 حمضاً أمينياً تقريباً، أي من مرتبة 1500 ذرّة. وتتحدّد كل ذرّة بإحداثيات ثلاثة، فثمّة، في المجموع، عدة آلاف من المتغيرات ينبغي تحريكها في الزمن. أضف إلى ذلك، أنّه لمّا كان البروتين يعمل دائماً في الماء (ومن المعلوم أن مفعول الكره للماء hydrophobe هو العنصر الحاسم في الثني) فينبغي أن تشتمل المحاكاة على جُزيئات كافية من ماء المحلّ، (عدّة مئات في كُلّ مُحاكاة) كي يظهر مفعول الكره للماء.

إن قدرة الحاسبات الحالية الأكثر كفاءة تسمح بمحاكاة عملية الثني لمدة من مرتبة عشر المكروثانية في حالة البروتينات الأقصر. أما الأحداث الأسرع، مثل تكوّن بُنى ثانوية كالحلزونات أو الوريقات، فإنها تظهر بعد عدّة مكروثانية. أما زمن الثني نفسه، فهو من مرتبة ملّي ثانية. إن محاكاة الثني الكامل للبروتين (على عدة عشرات من الملّي ثانية، بل مئات من الملّي ثانية)، لا تزال إذاً بعيدة جداً وخاصة إذا كان الجزيء طويلاً.

ومع ذلك، تُزوّدنا المُحاكاة الرقمية بمعلومات هامّة حول عدد مُعيّن من المسائل الأخرى: تحديد الأنماط الجماعية للبروتينات (الاهتزازات والتشوهات الكبيرة بوجود الرباط، إلخ) وطُرُق

الثني (ما هي المسارات التي تقود البروتين من حالته المُشوهة إلى حالته الطبيعية أو المُنْثنية؟) وتشذيب البُنى البلّورية... ومع ذلك، فإن محاكاة النماذج المبسّطة جداً على شبكة قد سمحت بأن نتفهم فهماً أفضل طبيعة تتابعات البروتينات التي تنثني وأن نتميّز البروتينات التي ثنيها وحيد وسريع.

وأخيراً، تسمح المحاكيات بحصول تقدّم في مجال تصميم البروتين، الذي يهدف إلى اصطناع بروتين له وظيفة بيولوجية محدّدة تماماً أو إلى تحسين وظيفته بطفرات مناسبة. وتسمح خاصة بإجراء طفرات افتراضية، في السيليكا إن صح القول، على الحموض الأمينية من الموقع الفعّال: وهكذا فإن طاقة الارتباط للبروتين مع رباطه تكون قد استمثلت، وهذا ما يسمح بزيادة النشاط الحفّازي أو اصطفائية البروتين زيادة هامة جداً. ويمكن بعدئذٍ التحقق من صحة هذه التنبؤات تجريبياً.

وهناك مسألة مُهمّة ما زالت قائمة، هي إقرار صلاحية حقل القوى: لما كان هذا الأخير يُبنى بطريقة شبه تجريبية، فإنه يضبط على قياسات الجزيئات الصغيرة أو بالحسابات الكموميّة التقريبية (المؤطّرC، النمذجة الجزيئية). ومع ذلك ليس ما يشير إلى أن الشكل الفطري للبروتين هو طاقة حقل القوى المطلقة الدنيا، وبناءً عليه فإن حقل القوى هذا قادر على ثني البروتين. وقد بيّن أيضاً باحثون، على نماذج مُبسّطة، على أنه من المستحيل أن نجد لحقل القوى تمثيلاً وسيطياً بحيث تكون فيه طاقة الشكل الفطري للبروتينات أصغر من طاقة أيّ تشكّل غير فطري.

مسابقة في التنبؤ

تُقام كل سنتين في أسيلومار Asilomar (كاليفورنيا) مسابقة تنبؤ بالبُنى بلا تبصرٍ، يطلب فيها من "المُحاكين" كافّة أن يتنبؤوا بالبنية المثنية لبروتين يُعطى لهم فيها تتابعه الكيميائي لاختبارهم، ويكون هذا التتابع قد تمّ حلّه تجريبياً، ولكنه لم يُنشر. ثمّ تقارن البنية التي يقترحونها بالبنية "السريّة". والنتيجة أن: ليس للمُحاكيات من نوع مستوى الذرّات كلّها أي تنبؤية موثوقة بَعْد في مستوى البُنى. ومع ذلك، فقد اقترح الأميركي د. بيكر D. Baker وفريقه في مدينة سياتل نمذجة في سلّم متوسط مفادها أن البروتين يوصف في هذه النمذجة كتجميع قطع من ثلاثة إلى خمسة حموض أمينية. يجري اعتيان التكوّنات الممكنة لهذه القطع بواسطة قاعدة بيانات تجريبية لإنشاء مكتبة للتكوّنات الممكنة لهذه القطع. يُنشأ احتمال فعّال لتآثر هذه القطع بطريقة شبه تجريبية. ويؤخذ بالحسبان التأثر مع الماء. وتقوم المحاكاة بعدئذٍ على اعتيان مونت كارلو من فضاء التكوين، على ألاّ تُقبل إلا التكوّنات التي تؤخذ من المكتبة. إن النتائج اللافتة للنظر كثيراً، تعطي هذه المُحاكيات سمة تنبُّئية حقيقية.

هذا وينبغي إحداث تطوير هائل في المُحاكيات الرقمية قبل أن تصبح حقاً فعّالة وعملياتية، لكن من المؤكد إنها ستُعد قريباً أداة فعّالة تنبُّئية لا غنى عنها للبيولوجيين والصيدلانيين.

محاكاة المنظومات البيولوجيّة

ك. جيدرول
جينوبول - إفري - إسّون

مُلخّص

يمكن من الآن فصاعداً، وبواسطة رقاقات (puces) الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين DNA، قياس تعبير الجينات لكائن حي. إن إعادة تكوين شبكة الجينات المعبّر عنها، انطلاقاً من هذه المعطيات وباستخدام مرحلة من النمذجة، ستتيح محاكاة هذه الشبكة، والتنبؤ مثلاً بسلوك خليّة أو بالنمط الظاهري لفرد ما، أي التعبير عن جيناته. وثبت أن المحاكاة الرقمية هي حاسمة أيضاً في التطوّر التقني للرقاقات ذاتها.

الكلمات المفتاحية: رقاقة، الدنا DNA، جينة، جينوم، الحتمية.

رقاقات ميكام متعددة الإرسال (مقاس 128 رقعة)، على شكل طبقة رقيقة (طبقة من السليسيوم، في المستوى الأمامي إلى اليمين) وفي حالة التركيب المنفرد (إلى اليسار)

سمحت رقاقات الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين DNA[1] (المؤطر1) حديثاً بإجراء قياس متآون لتعبير آلاف الجينات في خليّة أو نسيج (الشكل1). ففي الخميرة مثلاً، يمكن في الوقت الحاضر أن يحلّل تعبير كامل الجينوم (أي حوالي 6300 جينة)؛ أمّا في الإنسان، فيتم تحليل 20000 جينة تقريباً في آنٍ واحد أي ما يقارب ثلثي الجينوم. فيمكن أن تسمح هذه الكمّية من المعلومات بتحسين فهم معمارية الشبكات الكيميائية – الحيويّة أو الوراثية (الجينية) في داخل الخليّة (الشكل 2) وفهم منطق آلياتها المنظمة، التي تحدّد في النهاية سلوك الخليّة أو بناء الراسب الإرثي[2]. وهكذا يمكن قياس التعبير التفاضلي لجزء هام من الجينات ومقابلة خلايا سرطانية مثلاً بخلايا سليمة. فإن نجحنا في استنتاج شبكة الجينات التحتية من هذه المعطيات بمرحلة من النمذجة، أمكننا محاكاة هذه الشبكة والتنبؤ بحالة الخليّة (سرطانية أو سليمة) وفق درجة تعبير الجينة المنظّمة الأساسيّة.

(1) راجع المؤطر 1 في نمذجة الجزيئات الضخمة البيولوجية.
(2) مجموعة الصفات التي تلاحظ عند فرد. ففي الخليّة: تكون مجموعة الصفات الظاهرة الناتجة من تعبير جيناتها (النوع الخلوي، الحالة الصحية للخلية، الخ).

هيئة الطاقة الذرية السورية مكتب نظم المعلومات http://serversmiso.aecs.sy

المؤطر: 1 ما هي رقاقة الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين؟

إنّ رقاقة الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين(DNA)، أو الرقاقة البيولوجية هي (بالإنكليزية: biochip أو genechip) جهاز يسمح من حيث المبدأ بكشف وجود طاقٍ (خيط) من الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين، أي الجزيء الذي يؤدي دور حامل المعلومة الوراثية للكائنات الحيّة كلها، بمزاوجة هذا الطاق مع مكمّله الذي يدعى المسبر المثبّت على الرقاقة.

يستند في الواقع مبدؤها، الموصوف في أواخر الثمانينيات، إلى خاصة تهجين الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين، أي إلى قدرة الأسس bases في طاق من هذا الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين (تيمين وأدينين وسيتوزين وغوانين) على التعرف تلقائياً إلى الأسس المكمّلة (تيمين وأدينين من جهة، سيتوزين وغوانين من جهة أخرى) كي تتزاوج، كما يحدث لجزأي قفل سحّاب أو تكوّن حلزونا مزدوجا.

وهكذا يمكن للرقاقة أن تتعرف إلى هوية تتابع معطى من النكلوتيدات، أي من ترتيب الأسس في جزء من الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين وذلك بوضع هذا الأخير أمام طيقان أخرى معروف تتابعها. وتستخدم التقنية في تطبيقات عدّة، بدءاً من تشخيص الأمراض والتدقيق في أدوية جديدة وفي مواقع فعلها إلى كشف المعديات والملوثات مروراً بالبحث الجينومي (خاصة دراسة الطفرات). وتسمح رقاقة الحمض DNA بإراءة اختلافات التعبير بسرعة كبيرة بين الجينات حتى في سلّم الجينوم الكامل.

هناك في الوقت الحاضر رقاقات DNA قادرة على التعرف بعملية واحدة إلى هوية عشرات الآلاف من عيّنات الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين، لا بل إلى مئات الآلاف منه.

فإذا كان المبدأ سهلاً، فإن تحقيقه التجريبي يتطلّب تجميع تقانات متقدّمة في مجالات الإلكترونيّات المكرويّة وكيمياء الحموض النووية وتحليل الصّور والحوسبة البيولوجية. ولصناعة رقاقة، تُضخّم قطع DNA بتقنيّة البلمرة المتسلسلة (PCR) ثمّ تثبّت (عن طريق تآثرات كهراكديّة)، على حامل من الزجاج، أو بوليمير، أو سليسيوم أو معدن لتوليد عدد من مواقع التهجين.

وحين تصنيع المسبر، يوسم الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين للعيّنة بمادة مفلورة. وبمجرّد أن يتحقق التهجين، تثار كل رقطة بليزر، علماً بأن الفلورة الصادرة، وهي توقيع التهجين، تكشف بمجهر ذي فلورة. فتحليل المعطيات هو فعلاً تحليل للصورة الذي يسمح ليس فقط بالاستدلال على الإشارة المفلورة الصادرة عن كل جزء من الحمض DNA بل أيضاً بتحديد كميتها.

ولقد طوّرت مفوضيّة الطاقة الذّرية الفرنسية من جهتها مع الشركة CISbio الدولية تقنيّة، تدعى ميكام Micam®، للعنونة الكيميائية ـ الكهربائية[1] التي تتألف الرقاقة فيها من حامل من السليسيوم تغطى كلّ رقطة فيه بإلكترود صغير من الذهب. إنّ هذه التقانة، التي تسعى إلى دخول سوق الرقاقات العالية الكفاءة، ستطرحها في السوق شركة أبيبيو Apibio (التي أنشأتها عام 2001 مفوضية الطاقة الذرّية وبيوميريو) التي تتفرّد فيها بالحصريّة.

(1) راجع الفقرة (3) من النمذجة الفوتونية لرقاقات الحمض DNA.

فإن بقيت دراسة الجينات والبروتينات إفرادياً أمراً مهماً، أصبح ممكناً وهاماً دراسة بنية المنظومات البيولوجية وديناميتها بمقاربات شمولية. وباعتبار أنّ الشّبكة الوراثية هي أكثر من تجميع جينات وبروتينات، فإنّ دراسة معمارية الوصلات لوحدها لا تسمح بفهم خواصها كلّها. فتطوّر المنظومة مع الزمن أمر هام أيضاً ودراسة دينامية تآثر المكوّنات ينبغي أن تدرس.

الشكل 1. جانبية لتعبير الجينوم الكامل لخميرة البيرة التي نحصل عليها برقاقة DNA. توافق كل رقطة جينة واحدة. الجينات المحرّضة (التي تعبيرها منشط في ظرف بيولوجي مفروض) بالأحمر. والجينات المكبوحة (التي تعبيرها مختزل) بالأخضر. والجينات اللامتغيرة بالأصفر.

الشكل 2. إن هذه الخريطة لا تزال غير كاملة تماماً هي على شكل "مخطط المترو" تفهرس مجموعة الجينات التي تشترك حتّى هذا اليوم في سرطنة الخلية و كذلك تأثراتها. ومن المحتمل أن تسمح الجينومية بأن تكتشف من هذه الجينات العديد غيرها، وظيفتها مجهولة حتى الآن. وأحد رهانات محاكاة الشبكات الجينية هو وضع هذه الجينات على هذه الشبكة وتحديد طبيعة تأثراتها مع بقية هذه الشبكة.

مبدآن أساسيان

إنّ فهم الشبكة الجينية (الوراثية) يقوم على مبدأين:

يتعلّق المبدأ الأوّل بتدفق المعلومة الوراثية، التي قوامها تحديد العلاقات القائمة من فضاء التتابع نحو فضاء الوظيفة. يحوي الجينوم المعلومات التي تسمح بتكوين "أشياء" معقّدة جداً... كالإنسان. وبعبارات المعلوماتية، إنّ تعقيد كائن حيّ متطوّر تماماً هو موجود في تعقيد جينومه، ولكن ماهي الكودات التي تترجم تتابعاً إلى بنية وإلى وظيفة؟ ينبغي أن تمثّل هذه الكودات بشكل مفهوم حتّى يمكن تطبيقها في تكوين النماذج. فالبيولوجيون يبحثون إذاً عن طرائق تسمح بإيجادها انطلاقاً من تتابع الجينات ومعطيات النشاط الحاصلة من رقاقات الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين.

وأما المبدأ الثاني فهو دراسة المنظومات الديناميّة المعقّدة. فما أن تتوضح معمارية حتى يصبح من الممكن دراسة ديناميتها، أي سلوك المنظومة مع الزمن في شروط متنوعة. ويُتَصدّى لهذه المسألة بقياس التغيرات الزمنيّة لتعبير الجينات. والهدف هو إمكانية التنبؤ بالجاذب لشبكة جينية، أيّ النمط الظاهري المستقر لخليّة، لتوجيه هذه الشبكة عند الاقتضاء نحو جاذب منتخب: لخليّة متسرطنة نحو خليّة حميدة، ولخليّة دبت فيها الشيخوخة نحو خليّة شابّة.

خمسة وسطاء ينبغي أخذها بالحسبان

بغية تحليل شبكة وراثية (جينية) تحليلاً دينامياً، يلزم استحداث نماذج. إنّ اختيار النموذج يتحدّد غالباً بالسّؤال الذي يحاول المجرب الإجابة عنه ومستوى التجريد الذي يمكن أن يقبل به. ثمة خمسة وسطاء ينبغي أخذها بالحسبان.

مستوى التفصيل الكيميائي الحيوي

يمكن أن تكون النماذج مجرّدة كثيراً، مثل شبكات بول[3] أو بالعكس حسيّة جداً، كنماذج التأثرات الكيميائية الحيوية الكاملة بواسطة وسطاء حركيّة. تسمح المقاربة الأولى بتحليل المنظومات كبيرة القدّ. وأمّا الثانية فهي على توافق أفضل والواقع الكيميائي البيولوجي، ولكنّها لشدة تعقيدها، تقتصر على دراسة المنظومات الصغيرة. فالحاجة تؤدي إلى اختراع طرائق تسمح بتناول عدد كبير من المعطيات بطريقة شمولية، على أن تحافظ على مستوى تفصيلي مقبول، بدون أن تصل إلى التفاعل الصحيح.

هل النموذج بولي أم مستمر؟

تنطلق نماذج بول من مبدأ مفاده أن الاستجابة لعملية تنشيط الجينات أو توهينها هي بتراء. غير أنّ تعبير الجينات يميل إلى أن يكون مستمراً بدلاً من أن يكون اثنينياً. أضف إلى ذلك، هناك مفاهيم لاغنى عنها لآليات تنظيم الجينات لا يمكن أن تتمثّل بمتغيرات بول. ومثال ذلك، التثبيط التراجعي[4] يثبّت شبكة بالسماح بمراقبة استتباب[5](اتزان بدني) بروتين أو جينة ويقلّل الحساسية تجاه المتغيرات الخارجية. غير أن التثبيط التراجعي في دارة بول، يؤدي إلى اهتزازات أكثر ممّا يؤدي إلى الاستقرار.

حتمي هو أم عشوائي؟

هناك افتراض ضمني حول النماذج المستمرّة وهو أن التأرجحات في جزيء وحيد يمكن إهمالها. ومع ذلك توجد في الشبكات الوراثية عدّة أمثلة تبيّن أنّ وجود نسخة واحدة من الحمض الريبي النووي RNA مرسل (RNAm) يمكن أن يؤدي دوراً أساسياً في بعض العمليّات البيولوجية فلا يمكن عندئذ أن ينمذج بنماذج حتمية صرفة. إنّ تحليل الوفرة والتقهقر في RNAm والبروتينات يمكن أن يسمح بتعرف هويّة الجينات التي من أجلها تبدو النمذجة العشوائية ضرورية.

البعد المكاني

يمكن أن يؤدّي البعد المكاني دوراً مهماً في مستوى التقسيم إلى حجيرات داخل الخليّة (نواة، سيتوبلازما، حبيبات خيطية غشاء)، لكن أيضاً في مستوى التأثرات بين الخلايا. إن معظم العمليات البيولوجيّة عند الكائنات الحيّة المتعدّدة الخلايا(أثناء التطوّر، مثلاً)، تتطلب تأثرات بين مختلف أنواع الخلايا. فمفهوم المكان يضيف مستوى من التعقيد هاماً جداً إلى النماذج. ثمّة بعض المعلومات يمكن استخلاصها من النماذج "اللامكانية"، لكن يلزم في حينه أن تستكشف المعلومات التي تشمل هذا البعد.

تيسّر المعطيات

النموذج البيولوجي الحصري ينبغي أن يأخذ بالحسبان تركيز الحمض الريبي النووي RNA وكذلك أيضاً تركيز البروتين، وتموضعه، إلخ...، لأن أيّ متغير جزيئي يحمل معلومة وحيدة حول سير العمل الخلوي. فالتحديدات التقنية في القياس تعقّد عمليّة الحصول على هذه المعلومات، حتى لو كانت القيود والإطناب في الشبكات البيولوجية قد توحي بإمكانية إدراك سير عمل منظومة بيولوجية بدون نمذجة الوسطاء كلّها. هذا ومن المهم أن ينجز في حينه تطوير أدوات مبتكرة للقياس المتآون مع صبيب عالٍ للوسطاء الجزيئية المنوّه بها أعلاه.

وطبعاً لن يَكون لمحاكاة الشبكات الوراثية أيّ معنى إلاّ إذا سمحت بالقيام بتنبؤات حول العمليات البيولوجية وتطور الأمراض، وأخيراً تطوير معالجات طبية فعّالة لصالح المرضى.

(3) إنها شبكة وراثية(جينية) تقوم على منطق بول الذي يسمح باختصار هائل للتأثرات بين الجينات. تعدّ أي جينة كمتغير اثنيني (1 لجينة عبرت، و1 لجينة في الحالة المعاكسة) تنظمه جينات أخرى وفق توابع بول.

(4) تثبيط طريق اصطناع استلايي بنتاجه النهائي.

(5) تثبيت مختلف المكوّنات الفيزيولوجية في كائن حي من حيث التركيب الكيميائي، والحرارة والحجم.

النمذجة الفوتونية لرقاقات الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين

ستيفان جيتان
مديرية البحث التقاني، مفوضية الطاقة الذرية، مركز غرونوبل

الملخص

في تصميم رقاقات DNA، يفرض تعقيد المعمارية الضوئيّة والكيميائية للّواقط طوراً هاماً في المحاكاة الرقمية حول تقنية التوسيم التفلوري.

الكلمات المفتاحية: رقاقة، الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين، التهجين، التفلور، التوسيم، الاستقطاب.

المؤطر: 2 **التفلور**

إن مبدأ التفلور بسيط ومفاده أن جُزيئاً (حامل التفلور fluorophore) يمتص فوتوناً بطاقة مفروضة وبعدئذ يعود الجزيء فيصدر على العموم بسرعة كبيرة فوتوناً بطاقة أقلّ. ويفسّر هذا الفقد في الطاقة بالاضطراب الحراري المحرّض أو أيضاً بتغير بنية الجزيء.

وعليه، يختلف لون ضوء الإصدار عن ضوء الإثارة: ممّا يسمح بالتوسيم، وذلك بالفصل بين هذين اللونين بجهاز ضوئي مناسب (يعدّ الموشور أبسط مثال على ذلك).

إنّ الكشف بالفلورة حساس جداً، إذ إنه مع التقدّم الذي جرى في هذه السنوات الأخيرة في مجال الكواشف ولوا قط الصّور، أمكن تمييز جزيء وحيد.

ولكن للأسف، التفلور حساس جداً لوسطاء، كالوسط الكيميائي لحوامل التفلور، التي يمكنها أن تطفيء التفلور (وغالباً ما تدعى هذه الظاهرة " الإطفاء "(quenching)) أو أن التعرض الشديد للضوء المثير يمكنه أن يخرب الواسمات (ظاهرة " التبييض الضوئي ").

يتمّ على رقاقات DNA (المؤطر1)، التعرف إلى تهجين طاقين متكاملين بالتوسيم[1] التفلوري (المؤطر2). هذه الطريقة في الكشف، حساسة جداً، وتُعتمد اعتماداً واسعاً في البيولوجيا والكيمياء التحليلية. وفي إطار التطوير التقني لرقاقات DNA، فإنّ القدرة على إعادة توليد الإشارات التي تولّدها الرقّط وكميّتها هي عامل ينبغي أخذه بالحسبان أثناء الطور الذي يتمّ فيه تصميم الرقاقة وعند قراءتها. ويكتسي هذا الاهتمام أهميّة كبرى، طالما أن تحليل كميّة الضوء المتفلور الذي تصدره كلّ من رقطات الرقاقة البيولوجية ينبغي أن يربط بعدد طيقان الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين التي تهجنت، بغية تحديد تعبير الجينات المطلوب تحليلها. ومع أنّ نموذجاً تحليلياً يسمح بفهم فيزياء المسألة، فإنّ تعقيد المعمارية الضوئية والكيميائية للّواقط المطلوب تصميمها يفرض طوراً هاماً في المحاكاة الرقمية.

(المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية؟). وتأخذ هذه معلوماتها من حملات القياس التي تجرى بأدوات نوعيّة للحصول على نتائج موثوقة، محسوسة وتنتج بصورة صناعية.

نموذج تحليلي لفهم التوجيهات

إن المقصود هنا نمذجة بالأسلوب الأبسط والأكثر ملاءمة سلوك التفلور على سطوح مستوية مكوّنة من ركازة (صفيحة مجهر، رقاقة [2] من السليسيوم) يمكن أن تغطّى بطبقات رقيقة معدنيّة (أكسيد السليسيوم مثلاً) أو عضويّة. تهدف هذه الطبقات بخاصة إلى تأمين تطعيم الحمض الريبي النووي المنقوص الأكسجين تطعيماً جيداً على سطح "الرقاقة البيولوجية".

(1) إضافة زمرة كيميائية أو ذرة مشعة إلى جزيء من أجل تتبعها وتحديد موضعها بمساعدة هذا الواسم.

(2) شريحة من مادة (وهي غالباً من السليسيوم) تعد فيها، قبل أن تقطع، الدارات المدمجة ومكوّنات أخرى وأجهزة مكروية إلكترونية.

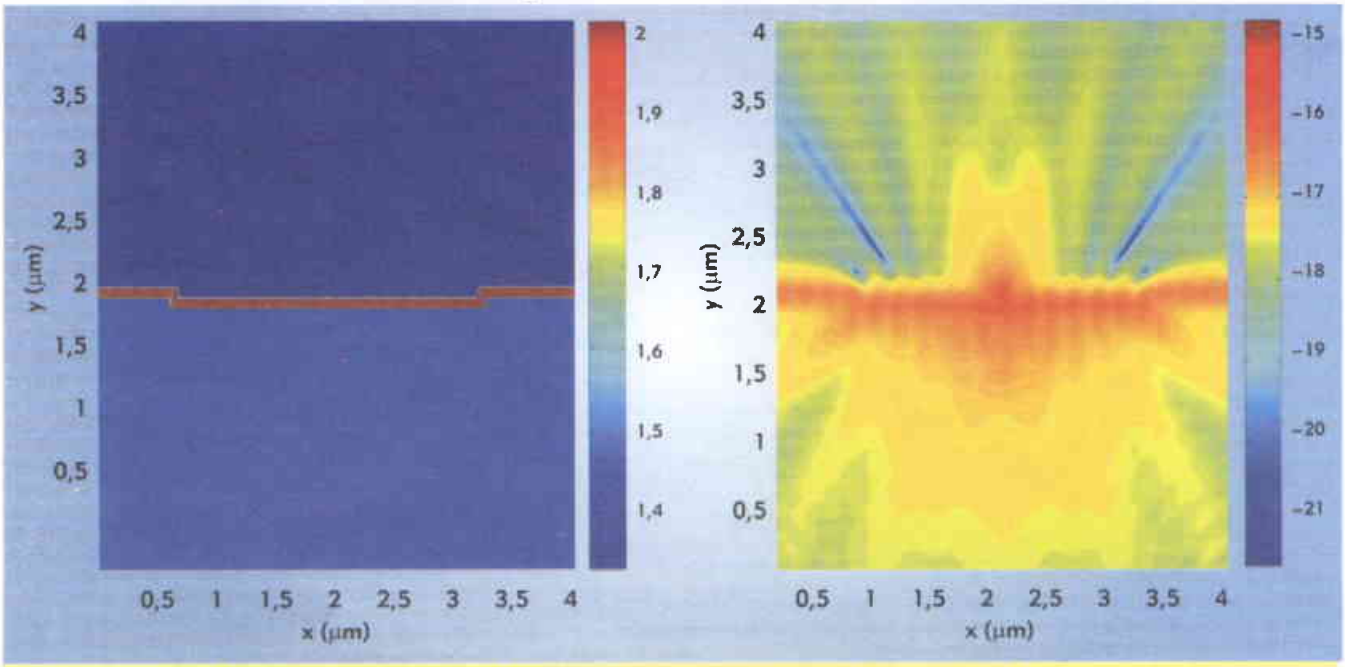
والهدف هو تحديد الوسطاء التي تتدخّل في المرتبة الأولى في السلوكية الضوئية للرقاقات البيولوجية. فلهذه الغاية، تُشبَّه المواد المفلورة (حاملات التفلور) (المؤطران 1 و 2) بمنابع ضوئية صغيرة تتمتع بخاصية توجيه خاص لثنائيات القطب. والضوء الذي يثير واسم التفلور يحرّض اهتزازة غيمة إلكترونية، واتجاه هذه الاهتزازة تفرضه البنية الذّرية للجزيء. ويُدرس الترابط بين المنبع والسطح بطريقة تحليلية وفق صيغ تستند إلى مقاربة كهرطيسية للإشعاع الضوئي: يمكن أن نشبّه ثنائي القطب بهوائي يبثّ بجوار سطح الأرض، كما كان يفعل الفيزيائي الألماني أرنولد سومّرفلد، منذ 90 سنة.

لقد سمحت هذه الدراسة التمهيدية للباحثين بفك ترابط ظواهر إصدار الضوء، المرتبطة بالميّزات الضوئيّة والهندسيّة للرقاقة البيولوجية، عن المفاعيل المرتبطة بمحيطها الكيميائي والبيولوجي. وقد تأكد ذلك تجريبياً بملاحظة الإشارات التي تصدرها الرقاقات البيولوجية المحضّرة على الزجاج أو السليسيوم.

التفلور بجوار موادّ عديدة على سطوح مركّبة تتطلّب مقاربة رقمية، إضافة إلى كونها معقدة. ولتلبية هذه الحاجة، أنجز باحثو مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية أداة محاكاة تسمح بإجراء الموازنة الفوتونية لرقاقة بيولوجية: فقد أتمّوا بدون تقريب حلّ معادلات الكهرطيسية التي تصف تأثر حامل الفلورة، الذي يشبّه لثنائي القطب، مع بيئة ما.

تطبيق على حالة تقانية محسوسة

إحدى التطبيقات الهامّة لهذه الأداة كانت نمذجة سلوك التفلور على الرقاقات البيولوجية من نوع المسح الضوئي lightscan التي طورتها شركة بيوميريو bio Mérieux بالاشتراك مع مختبر الإلكترونيات وتقنية الأجهزة ـ غرونوبل (Leti). تهدف هذه المنظومة إلى تحقيق قارئة لرقاقة بيولوجية .....، قارئة القرص المدمج، يسمح هذا الحلّ بخفض التكلفة بنسبة 5 إلى 10 مرات من تكلفة جهاز تقليدي. وكما هو حال القرص المتراص، فعلى الرقاقات البيولوجية أن تنطوي على مسالك مرسومة كي تؤمّن تموضعاً دقيقاً جداً لرأس القارئة أثناء



الشكل 1- تحليل التفلور الصادر عن مسلك المسح الضوئي. يبين الشكل الموجود إلى اليسار شدة الضوء الفلوري (السلّم لوغريتمي) في البنية التي هندستها ممثلة إلى اليمين.

التنبؤ بالإشارات على منظومات معقدة

يسعى التطوير التقاني للرقاقات البيولوجية، على نحو يتأكد أكثر فأكثر، نحو منظومات مكروية معقّدة . ويفرض ذلك طلباً متزايداً على النمنمة، ودمج الوظائفية مثل عنونة الرقط بترانزستورات CMOS[3] (تقانة ميكام TM). إنّ فهم إشارات التفلور والتنبؤ بها على هذه المكوّنات يصبح مَهمّة أكثر دقّة ممّا هي عليه في حالة الرقاقات التقليديّة. إنّ دراسة مميّزات انتقالها. وهكذا حلل رجال العلم سلوك التفلور على مسالك هذه الرقاقات البيولوجية التي تبدي بنية الزجاج (بعمق عدّة عشرات النانومتر وعرض عدة مكرومتر)، حيث توضع عليها

(3) على رقاقات بيولوجية من نوع ميكام (TM)، تربط كل رقطة بترانزستور CMOS (دارة مدمجة بكثافة عالية تعتمد في الوقت نفسه على ترانزستورات من النوع N والنوع P التي لا تسمح عمليا باستهلاك طاقة باستثناء طاقة التبديلات). وهكذا يمكن تنشيطها، ويمكن بظاهرة قريبة من تفاعل الإيداع الكهربائي، وضع طيقان DNA المرغوب فيها بأسلوب نوعي على هذه الرقط.

طبقة رقيقة ثخانتها عشرات النانومتر(الشكل 1). وتسمح المحاكاة الفوتونية بإيضاح أن الضوء الذي تصدره الفلورة مأسور في الطبقة الرقيقة على شكل أمواج موجّهة (كما هو الحال في الألياف الضوئية)، وحرّ جزئياً في مستوى البنى.

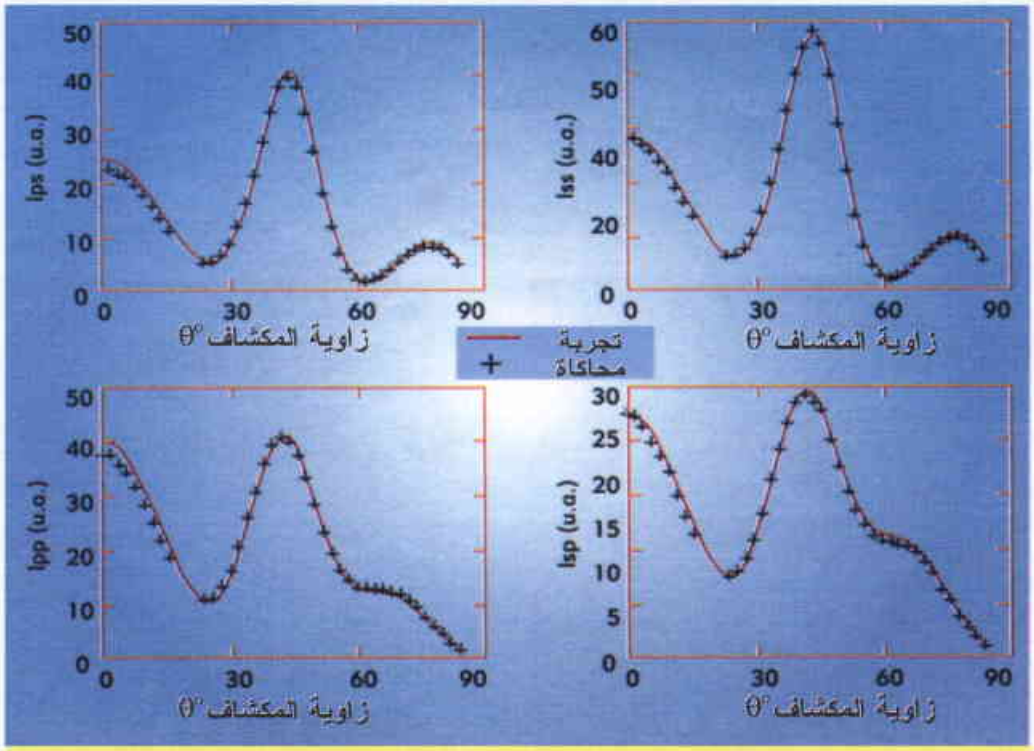
مقاربة تجريبية لا غنى عنها

ليس بإمكان النمذجة وحدها أن تضمن السيطرة على الطرائق التقانية. فلا بدّ من توصيف النتائج بأداة قياسية مخصّصة. إنّ تطوير مقياس الزوايا التفلوري[4] سمح والحالة هذه بإقرار صلاحية أعمال المحاكاة (الشكل2). إن الفحص النقدي للمؤشرات المقيسة بالفلورة، مع الأخذ بالحسبان مفاعيل استقطاب[5] الضوء، سمح بإقحام المقاربة التحليلية وبتحسينٍ النمذجة. ويمتلك الباحثون في الوقت الحاضر برنامجاً للتميز الضوئي يجعلهم جديرين بالنظر في مقاربة كمية واقتراح معايير للتفلور.

ويبقى عليهم الأخذ بالحسبان ظواهر الترابط الطاقي بين حامل التفلور والإشعاع الوارد، وكذلك أيضاً ظواهر بيئية "كالتبييض الضوئي" (الإطفاء)، (المؤطر 2).

(4) مقياس الزوايا التفلوري (تسمية جديدة) يسمح بتحديد شدة الضوء المفلور باتجاه مفروض في المكان. هذا الجهاز الذي طور في مختبر الالكترونيات وتقنية الأجهزة (LETI) التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية يسمح أيضاً بتحليل حالة استقطاب الضوء التفلوري.

(5) تسمح نظرية الاستقطاب بوصف اتجاه (من حيث السعة والتغيرات الزمنية) شعاع الحقل الكهرباني الذي يصف اهتزازة ضوئية. وفي حالة التفلور، تسمح دراسة استقطاب الضوء بتحليل الظواهر كتغير بنية الجزيء بين الاثارة وإعادة اصدار الضوء.



الشكل2- مقارنة بين النظرية والتجربة لشدة الإضاءة التي تصدرها الرقاقات البيولوجية للحمض DNA (المنفذة على ركازة من السليسيوم تحوي طبقة رقيقة من السيليس ثخانتها عدّة مئات من النانومتر) بدلالة زاوية القياس. توافق المنحنيات تحليل استقطاب الضوء الفلوري وفق اتجاهين اثنين متعامدين ("s" و"p") بعد إضاءة الرقاقة البيولوجية بضوء مستقطب خطياً وفق هذين الاتجاهين.

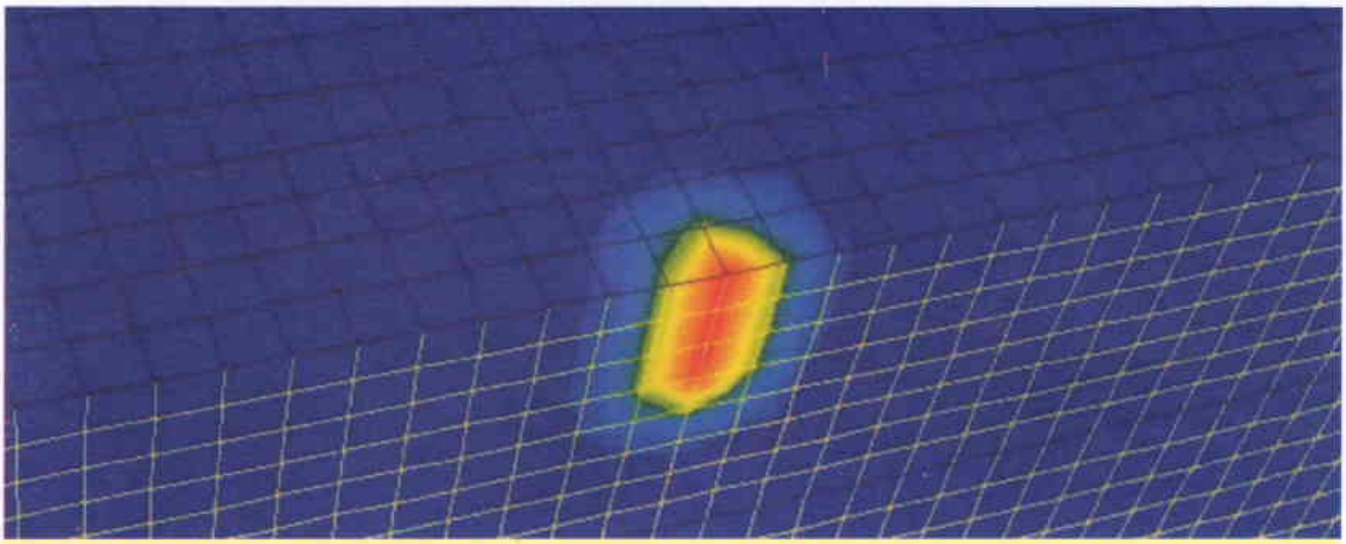
اللّحـــام الافتراضـي

أ. فونت
مديرية البحوث التقانية – مفوضية الطاقة الذرّية – ساكلي
إ. لوجيل
مديرية الطاقة النووية – مفوضية الطاقة الذرّية – كاداراش
إ. لاريوت
مديرية التطبيقات العسكرية – مفوضية الطاقة الذرّية – فالدوك
هـ. بورليه
مديرية الأبحاث التقانية – مفوضية الطاقة الذرّية – مركز غرونوبل

مُلخّص

لقد تحقق أنّ المُحاكاة الرقمية وسيلة فعّالة للسيطرة على المفاعيل الأساسيّة لعمليّة اللحام والتأكّد من وُثوقيّة الالتحامات. وكي تكون المحاكاة تنبُّئية، ينبغي لها أن تُنَمْذِج، بطريقة مبسطة لكنّها مُلائمة، التآثرات بين فيزياء العملية وسلوك مغطس اللحام والمفاعيل الحرارية والتعدين وميكانيكية طريقة المعالجة.

الكلمات المفتاحية: لحام، فولاذ أوستنيتي، رصّ تضاغطي ساخن.



المحاكاة بالكود Fluent لتوزّع درجة الحرارة، المنمذج بالأبعاد الثلاثة، بعد تأثير نَبْضة الليزر Nd:YAG من النوع النَبْضي أثناء تحقيق خط انصهار في مركز صفيحة من الفولاذ عديم التأكسد الأوستنيتي.

نماذج بسيطة لكنها ضروريّة

تُعَدُّ الوصلات الملتحمة، لأكثر من سبب، كنقاط قادرة على تكوين نقاط ضعف بنيوية، على مدى عمر أحد المكونات الملتحمة ميكانيكياً. وهذا مهما تكن طريقة اللحام، سواء أكانت تثيرالانصهار الموضعي والفجائي "للوصلة" (بلهب الحملاج، أو بالقوس الكهربائي أو بحزمة ليزرية عالية الطاقة المركزة أو بمدفع إلكترونات) أم كانت تنقل المادّة إلى السطح البيني بالانتثار الذرّي (في درجة حرارة عالية وتحت ضغط عالٍ).

إنّ خُصوصيّة الوصلات الملتحمة، هي في المقام الأوّل، فيزيائية كيميائية: إنّ التسخين، القصير جداً إلى درجة حرارة عالية وغالباً إلى درجة الانصهار، يُغيِّر ترتيب المادة ضمن فتيل الالتحام وفي بيئته المباشرة، على عرض عدّة مليمترات فقط. وإنّ وجود أيضاً المنطقة المُنصهرة نفسه هو أصل التغيّرات الجذرية للحالة الداخلية للتجميع. فمن جهة أولى، يُؤدّي تصلّب هذه المنطقة إلى توليد بنية مجهريّة خاصة، تتميّز عن البنية المجهرية الأوّلية؛ ومن جهة أخرى، يُدخل "التقلّص" البُعْدي للحام إجهادات وتشوهات متبقية. ويتأتّى هذا الفعل الميكانيكي في الأساس من تفاوت معاملات التمدد الحراريّ بين الأطوار المتواجَهة، بخاصة بين الطورين السائل والصلب. وإن لم يتم إرخاء الإجهادات المُتبقّية عن اللحام بمعالجة حراريّة أو ميكانيكيّة فإنها، تتراكم مع الإجهادات المرتبطة بالعمل ويمكنها

عندئذٍ أن تُسرّع تَضرُّر المُكوّن. وهناك نتيجة أخرى، هي أنّ التشوّهات المُركّزة هي الأخرى حول الوصلة يُمكنها التسبّب في انتقالات على مُستوى المكوّن بكامله وتغيير مُميِّزاته البُعْدية. وأخيراً، يمكن أن يُسبّب اللحام عيوباً في شكل الفتيل أو شقوقاً أو تجويفات في داخله. وهذا القدر من العيوب قد يحدّ من المقاومة الميكانيكية للمجموعة.

وفي معظم الحالات، لا تشكل هذه الصعوبات عائقاً كابحاً يمنع من تطبيق عمليات اللحام. ففي صناعة النحاسة التقليديّة يُزيلها الحِرَفيّ الذي يتبع قواعد فَنّ المهنة. أما في الصناعة المتقدمة، والنوويّة بخاصة، فإنّ الأخطار المرتبطة باللحام هي موضوع لمعالجات خاصة. فبدءاً من طور التصميم، تأخذ الكودات البعدية بعين الاعتبار معامل الوصل المُطبق على الوصلات. وثمّة اختبارات حول إحكام الصنْع تشكل بعدئذٍ طوراً لا يمكن تجاهله، طويلاً ومُكلفاً. و يحصل هذا خصوصاً عندما يتمكن استمثال الأسلوب العملياتي أن يفرض إعادة النظر في تصميم البنية بتبنّي رسم الوصلات وأبعاد القطع. وأخيراً هناك مُراقبات لاتخريبية (CND) تُفرض على الالتحامات التي تُعدُّ حرجة بعد الصنع، وعند الاقتضاء، أثناء وضعها في الخدمة.

إنّ المحاكاة الرقمية للّحام يمكنها أن تقدِّم دعماً ثميناً للسيطرة على المفاعيل الأساسيّة للعملية ولموثوقية الالتحامات (المؤطر A، ماهي المحاكاة الرقمية؟). فأين الرهان العلميّ والتقاني؟ إنّه في تزويدنا بنتائج تنبئية وهذا مايفرض أن ينظر بطريقة مبسطة إلى التأثرات بين فيزياء العمليّة، وسلوك المائع في مغطس اللحام، والمفاعيل الحراريّة، والتعدين والميكانيك. فالتطويرات تتعلّق خاصة بنماذج التأثر بين العمليّة والقطعة (نقل الحرارة والمادّة)، و قوانين السلوكية الميكانيكية والتعدينية للمواد أثناء اللحام، وكذلك طرائق استعمال الآلات التي تسمح بالإقرار بصلاحية هذه النماذج.

تحديد مواضع الإجهادات المتبقيّة

إنّ كودات البُعْديّة الميكانيكيّة للمكونات المصنوعة من الفولاذ للصناعة النوويّة تُطبَّق مُنْذ مرحلة تصميم محطة التوليد لكي تجتنب مسائل الكلال والكلال ـ البطيء[1] والتشوّه (المتدرّج أوالمفْرط). وهذه الكودات، التي تُؤسس على التحاليل المرنة للإجهادات التي تولّدها الحمولات المختلفة أثناء التشغيل، تفرض هوامش متحفّظة جداً تتعلّق بخطر التشقق. وعلى الرغم من هذا الاحتياط، ثمّة عيوب قد تظهر في جوار الالتحامات، بسبب تحميل طارىء أو معرفة غير كافية بسلوكيات المواد. فلتفسير ظهور العيب والتنبؤ بتطوّره بين تفتيشين، يصبح من الضروري تطبيق نماذج دقيقة للتضرّر وأن تؤخذ بالحسبان الإجهادات المتبقية التي تأتي بها عملية التجميع. في الواقع، يمكن أن يُشكّل الالتحام في هذه الحالة زُرَيْدة ضعيفة، حتى ولو اعتبرتها المُراقبات اللاتخريبية CND سليمة. ويُعزى ضعفها إلى حالة إجهاداتها المتبقية وإلى حالة تطريق[2] المعادن المتولّدة أثناء طور التبريد بعد اللحام.

إن التحميلات أثناء التشغيل تنضم إلى هذه الحالة الابتدائية من الإجهادات، لذلك ينبغي أن يؤخذ بالحسبان تراكمها للتنبؤ بحالة المعدن مع الكلال والكلال البطيء والتآكل تحت الإجهاد. وبالموازاة، إنّ تطريق الفولاذ يمكنه تسريع هذا التضرّر، سواء بإثارته "هشاشة" في المادة أو بزيادة الفرق بين المميّزات الميكانيكية للمعدن الأساسي ومعدن الالتحام. و يمكن أن تؤدّي هذه الظاهرة الأخيرة إلى تركيز التشوهات في هذا أو في ذاك.

تتطلب محاكاة الإجهادات والتشوهات المتبقّية من اللحام حداً أدنى من المعطيات: السلوكيات الحراريّة والميكانيكية للمادة ينبغي أن توصف حتّى درجة الانصهار، ومن الضروري معرفة تطور المنبع الحراري معرفة تامة في المكان والزمان. أضف إلى ذلك، أن علينا ألا نجهل شيئاً عن مختلف مواضع مرور الالتحامات وتتابع الترسبات، وينبغي أن تُفرض الشروط الجيّدة على القيم الحدّية الحرارية والميكانيكية. وإن إعادة التثبيت بمساعدة المعطيات التجريبية كأبعاد المناطق المنصهرة، وعند الاقتضاء، تبقى درجة الحرارة أثناء اللحام أمراً لا بدّ منه.

وهكذا تسمح المحاكيات بمقارنة طرائق مختلفة وفق بعض المعايير مثل المستويات العظمى التي بلغتها الإجهادات المتبقية أو التطريق، كما تسمح بتقدير أثر تغيّر ما في الشروط العملانية. وهكذا فقد سمحت دراسة رقمية مسبقة، من أجل تصليحات مولّدات البخار في مفاعل فينكس phenix، باستمثال عملية اللحام لتخفيض الإجهادات والتشوهات المتبقية إلى أدنى حد، وهي التي يُرتاب في أنها تُسرّع بشدة عمليات التضرّر (الشكل 1).

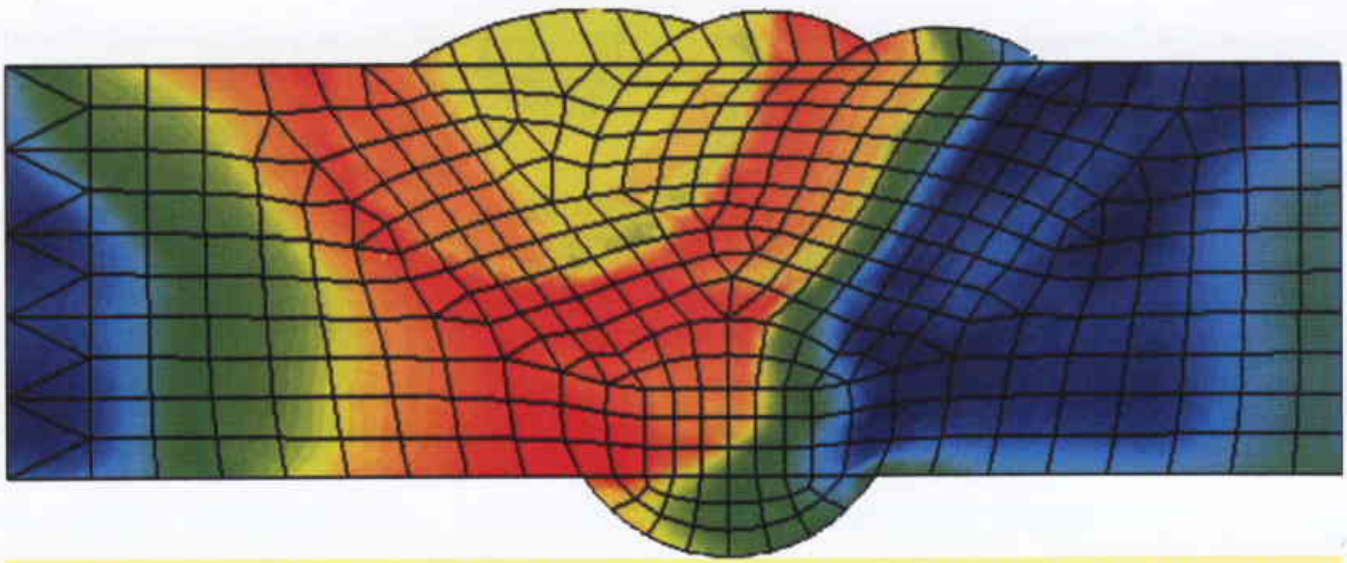
إن الرهان للسنوات القادمة هو في متابعة تحسين النماذج، وبخاصة لحاجات مفاعلات المستقبل، عن طريق الاهتمام بمواد يمكنها أن تُبدي تحولات في الطور في الدرجات العالية من الحرارة.

المحاكاة الحرارية الملائمة، مرحلة لا غنى عنها

إنّ الحاجة إلى المحاكاة الرقمية، في حالة اللحام بالليزر Nd:YAG بالنقط، يعود أصلها إلى الرغبة في معرفة التجميعات

(1) تشوّه غير عكوس لمادة تخضع لإجهاد ميكانيكي.
(2) شُغل المعدن في درجة حرارة أخفض من درجة حرارة إحمائه.

هيئة الطاقة الذرية السورية مكتب نظم المعلومات http://serversmiso.aecs.sy



الشكل 1- نمذجة بالكود كاستيم Castem 2000 ذي العناصر المنتهية لتوزّع الإجهادات من نوع فون ميسس Von Mises بعد عملية اللحام، بالقوس الكهربائي (TIG) الدائري، لأنبوبين عديمي التأكسد من النوع الأوستنيتي لمولّد البخار في مفاعل فينيكس، قد تحققت بعد دورات خمس. شوهدت الإجهادات الأشد عند سفح الدورة الأولى.

التي نُفّذت بهذه الطريقة في مركز مفوضية الطاقة الذريّة في فالدوك، معرفة أفضل. وفي الواقع ينبغي لهذه التجميعات أنْ تحقق بعض الخصائص النوعيّة من حيث حجم العيوب (الفقاعات) والتشوهات المقبولة والوضع الميكانيكي.

يستند هذا المبدأ في اللحام إلى صهر المادة محلياً في نقطة سقوط الحزمة. إن مدة نبضة الليزر هي عشر ملّي ثانية تقريباً، وتواتر الرمْي هو بضعة هرتز. إن تغطية جُزئية لنقاط اللحام تؤمّن استمرار الفتيل، الذي عرضه وعمقه هما بضعة مليمترات وسطياً.

لقد أثبتت إمكانية محاكاة هذا النوع من اللحام. وقد استَوجبت المقاربة الحرارية في النظام الانتقالي تطوير برنامج فرعي في برمجية Fluent v.6 يستخدم طريقة الحجوم المنتهية. وبذلك يمكن إدخال وسطاء الطريقة في المحاكاة كخطوة السبق وطاقة حزمة الليزر، ومدّة دوام النبضات وتواترها. وجرت معالجة التبادلات الحرارية بالحَمْل الطبيعي وبالإشعاع. ونُفّذت محاكاة إيداع الطاقة التي تجلب أثناء اللحام تجريبياً بتدفق طاقة حجمية مفروض أثناء كُلّ نبضة. ويستند الإقرار بصلاحية هذا النموذج إلى التنبؤ بحجم المنطقة المنصهرة وأيضاً إلى التحقيق التجريبي لخط انصهار في مركز صفيحة من الفولاذ المقاوم للصدأ أوستنيتي[3] (الرسم الإيضاحي). ومع ذلك، ينبغي أن نتذكّر صعوبة قياس درجة الحرارة قياساً صحيحاً بسبب شدة التدرجات الحرارية المتولدة ولصغر مساحة المنطقة المتأثرة. وقد تمّ تنفيذ خطة تجريبية تهدف إلى تحديد العلاقة بين شكل المغطس المنصهر ووسطاء العملية

[3] فولاذ يتميز ببنية (تجميع ذرات) مكعبة مركزية الوجوه.

وتحديد كمية تأثير هذه الوسطاء وترابطاتها المحتملة (راجع النمذجة السلوكية). تُشكّل النتائج قاعدة للإقرار بصلاحية النمذجة.

إنّ غرض هذه المقاربة الحرارية الصرفة هو التوصل إلى معالجة الجوانب الترموميكانيكية على التوالي. وفي مرحلة لاحقة تُؤخذ بالحسبان أيضاً ظواهر ترموديناميكية السوائل. وتتطلب نمذجة أكثر فيزيائية توصيف نشوء الخاصة الشعَّرية keyhole المتولدة في المغطس المنصهر أثناء نبضة الليزر والذي يُشكل انغلاقه مصدر بعض العيوب (الفقاعات).

التنبؤ بظهور عيوب أثناء اللحام

إنّ الخطر في تشقق الفتيل أثناء اللحام مرتبط خاصة بتركيبة الفروق الطفيفة المستعملة وبشدّة التشوه الذي يفرضه تقلّص التصلب. ولما كان ظهور هذا العيب يُصعّب التنبؤ تجريبياً؛ تأمل الصناعة في التمكّن من السيطرة على هذا الخطر بالمحاكاة الرقمية لعمليّة اللحام.

ثمّة معيار ترموميكانيكي موضعي لإطلاق التشقق طُوّر في مركز مفوضية الطاقة الذريّة بساكلي. فدُرست شروط التشقق عن طريق اختبار "قابلية الالتحام" الذي يسمح بقَسْر ظهور العيب في مادة عندها استعداد للتشقق على نحو خاص، هي فولاذ لا يتأكسد أوستنيتي. يرتكز هذا الاختبار الذي يُدعى (المُتغير المُقيّد) على تعريض المادة للثني أثناء تحقيق خط انصهار بطريقة TIG (التنغستين غاز خامل). بعدئذ تميّز العيوب الحاصلة وفق كميتها وطولها. ولما كانت إمكانيات استخدام الأدورات موضعياً محدودة، تُكمّل النتائج التجريبية بمحاكاة رقمية لشروط الاختبار الميكانيكية الحرارية. ولكن،

المحاكاة الميكانيكية الواقعية للاختبار تتطلب استخدام قانون سلوك ملائم، في مجال من درجات الحرارة يمتد ما بين درجة حرارة الوسط المحيط ودرجة حرارة الانصهار (1400°C تقريباً). وعليه تُجرى حملة للتوصيف الميكانيكي بانتقاء قيم وسرع للتشوه وتمثل ما تعانيه المادة أثناء هذه الاختبارات. وتسمح النتائج، التي تؤخذ من اختبارات الشدّ والانضغاط، بكتابة قانون سلوك من نـوع اللدن - البلاستيك اللزج موحّداً حتى 1200°C، وبعدئذ يُستقرأ خارجياً وفق سلوك البلاستيك اللزج حتى منطقة الانصهار (الشكل 2).

وتسمح المحاكاة الترموميكانيكية بواسطة كود بالعناصر المنتهية، أباكوس Abaqus، بتفسير الملاحظات والقياسات. وتؤدي المقابلة بين النتائج التجريبية والرقمية إلى اقتراح معيار ترموميكانيكي لإطلاق التشقّق أثناء التصلب، الذي تكون تنبؤاته على اتفاق جيد مع الملاحظات المأخوذة عن الاختبارات (المتغير المقيّد وغيره).

اللحام بدون انصهار في الدرجة 1000°C وتحت ضغط 1000 بار

المحاكاة الرقمية تخص أيضاً اللحام - الانتشار تحت الرصّ التضاغطي بالتسخين CIC، الذي يسمح بتجميع قطع بأشكال هندسية معقّدة جداً. في هذه التقنية توضع العناصر المختلفة في حاوية مخلّاة، ملحومة، وموضوعة أخيراً في

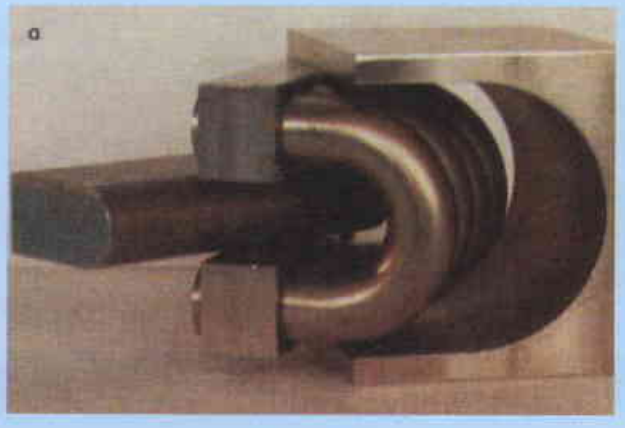
المؤطر

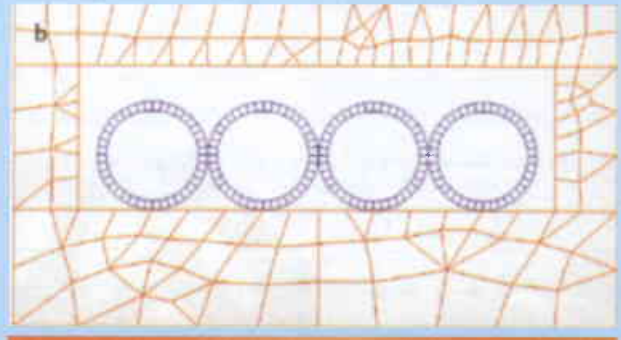
ما يمكن أن تتنبأ به مُحاكاة الرصّ التضاغطي بالتسخين

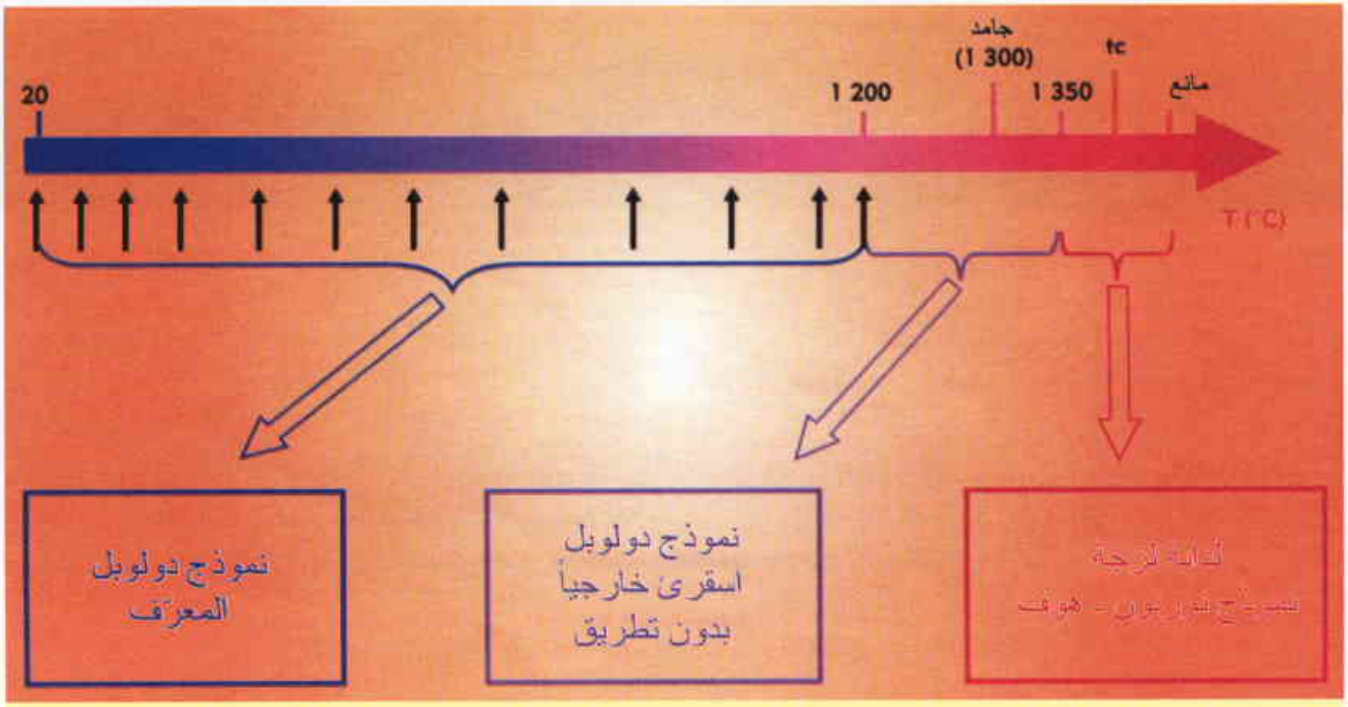
إنّ المحاكاة الرقمية لعملية اللحام بالانتشار بفعل الرصّ التضاغطي بالتسخين CIC تتيح خاصة التنبؤ بالتطورات البُعْديّة أثناء دورة التحميل بالحرارة والضغط لتجميع من القطع المنُفّذ وفق هذه التقنية.

إن إحدى خصائص هذه التقنية الأخيرة تستند في الواقع إلى الصعوبة بالتنبؤ باقتراب مختلف المكوّنات بعضها من بعض، أي الطريقة التي وفقها ستتحرك القطع المراد تجميعها (مثال: الشكل a) الواحدة بالنسبة إلى الأخرى، وتتشوه لتسعى إلى ملء الفراغات التي لا مَفرّ منها. فتشبيك مقطع قطعة معقّدة (الشكل b) يأخذ بالحسبان هذه الفراغات. هذا ويمكن أن يحدث نوعان من الجريان في القطعة. الجريان الأول، وهو المطلوب، يتضمن تمدّد الأنابيب المرتبط بجريان الغاز بداخلها حتى تتلامس فيما بينها وتمسّ الصفائح العلوية والجانبية وتلتحم عندئذ وإيّاها. أما الجريان الثاني، وهو غير المرغوب فيه، فيتضمّن انحناء الصفيحة العُليا.

تُبيّن المحاكاة الرقمية لارتفاع درجة الحرارة والضغط في هذه القطعة أن الانحناء هام وأنّ الدورة المختارة لا تسمح بسد المسافات الأخيرة. ويقارن حقل التشوّه اللدن (البلاستيكي) بصورة مأخوذة للتجميع المقطوع بعد عملية الرصّ التضاغطي بالتسخين (الشكل c). وأظهرت المقارنة أن النموذج يتنبأ تنبؤاً صحيحاً بالحركات النسبية للمكوّنات الحقيقية. وبعد أن تمَّ الإقرار بصلاحيته، سمح النموذج بتحديد سماكات الصفيحة ودورة CIC الضرورية للحام هذا التجميع بشكل مناسب.







الشكل 2- إن التنبؤ بالمفاعيل الميكانيكية لعملية اللحام يمر بتوصيف سلوك المادة توصيفاً ملائماً في مجال من درجة الحرارة ممتد كثيراً. أما هنا، في حالة فولاذ عديم التأكسد أوستنيتي، فثمة قانون لسلوك لدن بلاستيك لزج، المعرّف حتى الدرجة 1200°C، والذي استقرئ خارجياً إلى منطقة الاستحالة من الصلب إلى السائل.

حَيِّز الرصّ CIC. ويحصل لحام السطوح المختلفة في الحالة الصلبة، بفضل تطبيق متآون لدرجة حرارة مرتفعة (بين 80 و 85% من درجة حرارة الانصهار) وضغط شديد (1000–1500 بار). وهذه الطريقة القابلة للتكرار، طالما كان منبع الحرارة مسيطراً عليه، تناسب المحاكاة الرقمية بصورة طبيعية. والتنبؤات بالإجهادات المتبقية التي تظهر أثناء تبريد القطعة الملحومة تستعمل المعادلات المستخدمة تقليدياً للحام الذي يقتضي انصهاراً موضعياً، علماً بأن إدارة الطور المائع والتصلب قد ألغيا هنا. وتنشأ الإجهادات من وجود تدرج حراري في القطَع و/أو وجود بيانات في معامل التمدد بين المواد المجمّعة. تتطلب المحاكاة نماذج ترموميكانيكية متعددة المواد مع مراعاة ما قد يحصل من تغيّر في الطور في الحالة الصلبة والتعديلات في الخواص الموضعية (المؤطر). وكما هو الحال في الأمثلة السابقة، فإن المحاكاة تسمح في النهاية باختيار الأمثل في عملية اللحام.

استمثال المبادلات الحرارية المتراصّة بالمحاكاة الرقمية

ب. بيير مرسييه، ب. باتريس توشون
مجموعة البحث حول المبادلات الحرارية "غريث"
مديرية البحث التقاني في مركز مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية في غرونوبل.

ملخص

في مجال التبادلات الحرارية، يُتابع الباحثون الدراسة الأساسية للآليات التي تحكم الجريانات الاضطرابية، وهي قاطعة جازمة لكنها ما تزال غير موضّحة إلاّ جزئياً، بينما يطالب الصناعيون بتطويرات تقانية تكون على الدوام أحسن أداءً. وعند تقاطع هذه الاهتمامات تلعب أدوات المحاكاة دوراً رئيساً.

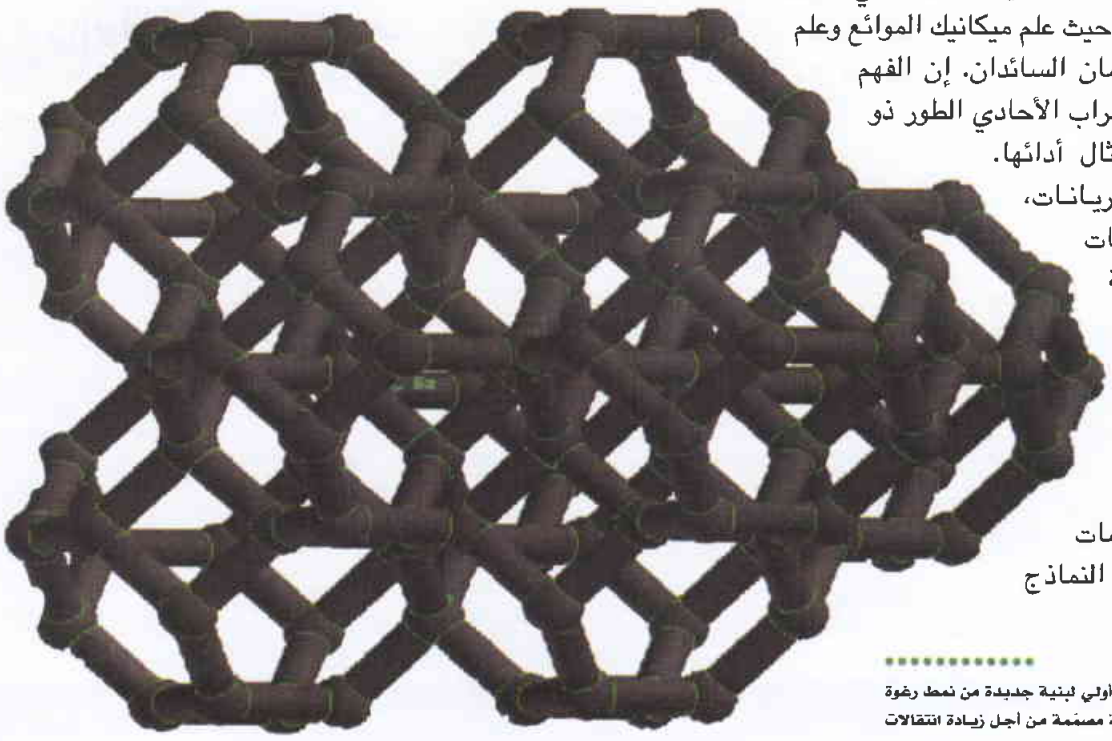
الكلمات المفتاحية: مبادلات حرارية، محاكاة رقمية، جريان اضطرابي.

الاضطراب في قلب المشكلة

إنّ جعل الجريان مضطرباً هو الطريقة الفضلى لزيادة انتقال الحرارة بين مائع وجدار. ولذلك توجد الجريانات الاضطرابية (المؤطّر F نمذجة ومحاكاة الجريانات الاضطرابية) في معظم العمليات الصناعية وخاصة في مجالات المبادلات الحرارية، حيث علم ميكانيك الموائع وعلم الانتقالات هما العلمان السائدان. إن الفهم الجيد لآليات الاضطراب الأحادي الطور ذو أهمية بالغة لاستمثال أدائها.

تتّصف هذه الجريانات، بطبيعتها، بصفات بارزة جداً: صفة تأرجحية ومظهر ثلاثي الأبعاد وطيف واسع للطاقة. تسهم هذه المظاهر الثلاثة في زيادة صعوبة القياسات التجريبيّة وتعميم النماذج الفيزيائية (المؤطّر A ما هي المحاكاة الرقمية؟).

وبالإجمال هناك وجهتا نظر تتعارضان: وجهة نظر المتخصّصين في ميكانيك الموائع ووجهة نظر الصناعيين. فالأولون يؤكّدون، بحقّ، أنّ الآليات التي تحكم الجريانات



نموذج أولي لبنية جديدة من نمط رغوة معدنية مصمّمة من أجل زيادة انتقالات الحرارة.

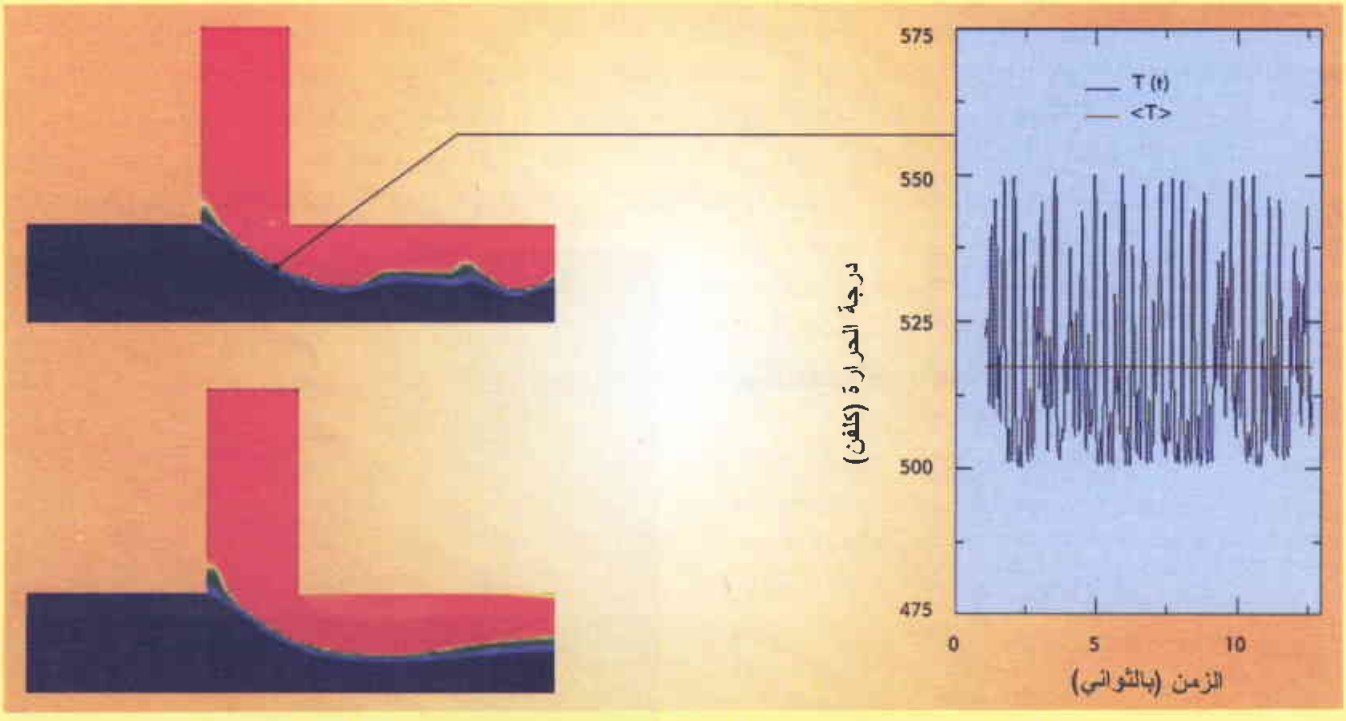
المؤطر F

نمذجة ومحاكاة الجريانات الاضطرابية

ينتشر الاضطراب، أو هيجان الجريان المسمّى الجريان المضطرب، في أغلب الجريانات التي تتحكّم في بيئتنا المباشرة (الأنهار والمحيطات والجو). فهو يتكشف أيضاً كوسيط (بارامتر) إن لم يكن محدّداً للحجم في عدد كبير من الجريانات الصناعية (المرتبطة بإنتاج أو تحويل الطاقة أو بالتحريك الهوائي.....). وليس مدهشاً إذن أن يبدأ بذل جهود تهدف إلى التنبؤ به - وإن كان لا يزال غير دقيق - وخاصة عندما يكون مرتبطاً بظواهر تجعله معقّداً: تنضّد واحتراق ووجود عدة أطوار... . ومن المفارقات وحتى إن أمكن استباق الطبيعة الاضطرابية لأحد الجريانات واستخلاص بعض الخصائص المشتركة والعامة ظاهرياً لهذه الجريانات الاضطرابية من الناحية النظرية[1]، يبقى التنبؤ بها حرجاً في حالات محدّدة. وهذا التنبؤ في الواقع يجب أن يأخذ بالحسبان أهمية مجموعة سلالم القياس المكانية والزمانية[2] المستخدمة في كل جريان من هذا النمط.

ومع ذلك لا يوجد ما يمنع الباحثين في الوقت الحاضر من التصدّي لهذه المسألة. فالمعادلات التي تحكم التطوّر الزمكاني للجريانات الاضطرابية (معادلات نافييه- ستوكس Navier-Stokes[3]) معروفة. وقد قاد حلّها الكامل، في حالات ملائمة جداً، إلى توصيفات تنبئية. غير أن الاستخدام المنهجي لطريقة الحل هذه يصطدم بمطلبين صعبين اثنين: من جهة أولى يبدو أنّه يتطلب المعرفة الكاملة والمتزامنة لكل المتغيّرات المرتبطة بالجريان والقسريّات المؤثرة عليه[4] ومن جهة أخرى أنّه يستنفر وسائل حساب غير واقعية لعقود أخرى من السنين.

واستناداً إلى الصفة التأرجحية الناتجة من الهيجان المضطرب يجب إذن التصميم على تعريف واستخدام القيم المتوسطة. وترتكز إحدى الطرائق الأكثر انتشاراً على التصدّي للمسألة من زاوية إحصائية . فالقيم المتوسطة لمجموعة السرعة والضغط ودرجة الحرارة... التي يميّز توزّعها



حقل درجة حرارة آنية (في الأعلى) ومتوسطة (في الأسفل) في وضعية الخليط. يعطي المنحني السجل التاريخي لدرجة الحرارة في نقطة: قيمة آنية تأرجحية باللون الأزرق ومتوسطة باللون الأحمر

الاضطرابية تبقى موضّحة بشكل كامل وتحتاج إلى دراسات أساسية. أمّا الآخرون، وهم الأكثر واقعية، فعليهم القيام باختيارات تجاه عملية مستمرة من التطويرات التقانية. وهذه الاختيارات، على سبيل المثال اختيار أشكال هندسية جديدة، تجري في الغالب على عجَل. وملاءمتها للموضوع تتعلق جزئياً ببرمجيات ميكانيك الموائع التي تشكّل عنصراً من عناصر عملية اتخاذ القرار.

تحديدات الأدوات الحالية

في مجال الجريانات الاضطرابية ترتكز أدوات المحاكاة بصورة رئيسة، حتى الوقت الحاضر، على مقاربة يُؤخذ متوسطها

الجريان الاضطرابي، تُعرّف كالمتغيّرات الرئيسة للجريان التي نبحث عن وصفها بالنسبة إلى هذه القيم المتوسطة. وهذا يقود إلى تحليل الحركة (المسمى تحليل رينولدز) إلى حقلين متوسط ومتأرجح، وهذا الأخير يقيس الفارق الآني والموضعي بين كل مقدار حقيقي ومتوسطه (الشكل). تمثّل هذه التأرجحات الاضطراب وتغطي جزءاً مهمّاً من طيف كولموغوروف[1].

وهذه العملية تخفض إلى حدٍّ بعيد عدد درجات الحرية للمسألة وتجعله قابلاً للمعالجة معلوماتياً. وتشتمل أيضاً على صعوبات عديدة: فيجب أولاً أن نلاحظ، وبالضبط بسبب معادلات الحركة اللاخطية، أنّ كل قيمة متوسطة تُبرز حدوداً جديدة ومجهولة لابدّ من تقديرها. وعندما نغلق الباب نحو الوصف الكامل والحتمي للظاهرة، نفتح باب النمذجة، أي نحو تمثيل تأثيرات الاضطراب على المتغيّرات المتوسطة.

أُنجز الكثير من التقدّم منذ النماذج الأولى (Prandtl, 1925). ولم تتوقّف النمذجات عن التطوّر نحو مزيد من التعقيد، استناداً إلى الواقع المتحقّق بصورة عامة وهو أن كل توسّع جديد يسمح بالحفاظ على الخواص المكتسبة سابقاً. ويجب أنّ نلاحظ أيضاً أنّه على الرغم من أنّ عدداً من عمليات التطوير يضع في المقدمة ضرورة معالجة الجريانات مع التقيّد بصفتها غير المستقرة، فقد جرى تطوير أكثر النمذجات شعبية في إطار الجريانات المستقرة التي لا نصل فيها إلاّ إلى تمثيل المتوسط الزمني للجريان: ففي النموذج الرياضياتي النهائي تأتي آثار الاضطراب بكاملها من النمذجة.

والجدير بالملاحظة كذلك أنّه، على الرغم من الأعمال المتعدّدة، لا توجد أية نمذجة في الوقت الحاضر قادرة على أن تُحلّل كامل الظواهر التي تؤثّر في الاضطراب أو تتأثّر به (انتقال، عدم استقرارية، تنضّد، انضغاط ...إلخ). وهذا الذي يبدو، في الوقت الحاضر، أنّه يمنع عمليات النمذجة الإحصائية من تغذية الطموح إلى الشمولية.

وعلى الرغم من هذه التحديدات فإنّ النمذجات الإحصائية الاعتيادية بمعظمها هي في الوقت الحاضر متاحة في الكودات التجارية وأدوات الصناعيين. ولا يمكن الزعم بأنّها تسمح بحسابات تنبئية في كل حالة. وتكون دقتها متغيّرة تُقدّم نتائج مفيدة للمهندس في حالات ملائمة ومسيطر عليها (تنبؤ التباطؤ بدقة خطأ قدرها 5% إلى 10%- وأحياناً أفضل - على بعض الجانبيات)، ولكن أحياناً تكون غير صحيحة في الحالات التي يُبرهن فيها، بعد فوات الأوان، أنّها واقعة خارج مجال إقرار صلاحية النموذج. وكل استخدام لنمذجة مسيطر عليه يرتكز إذن على توصيف خاص لنمط الجريان الموضوع قيد المعالجة. يجري حالياً تطوير نمذجات بديلة تمثّل طرائق جديدة، تلبي الاحتياج إلى دقة أكبر على مجموعات السلالم الزمانية والمكانية الأوسع امتداداً والمستندة بالتالي إلى مؤثّر "قيمة متوسطة" من طبيعة مختلفة.

إنّ النظرة الإجمالية إلى نمذجات الاضطراب هي في الوقت الحاضر معقّدة جداً وما توحيد وجهات النظر ومفاهيم النمذجة المتنوّعة إلاّ رهان مستحيل. وتبقى إذن محاولة جعل النمذجات شمولية محاولة في غير محلها. واستخدام هذه النمذجات فعلاً يتوقّف في معظم الوقت على توفيقات تقودها دراية المهندس بصورة عامة.

ف. دوكرو

مديرية الطاقة النووية

مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية، مركز غرونوبل

(1) يمكن الاحالة إلى التوزع الطيفي للطاقة الحركة الاضطرابية، المعروف بطيف كولموغوروف spectre Kolmogorov والذي يوضح بطريقة بسيطة تراتب السلالم من سلالم كبيرة حاملة الطاقة إلى سلالم تصغر تدريجيا وتحمل طاقات تقل بالتدريج.

(2) إن هذا المجال هو نتيجة عدم خطية معادلات الحركة التي تولد مجموعة واسعة من السلالم الزمانية والمكانية. وهذه المجموعة في تابع متزايد مع عدد رينولدز Re، الذي يقيس العلاقة بين قوة العطالة وقوة اللزوجة.

(3) إن الفرضية التي تقول بأنّ الحل الكامل لمعادلات نافيه - ستوكس يسمح بمحاكاة الاضطراب في فرضية مقبولة بصورة عامة، على الأقل في مجموعة الجريانات بدون صدم.

(4) تتعلق بمسألة تمكنها شروط ابتدائية وقيم حدية.

الزمني، وتتطلّب علاقات إغلاق عديدة، وهي علاقات جبرية مُدخلة لضبط الحدود المصدرية الموجودة في المعادلات التفاضلية، والتي تتّصف بصفة تجريبية نوعاً ما. يهتم المتخصّصون بالاضطراب اهتماماً خاصاً بضبط النماذج بحسب الحالات الخاصة، وهذه الحالات تكثر في المجال الصناعي. وهذه النماذج الفيزيائية المألوفة لم تصلح في بعض الأوضاع وبصورة خاصة في مناطق قريبة من الجدران، وهذا ما يحدّ من أهميتها في مجال الانتقالات الحرارية. فمثلاً إنّ عمليات إعادة الجريان في الجريانات الاضطرابية أو أيضاً عمليات الانفصال - وإعادة الالتصاق تفلت حتى الآن من وصف جيد للآليات.

محاكاة المقاييس الكبيرة

ظهرت حديثاً تقنية جديدة: هي تقنية محاكيات المقاييس الكبيرة simulation des grandes échelles (SGE). فهي تشتمل على محاولة وصف الظواهر المتعلّقة بالدوّامات الكبيرة الموجودة بصورة طبيعية في الجريان الاضطرابي وصفاً مباشراً (بصورة غير مستقرة). أمّا الدوّامات الأصغر أي الدوامات التي تُشتّت الطاقة الحركية للمائع فتوصف بنموذج أكثر عمومية. إنّ الأصالة الملفتة للنظر في هذه النمذجات تكمن في فتح حقل كامل من التحرّي يتيح للأدوات الرقمية ألاّ تقدّم بعد الآن صورة ثابتة للجريان، بل تقدّم فلماً متحركاً يتيح إعادة تشكيل تطوره الزمني. والمحاكاة الآن قادرة على أن تمثل بصورة واقعية بوجه خاص حركات أكبر الدوّامات في الجريان، وهذا يمثّل خطوة كبيرة نحو تمثيل الطبيعة الحقيقية للاضطراب. إنّ التقدّمات المرتقبة في مجال انتقالات الحرارة ضمن المبادِلات هي إذن عديدة ومهمة.

سياسة البرمجيات التجارية

الاحتياجات والتوقّعات كبيرة في كل المجالات الصناعية. والرهان ضخم جداً لأن إقرار صلاحية محاكاة المقاييس الكبيرة يبقى أكاديمياً والتقدمات التي ينبغي تحقيقها تهمّ تخصّصات عديدة. يجب في الطريقة الرقمية تحسين دقة واستقرارية المخططات، وتسريع سرعة الحل، وتوسيع إقرار صلاحية النماذج في الفيزياء، بدءاً من الحالات الأكاديمية. وفي منتصف الطريق بين النظامين يجب التأكّد من تواؤم اختيارات النماذج الفيزيائية مع نماذج المخططات الرقمية. وهذا هو الإجراء الذي تعهّدته البرمجيات الكبيرة التجارية بالاستناد إلى الشبكات الجامعية.

ومثل ما كان يؤسف له في الماضي من عدم كفاية النماذج التقليدية فيما يخص انتقالات الحرارة بين جدار ومائع، يبدو بوضوح أنّ الهوّة ما زالت كبيرة بين الأعمال الأكاديمية والواقع الصناعي، وأنّه ينقص في هذا المستوى إقرار شديد لصلاحية المشكلات الواقعية.

عمل مجموعة البحث على المبادلات الحرارية (مجموعة غريث GRETh)

في مواجهة هذا الوضع، يكون عمل مجموعة غريث في مركز مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية في غرونوبل مضاعفا: تقوم المجموعة بتنفيذ إقرار الصلاحية الصناعية للنماذج المتقدّمة للمحاكاة الحرارية حول المسائل المتعلقة بمبادلات الحرارة، ويجعل النماذج ومجال صلاحيتها سهلة البلوغ أمام مجموعتها الصناعية عن طريق فكرة المنصّة البرمجية.

من إقرار الصلاحية الصناعية إلى التصنيع

تحتل المبادلات المتراصّة موضعاً تزداد أهميته في كل مجالات الصناعة وبصورة خاصة صناعة السيارات والطائرات وتوليد درجات الحرارة المنخفضة جداً... فهي تسمح بإنقاص حجم ووزن وتكلفة أجهزة المبادلات الحرارية. وأحد الرهانات العلمية المهمة هو التنبؤ بوسائل محاكاة الجريانات وانتقالات الحرارة في أقنية يراوح قدّها ما بين 0.1 و 10 مم وتُظهر عدم انتظام مهم في أشكالها الهندسية. وأحد هذه الأشكال الهندسية الأكثر تمثيلاً يشمل جنيحات (ريشات) بخطوة منزاحة (الشكل 1).

باشرت مجموعة "غريث" بمساعدة الوكالة "أدم Ademe"(وكالة البيئة والسيطرة على الطاقة) بإعطاء الاعتمادية لأدوات التنبؤ الرقمي المتقدّم بهدف اختبار النماذج الرقمية وحتى اختيار نموذج التنبؤ الأكثر أداءً في مواجهة مشكلة صناعية. فقد جرى، بمساعدة البرنامج "تريوTrio" الذي طوّرته مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية، اختبار أفضل نماذج الاضطراب بصورة منهجية على هندسيات المبادلات ذات الصفيحات والجنيحات التي تتحدّد صفاتها تجريبياً.

لقد جرى تنفيذ محاكيات هيدرولية حرارية ثنائية وثلاثية الأبعاد للجريان حول جنيح معزول باستعمال أداتين من أدوات المحاكاة. سمح برنامج "تريو" في البداية بتنفيذ عمليات محاكيات غير مستقرة بنماذج مختلفة من محاكيات المقاييس الكبيرة (SGE). وبعد ذلك استعملت أداة الحساب التجاري

الشكل 1- صورة آنية لحقل درجة حرارة الهواء في لحظة معينة حول جُنيح منعزل، في جريان من اليسار نحو اليمين. جرى الحصول عليها بالبرنامج تريو Trio التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية. في اليسار مخطط لمثل هذا الجنيح وتوضّعه "بخطوة منزاحة" تسمى OSF (offset strip fin) بالإنكليزية.

"فلوَنت" Fluent لتنفيذ محاكيات مستقرة بنماذج اضطراب اعتيادية (من نمط معادلات نافييه – ستوكس لمتوسّط رينولدز Reynolds). تُقدّم هذه النماذج المقادير الممثلة لمتوسطات الجريان مع الزمن.

تُقارن بصورة منهجية نتائج المحاكيات التي جرى التوصّل إليها بالمراجع والمصادر أو بنتائج التجارب في المختبر: الجانبيات profiles الجدارية لمعامل الضغط ومعامل الاحتكاك ومعامل التبادل والمعامل الكلي لضغط وتواتر الانفلاتات lâchers الدوّامية في سافلة الجريان. يكون عدد عروات الشبكة من رتبة 100000 عروة من أجل المحاكيات ثنائية الأبعاد ومن رتبة مليون عروة من أجل المحاكيات ثلاثية الأبعاد. يبدو بوضوح أنّ النتائج الرقمية ترتبط بنماذج الاضطراب المستعملة وكذلك أيضاً باستخدامها. وتسمح النتائج التي تمّ الحصول عليها بمحاكيات المقاييس الكبيرة (الشكل 1) بتحديد الآليات المسؤولة عن زيادة التبادل الحراري عن طريق توليد الاضطراب هندسياً. ويسمح تتابع الصور بمعاينة التطوّر الزمني للآليات في المستوى الموضعي مثل نمو وانفصال وانجرار الدوّامات.

ولا يمكن أن تتم عملية تصنيع هذه الطرائق ما لم ترافقها خبرة، فالطرائق تتطلّب دائماً خبرة تزداد أهمية. ولهذا السبب طوّرت مجموعة "غريث" مفهوم المنصّة البرمجية، التي ترتكز على جعل النفاذ إلى برمجيات الهيدروليك الحراري وإلى النماذج المتقدّمة ممكناً لمجموعتها الصناعية وعلى العمل بتعاون وثيق مع الشريك الصناعي بفتح الوسائل التي هي بحوزته وضمه قدر الإمكان إلى تشغيل الأدوات[1] (المؤطر 2).

لقد فهم الصناعيون، الذين يلجؤون إلى مجموعة "غريث" من أجل عمليات التطوير التقاني المتوقفة، أهمية المشاركة في مختبر يحاول أن يذهب إلى أبعد من مجرّد إيضاح لقدرات الطرائق الجديدة التي توضّحها النتائج التي تمّ الحصول عليها حديثاً (الشكلان 2، 3).

تجد مجموعة "غريث" مصلحتها الخاصة في الموضعة الجيدة لعمل التوصيف المنهجي وفي شهرة منصتها البرمجية المتزايدة حيث يتلاقى صناعيون من مجالات مختلفة جداً وفي التعاضد بين برامج البحث المختلفة التي تجري في قطاعات غير متنافسة بدءاً من مشكلات صناعية حقيقية.

قفزة مهمّة في قدرة التنبؤ

انصرف الصناعيون تدريجياً نحو المحاكاة لتعريف أفضل الهندسات بمقياس المليمتر، فعند هذا المقياس تقع الرهانات الصناعية الاقتصادية حيث يكون من الصعب التوصيف التجريبي السريع والموثوق. ومن أجل محاولة الاستجابة لهذا الرهان أعطت مجموعة غريث عناصر توصيف

(1) يسمح هذا المفهوم بالضبط الجيد حسب الطلب، من التخصيص اليومي إلى أطروحة التحويل المشترك.

المؤطر 2

مثال على التطويرات مع Alfa-Laval-Vicard في المبادلات ذات الصفائح

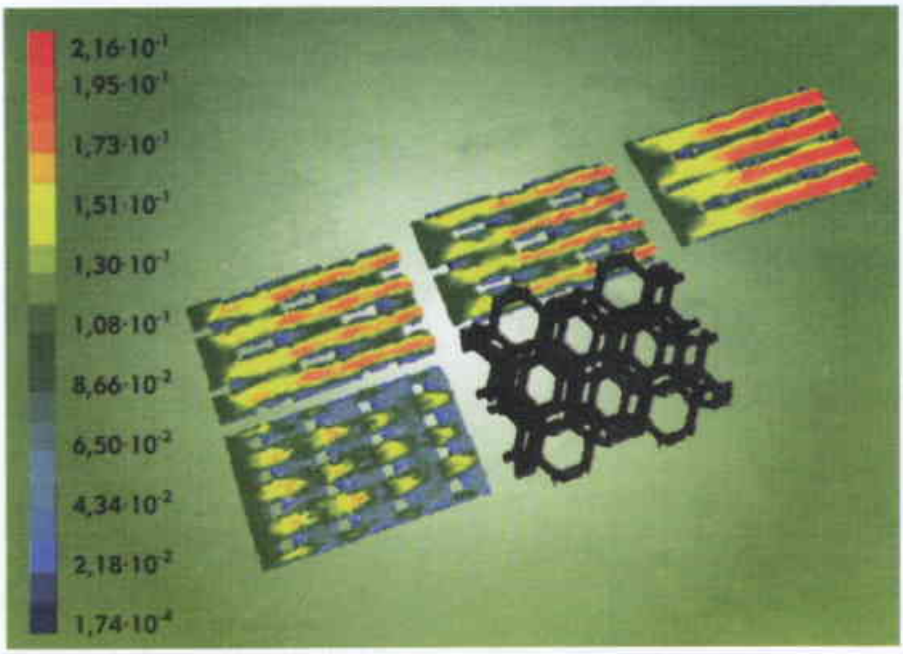
منذ عهد قريب، كانت تنشأ معرفة الأداءات الهيدرولية الحرارية لمبادل حراري إثر قائمة طويلة من التجارب المتماسكة والكاملة تقريباً. وهذا صحيح بصورة خاصة من أجل المبادلات المتراصة التي تغلف سطوح التبادل المعقدة فيها من الترابطات التي تنشرها المؤلفات على نطاق واسع. وصحيح أنّ تحسين أداءات مبادل ما يعتمد على كثير من التجارب، إلا أنه يحتاج أيضاً إلى قليل من الحظ وجزء جيد من "الفهم feeling".

تغير الترتيب تماماً بوصول برمجيات المحاكاة الرقمية بثلاثة أبعاد إلى السوق (المؤطر A. ما هي المحاكاة الرقمية؟). فالمحاكاة التي كانت أولاً مقتصرة على خلية عنصرية واحدة وبعد ذلك على تسع خلايا (الشكل 2) وفي الوقت الحاضر على ست وثلاثين خلية، تسمح في الوقت الحاضر "برقمنة numériser" الصفائح "المشرشرة à chevrons" بتماسك قوي جداً بالنسبة إلى الصيغ المألوفة. ومع مثل هذه الأداة يمكن محاكاة جانبيات هندسية غير موجودة والتي سيكون تحقيقها مكلفاً قبل التمكن من عمل التجارب التقليدية التي تخضع نتائجها إلى مخاطر عرى الاختبار. يسمح النفاذ إلى هذه التقنية بمضاعفة المحاكيات بغية تكميم أثر مختلف الوسطاء والتراتبية التي تسمح بها تكون مفيدة جداً لفهم الظواهر الموضعية.

إنّ تقدم مجموعة "غريث" في السيطرة على برمجيات المحاكاة يعطيها ميزة مهمة لوضع عقود الشراكة. فالصناعيون في الواقع لا يجدون دوماً داخلياً المؤهلات والإتاحية الضرورية لإنجاح المشاريع التي يتزايد تعقيدها في آجال يزداد قصرها بالتدريج.

الشكل 2- مسارات يتبعها المائع ضمن مبادِل ذي صفيحات ووصلات زاوية حيث تشكّل الخطوط المشرشرة زاوية "30 بالنسبة إلى محور الجريان في قعر أخدود. وهذه النتائج التي تم الحصول عليها بمساعدة برمجية "فلوَنت Fluent" تبيّن جهود التمذجة الموضعية للجريانات.

الشكل 3- جريان ضمن رغوة معدنية (انظر الصورة في بداية المقال) تمّ حسابه ببرمجية "فلوَنت". وهذه هي النتائج الأوّلية لمشروع يهدف إلى توصيف بنية جديدة لهذا النمط بغية زيادة انتقالات الحرارة. أشعة السرعة ملوّنة بحسب السلّم (بالمتر/ ث).



لطرائق المحاكاة الرقمية الجديدة مثل محاكاة المقاييس الكبيرة في مجال المبادِلات المتراصّة.

وهذه الطرائق تفتح حقلاً جديداً من التحرّيات بالوسائل الرقمية باقتراحها قفزة مهمّة في قدرات المهندسين لتوقّع انتقالات الحرارة. وعن طريق الاستنتاج توجه المحاكاة بالمقياس الكبير التحرّيات التجريبية نحو قياسات أكثر دقة. ولمّا كان إقرار صلاحية القيم المتوسطة من درجة الحرارة أو الضغط لم يعد كافياً، وجب الاهتمام فوق ذلك بقياس القيم التأرجحية لهذه المقادير.

III - المحاكاة من أجل التنفيذ

كما تبيَّن من الفصل: المحاكاة من أجل التصميم، فإن فَهْم الظواهر ونمذجتها يسمحان ضمن حدود الاستقراء الداخلي للنماذج، بالتنبؤ بتطوّر المنظومات، بوساطة أدوات تصميمية مُحَوْسبة حديثة. وقد ساعدت هذه الأدوات على تخفيف مقدرة الباحثين والمهندسين على التنبؤ، وبذلك ساعدت المستخدمين على التخفيف من رد فعلهم عند مواجهة حالات تطوّرية وحتى غير متوقعة. إن هذه الأدوات تُشكّل عوناً على اتخاذ القرار، وبالتالي عوناً على التنفيذ.

وهكذا فإن المُحاكي سكار SCAR، حيث "محرّكه الرقمي" هو الكود كاتار Cathare، الذي يُحاكي تطوّر ترموديناميكية السوائل لمفاعل نووي، يمكنه أن يضع المُشغّل في حالة محاكية لحادث طارىء، وبذلك يهيئه لأن يكتسب ردود أفعال جيّدة في مثل تلك الظروف. وهكذا فإن تدخّل المشغّلين في وسط مؤذٍ (تعرّض للإشعاع مثلاً) يمكن إعداده بحيث تخفّض مدة التعرّض للإشعاع، أو أيضاً فإنّ كسوة حاوية توجد فيها مواد نووية يمكن أن تُكيَّف للسيطرة على عواقب حريق. وثم إنّ تهيئة النموذج الأولي الافتراضي، التي تقوم على تآثر بشري مباشِر مع نموذج مصغّر محوسب، تُجيز اختيار أمثَل المنظومات المعقّدة التي تتحكم فيها وسطاء عديدة.

وأخيراً، فإنّ نمذجة ومحاكاة العيوب في قِطَع معدنيّة، أو في مكوّنات أخرى، انطلاقاً من نتائج المراقبات اللاإتلافية تسمحان بكشف بداية تضرّر المنظومات واتخاذ التدابير التصحيحية اللازمة بكل رويّة.

إنه عمل مُحاكىً في وسط ثلاثي الأبعاد استُرْجع ببرنامج الواقع الافتراضي فار phare الذي أنشأته مفوضية الطاقة الذرّية (CEA/List) في مركز Fontenay - aux - Roses
تُعرَضُ الصورة على المشغّل بواسطة منظومة ترنية تجسيمية تشمل مستويي عمل، على الجدار وعلى الأرض.

المفاعلات النوويّة:
من المحاكاة إلى المحاكيات

ب. فايديد
مديرية الطاقة النووية
مفوضيّة الطاقة الذرّية — مركز غرونوبل

ملخص

إن تصميم الأمان في المنشآت النوويّة وإثباته، خاصة في مفاعلات الماء المضغوط، أمر يستند كثيراً إلى المحاكاة الرقمية، التي تُدعم هي بالذات بتجريبات، أساسية وتحليلية بقدر ما هي شمولية، فتُغْني النماذج الفيزيائية التي هي بمنزلة قاعدة للمحاكاة. هناك برمجية محاكاة في ترمودينامية السوائل مثل كاتار، طوّرتها مفوضية الطاقة الذرّية وشركاؤها، مُدمجة أيضاً – وهذا هو معنى مشروع سكار Scar - في المحاكيات التي تسمح، من بين عدة أمور أخرى، للمشغلين بأن يواجهوا الحالات الطارئة، وحتى أقلها احتمالاً.

الكلمات المفتاحية: المفاعل النووي، البرمجية، المحاكاة، المحاكي، الكود كاتار.

لماذا المحاكاة ؟
وما الذي يُحاكى ؟

يَفْرض أمان المنشآت النووية، وخاصة منشآت مفاعلات الماء المضغوط REP، أن تؤخذ بالحُسبان منذ مرحلة التصميم أنواع السيناريوهات الطارئة كُلِّها، وحتى أقلها احتمالاً. ولا يمكن أن يستند إثبات هذا الأمان، بالطبع، إلى التجريب على المقياس الحقيقي بل يتطلب الاستعانة بالمحاكاة الرقمية (المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية ؟).

إنّ الحادث الطارىء الأكثر دراسة عادة لتحديد أبعاد منظومات الأمان هو حادث الانقطاع المفاجىء في شبكة قنوات الدارة الأولية التي تُبرِّد قلب المفاعل بتأمينها جريان المائع المبرِّد الذي يتماس وعناصر الوقود مباشرة. فالهبوط الشديد العنيف في الضغط الذي ينجم عن ذلك يؤدي إلى غليان الماء في الدارة وتكوُّن جريانات ثنائية الطور (مزيج ماء وبخار)، حيث تتّضح ضرورة التنبؤ الجيد بالمميّزات لتحديد سلوك المنشأة بوثوقية كافية.

ردهة التحكم في القسم 2 من محطة توليد الكهرباء التابعة لكهرباء فرنسا EDF في غولدفيش (gold fech). المحاكيات "بالمقياس الكامل" هي نسخ مطابقة تماماً لردهات التحكم الواقعية. في اللوحة الجدارية، محاكي القيادة في محطة توليد الكهرباء التابعة لكهرباء فرنسا في بوجيه في نهاية الثمانينيات.

ما هي أدوات المحاكاة ؟

إنّ دراسة هذه الأوضاع المعقّدة تتطلب برمجيات ملائمة تقوم على نماذج فيزيائية (جمل معادلات) تصف على أحسن وجه ظواهرية الجريانات الثنائية الطور وأن يتم إقرار صلاحيتها على قاعدة تجريبية عريضة قدر الإمكان. وقد وجد أسلوب المحاكاة هذا تجسيداً له عند مديرية الطاقة النووية في مفوضية الطاقة الذرّية في تصميم وتنفيذ برمجية كاتار التي استخدمها منذ منتصف الثمانينيات الصناعيون وهيئات الأمان الفرنسية والأجنبية.

ليس بين المُحاكاة والمحاكي ... سوى خطوة واحدة، وهي مع ذلك تتطلب نمذجة كاملة للعملية (بما فيها السطح البيني مع المشغّل ومنظومات القيادة) وأيضاً حساب السيناريوهات المختلفة في الزمن الحقيقي. وحتى يكون العمل أكثر واقعية، يستند المحاكون إلى هذه البرمجيات نفسها ويسمحون بمساهمة تأثرية المحاكاة مع التمثيل التربوي للجريانات.

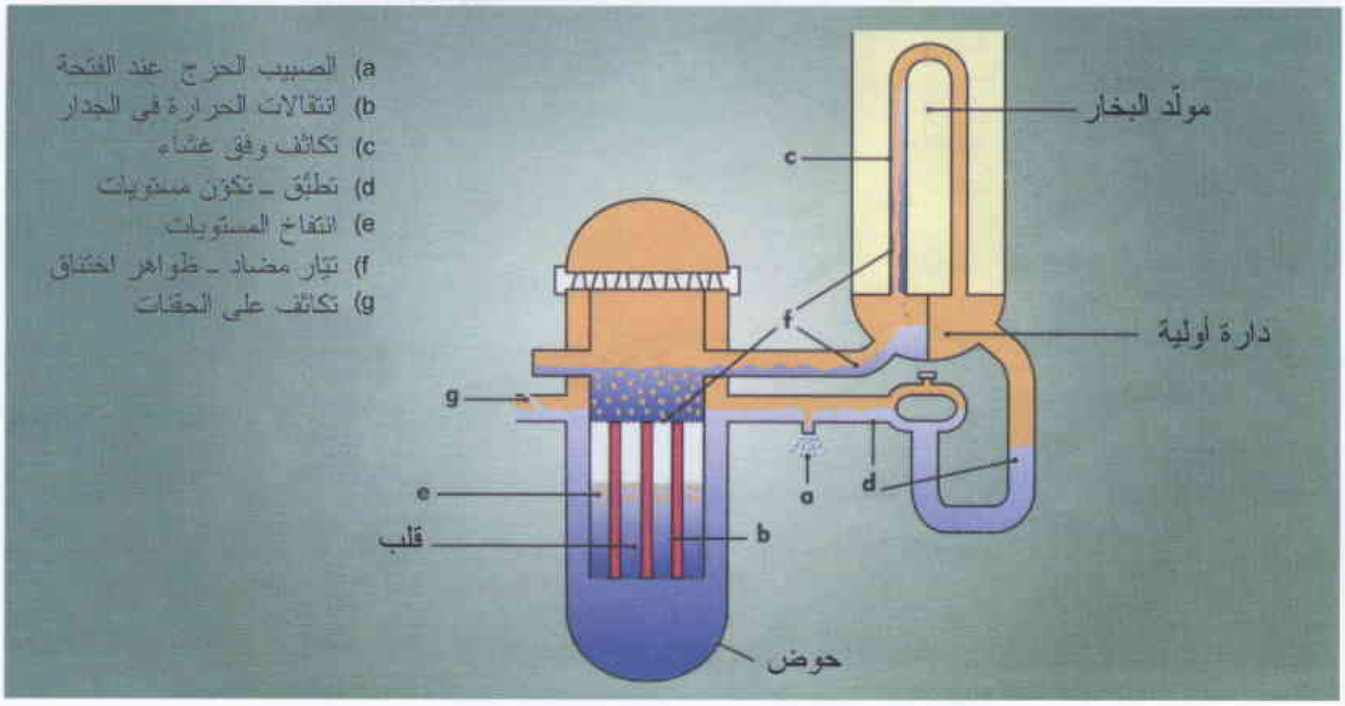
نموذج فيزيائي ملائم

ينبغي بداية أن يتوفر نموذج فيزيائيّ، عليه أن يُميّز بين الحالتين اللتين يوجد عليهما الماء في دارات التبريد (السائل والبخار). إن دور كل من هذين الطورين، وخاصة في تبريد القلب، ليس في الواقع هو نفسه، لأن السائل يُجلي الطاقة المتولّدة بسهولة أكبر من البخار. فعندما يوجد كلاهما معاً في شبكات القنوات، فإنهما يتأثران طبعاً واحدهما مع الآخر ومع البنى المعدنية. فينبغي للنموذج الفيزيائي أن يأخذ، والحالة هذه، بالحسبان حدوداً مختلفة، تدعى قوانين الإغلاق، كتبادلات الكتلة والطاقة عند السطح البيني سائل بخار (غليان، تكاثف)، وتبادلات الاندفاع بين السائل والبخار (احتكاك السطوح البينية) وتبادلات الطاقة بين كل من الطورين والجدران (التبادلات الحَمْلية، غليان أو تكاثف موضعي...). ومن تلاؤم هذه القوانين تتوقف واقعية إجابة البرمجية عند محاكاة مختلف أطوار تطور انتقالي[1] طارئ . وهناك عدد معين من الظواهر الفيزيائية (موضّحة في الشكل 1) لها دور هام جداً أثناء حادث طارئ من نوع فقد المبرّد الأولي (APRP) الذي تسببه فتحة في الدارة الأوّلية.

الاستعمال في برمجية: مشروعا كاتار وسكار

بعد أن يُحدّد النموذج الفيزيائي، ينبغي برمجته (أي أن يُكوَّد) في برمجية حساب للتمكن من إقرار صلاحيته، وفي النهاية، لاستعماله في الحسابات التطبيقية. وهكذا تمّت

(1) التطور الانتقالي هو تطور بطيء أو سريع ، مبرمج أو عَرَضي لحالة عمل منشأة، ففي حالة مفاعل نووي، تتميز التطورات الانتقالية النظامية، التي تبقى فيها قيم الوسطاء الفيزيائية ضمن المواصفات التقنية المعتمدة في التشغيل، عن التطورات الانتقالية الطارئة، التي تسبب عمل منظومات وقاية المنشأة، ومن ثم الحفاظ عليها.



الشكل 1، الظواهر الفيزيائية الأساسية التي نلقاها في مفاعل بالماء المضغوط أثناء حادث فقدان المبرّد الأولي (APRP).

المباشرة بمشروع كاتار عام 1979، استناداً على دفتر شروط وضعته مؤسسة كهرباء فرنسا EDF، وفراماتون ومعهد الوقاية من الإشعاعات والأمان النووي (IRSN) والذي كان (IPSN) استجابة لحاجاتها في إثبات وتحليل أمان مختلف التطورات الانتقالية الطارئة التي يمكن أن تظهر في المفاعل بالماء المضغوط REP.

كانت نتيجة هذا المشروع التحقيق التدريجي لبرمجية قادرة على وصف ظواهر ترموديناميةِ السوائل كلها التي بإمكانها أن تظهر أثناء حادث طارىء وتُغطّي كل أنظمة الجريان الثنائي الطور(ذي الفقاعات، ذي الاختناقات، ذي القطرات، المُنَضّد، الحلقي ...)، في مجال واسع من الوسطاء الفيزيائية (تمتد الضغوط من 1 kPa إلى 26 MPa، ودرجات حرارة الغاز حتى 2300 K، والسرعات حتى السرعات الصوتية) ولتنوّع كبير من التشكيلات الهندسية (المؤطر 1).

الإقرار بصلاحية البرمجية على مرحلتين اثنتين

إنّ البرمجية المستخدمة لإثبات الأمان ينبغي أن تُنَفّذ بقواعد واضحة لضمان الجودة وأن تكون موضوع إقرار صارم لصلاحيتها. ومنهجية عملية الإقرار بصلاحية كاتار، تُطبَّق لنسخة منسوبة إلى مراجع أصولية، على مجموعة متوافقة من قوانين الإغلاق التي ندعوها (كما ندعو كل تغيير أيضاً) مُراجعة، وهي تشكّل جزءاً لايتجزأ من النسخة المعنية. ثمة مرحلتان كبيرتان تسمان هذه العملية: إقرار الأهلية والتحقق.

مرحلة إقرار الأهلية

تقوم المرحلة الأولى على مقارنة النتائج الحاصلة من البرمجية بالقياسات التي تحققت بالتجارب التحليلية (المؤطر

المؤطر 1

برمجية ذات بنية مؤلفة من وحدات تتم إعادة إقرار صلاحيتها بانتظام

إنّ المميّزات الأساسية لكاتار هي الآتية:

- بُنية مؤلفة من وحدات تسمح بنمذجة منشأة بسيطة، من النوع التحليلي أو مُعقّدة، من النوع "منظومة" (المؤطر D، تجارب تحليلية وتجارب شاملة)، أو أيضاً مفاعل نووي كامل.
- وحدات (نسقات) مختلفة تقبل الترتيب وفق الحاجات: نقطية "بُعد معدوم" (0D) (لوصف مكونات كالحجوم الكبيرة أو المضخّات)، و"أحادية" البُعد (1D) (لمجموعات الأنابيب أو لمُقاربة مبسطة لسلوك حوض المفاعل)، و"ثلاثية الأبعاد" (3D) (لتحسين وصف التوزّع الهندسي المُعقّد للجريانات في الحوض، مثلاً).
- نموذج أساسي بمائتين وست معادلات (معادلة لكل موازنة - كتلة، اندفاع، طاقة - لكل طور)، قادر أن يأخذ بالحسبان عدم التوازنات الميكانيكية (فروق في السرعة بين البخار والسائل أثناء الجريان مع التيار أو ضدّ التيار) والحراريات (فرط التسخين أو تحت التبريد للطور الواحد).
- مجموعة منسقة وموثقة من قوانين إغلاق تُعدّ مسعىً صارماً نحو إقرار الصلاحية على كامل سلم التجارب الجاهزة.
- تعرّف واضح إلى حدود استعمال القوانين الفيزيائية وطريقة مُدْمَجة لتقييم ارتيابات هذه القوانين.
- طريقة رقمية (المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية؟)، ضمنيّة في بُعد معدوم (صفر) (0D) وبُعد واحد (1D)، وشبه ضمنيّة في ثلاثة أبعاد 3D، متينة وفعّالة، تسمح بتوفيقة جيدة بين الدقّة وتكلفة الحساب.
- نشر دليل الاستخدام الذي يضم إعادة تجربة طور الإقرار بالصلاحية كي يُختزل "مفعول المُسْتخدم" إلى قيمته الصغرى.

ومنذ بداية الثمانينيات، تبيّن أنه من بين خمس عشرة نسخة تقريباً من البرمجية المسلّمة، هناك ثلاث منها شكلت برنامجاً كاملاً لإقرار الصلاحية.

وفي عام 1987، كان كاتار V1.3 1 (المراجعة 4 للقوانين الفيزيائية) النسخة الأولى التي أُقرّت صلاحياتها للأحداث الطارئة من نوع "الفُتْحة الصغيرة" واستخدمت كمرجع لإحكام الإجراءات الطارئة ولتحقيق محاكيات سيبا (Sipa).

وفي عام 1996، كان كاتار V1.3L 2 (المراجعة 5) النسخة الأولى التي أُقرت صلاحيتها للأحداث الطارئة من نوع "الفتحة الكبيرة"، وهي التي تؤخذ بالحسبان في تحديد أبعاد المفاعلات.

وفي عام 1999، جاء كاتار V1.5 2 (المراجعة 6) باحتماليات جديدة لنمذجة ثلاثية الأبعاد لحوض المفاعل والحساب الموازي على عدة مُعالجات (المؤطر B، الوسائل المعلوماتية للمحاكاة الرقمية ذات الكفاءة العالية). هذا، وتستمر عملية الإقرار بصلاحيته حتى عام 2003.

منظر جزئي للمنشأة بتسي، التي استثمرت بين 1988 و 1998 في مركز مفوضية الطاقة الذرية في غرونوبل، يمثل في مقياس مختزل (1/100 حجماً، ومقياس 1 ارتفاعاً) مجموعة دارات المفاعل بالماء المضغوط استطاعته 900MWe.

D، تجارب تحليلية وتجارب شاملة). وبصورة نموذجية تتألف مصفوفة إقرار أهلية، مراجعة القوانين الفيزيائية لـ "كاتار" من آلاف الاختبارات التي تحقّقت على 40 منشأة مختلفة تنتمي إلى مفوضية الطاقة الذريّة أو إلى هيئات أخرى فرنسية أو أجنبية.

فهي، إن صحَّ القول، بمثابة "جَرْد" لجودة قوانين الإغلاق التي طوِّرت لهذه المراجعة التي تمَّ تحقيقها. تسمح هذه المرحلة، فضلاً عن ذلك، بواسطة طريقة حساسية معاونة (ASM) وأداة إحصائية نوعية (CIRCE) بتحديد الارتياب في الوسطاء الأساسية لقوانين الإغلاق. كما تسمح هذه المرحلة، إذا لزم الأمر، بإجراء تحسينات نوعية على نموذج فيزيائي خاص.

مرحلة التحقق

تقوم المرحلة الثانية على مقارنة النتائج الحاصلة من البرمجية بالقياسات التي تحققت على منشآت تجريبية متكاملة، أي بنسخ مطابقة مُصغَّرة لمفاعل نووي (المؤطر 2) تتم فيه محاكاة حالات طارئة. إن الهدف هو هنا، في إقرار صلاحية مجموعة قوانين النموذج على سيناريوهات لتطورات انتقالية طارئة، يوجد في أثنائها ترابط قوي بين الظواهر الأولية المختلفة.

يحوي ملف التحقق من كاتار ثلاثين اختباراً "متكاملاً" تقريباً تمّت على ثماني منشآت "منظومات" أدخلت في الخدمة منذ بداية الثمانينيات في فرنسا (بتسي Bethsy) أو خارجها. ويظهر هنا أيضاً كُلّ حساب للتحقق بمثابة "جَرْد" لقدرة البرمجية على محاكاة هذا التطور الانتقالي أو ذاك. لهذا السبب فإن كل تعديل في نسخة قوانين الإغلاق أثناء الإقرار بالصلاحية ممنوع أثناء "الحساب الأساسي".

يُوضّح الشكل 2 مثل هذا الحساب: إنّ التطوّر الزمني لأحد الوسطاء (ضغط الدّارة الأولية) يُحسب تماماً بالكود كاتار، بينما تُقدّر كتلة المائع الحاضرة في الدارة بأقل ممّا ينبغي بشكل واضح.

ومع ذلك، قد يظهر من المفيد، حسب الفروق التي ربما تُشاهد، أن تجرى أيضاً، أثناء هذه المرحلة، حسابات حساسية، يغيَّر فيها عدد قليل من وسطاء القوانين الفيزيائية لتحديد الوسيط الذي يبدو مسؤولاً عن هذه الفروق . يسمح هذا المسعى بتعيين النماذج التي يلزم تحسينها في مراجعة لاحقة، وربما استنتاج تجارب جديدة لإقرار الأهلية.

ملف الإقرار بصلاحية البرمجية

عَقْب عملية الإقرار بصلاحية البرمجية، تُجْمل وثيقة تركيبية الخلاصات الأساسية لإقرار الأهلية والتحقق، وتوضّح حدود استعمال البرمجية بحسب التتابعات الطارئة التي نُظر في أمرها وتمنح للنسخة "واسم الجودة". وهناك نتيجة هامة لهذا المسعى هي إعداد دليل تُعطى فيه، في ضوء نتائج الحسابات، توصيات حول استعمال مختلف خيارات النمذجة.

استخدام البرمجيّة

لايُقدّم كاتار فقط إلى الشركاء (مؤسسة كهرباء فرنسا وفراماتون - ANP و IRSN ومفوضية الطاقة الذريّة) بل يُقدم أيضاً إلى 34 هيئة أجنبية (تُنتج الكهرباء ومعاهد الأمان وهيئات بحوث وجامعات) موجودة في 21 بلداً، وترفق كلّ نسخة جديدة بمجموعة كاملة من الوثائق وبحالات اختبار تسمح للمستخدم بإقرار صلاحية المنشأة (المؤطر 1).

الأهداف التي تُتابع في المحاكيات

صممت في البدء مُحاكيات المراكز النوويّة لتوليد الكهرباء من أجل تدريب موظفي القيادة. فكان عليها قبل كل شيء أن تُقدّم بيئة واقعية (ردهة القيادة) وردا ليس أقل واقعية على أفعال القيادة أثناء تشغيل نظامي، وحتى عرضي. ولتلبية هذه الحاجة، كانت تكفي غالباً نماذج فيزيائية بسيطة نسبياً، لأنّها مقصورة على مجال الاستخدام. نُفّذت هذه الفكرة منذ أوائل التسعينيات في المحاكي سيبا Sipa الذي حقّقه تاليس Thales لحساب مؤسسة كهرباء فرنسا EDF و IRSN (وعندئذ IPSN)، مع نسخة مُبسّطة من كاتار التي كانت تبيح الزمن الحقيقي مع أدوات ذلك العصر. إنّ المحاكيات "سيبا" انتشرت كثيراً منذ ذلك الزمن في مراكز تأهيل كهرباء فرنسا.

وثمّة استعمال آخر للمحاكيات، وهو تربوي: إنها تسمح،

هيئة الطاقة الذرية السورية مكتب نظم المعلومات http://serversmiso.aecs.sy

المؤطر 2

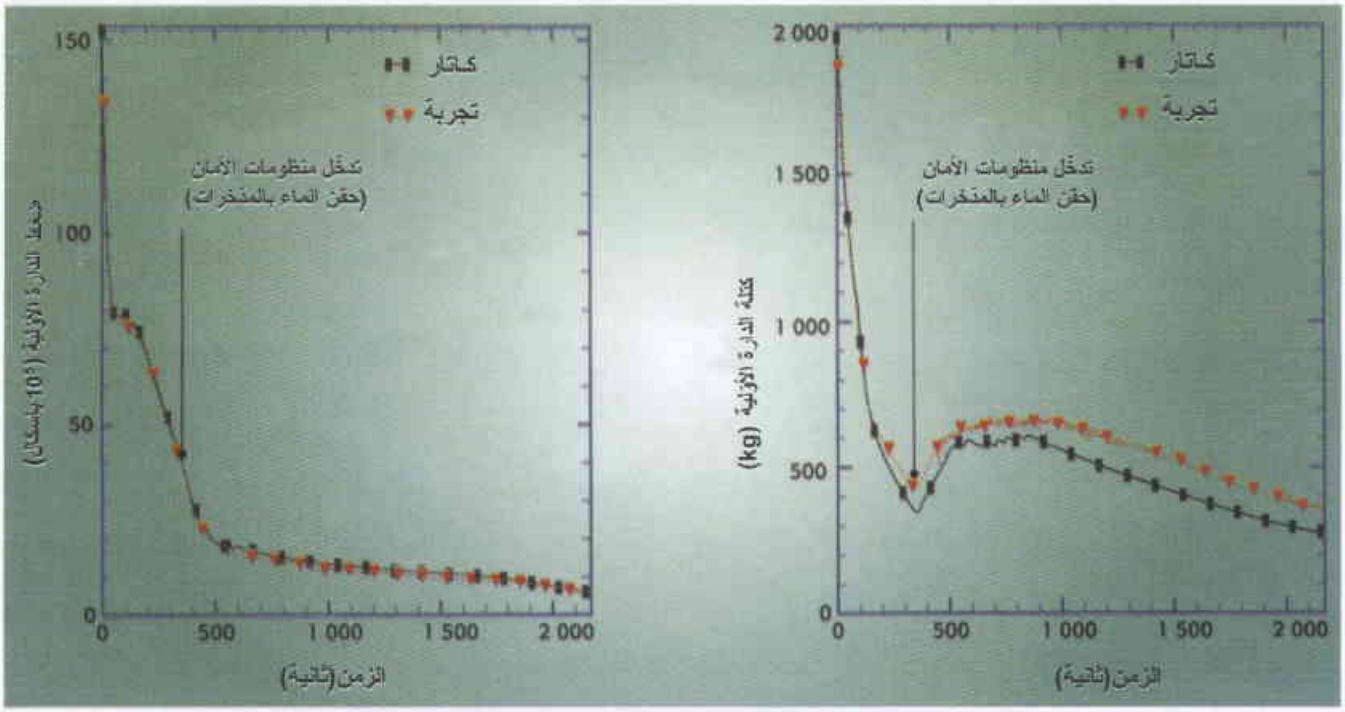
المنشآت التجريبية في ترموديناميكية السوائل (ترموهدروليك)

إنّ معرفة فيزياء الجريانات الثنائية الطور تمرُّ، منذ أربعين عاماً تقريباً، بتحقيق تجارب تدعم أنشطة النمذجة (المؤطر A، ما هي المحاكاة الرقمية؟ والمؤطر D، تجارب تحليلية وتجارب شاملة)، وكلها تتآزر نحو الهدف ذاته: تحسين الإقرار بصلاحية النماذج الفيزيائية المستعملة في برمجيات المحاكاة.

إن المنشآت ذات الطابع الأساسي، التي تستعمل أحياناً موائع للمحاكاة (CFC مثلاً) والمجهزة بأدوات دقيقة جداً لظواهر موضعية (سلوك السطوح البينية سائل- غاز، مثلاً) سمحت بإرساء أسس النماذج الحالية وتسمح أيضاً، بفضل تطوُّر تقنيات القياس، بتطوير نماذج الغد.

وأما المنشآت ذات الطابع التحليلي فقد صُمّمت لتمثيل، أحياناً في سلّم صغير، هندسة مكوّن (مولّد بخار) أو جزء من مكوّن (تجميع وقود) من مكوّنات المفاعل. وتعمل غالباً في شروط فيزيائية تمثيلية (ماء – بخار وربما تحت ضغط عالٍ) وتسمح، بفضل قياسات أكثر شمولية (فروق الضغط، كثافة المائع وسرعته، درجات حرارة المائع والبنى...) لكنها كثيرة، بالحصول على معلومات عن ظاهرة خاصة (غليان، تكاثف...) وباستنتاج ترابطات تؤدّي إلى تغذية قوانين الإغلاق للنماذج الرقمية.

وأما المنشآت ذات الطابع الشامل، ويقال لها أيضاً عرى المنظومات، فهدفها دراسة التأثرات، التي هي غالباً قويّة جداً، بين مختلف الظواهر. ولكي تكون تمثيلية لسلوك مفاعل في حالة طارئة، ينبغي أن تلتزم تشابهاً مُعيّناً من حيث الهندسة والسُلّم. وهكذا استُثمر بتسي Bethsy في مركز مفوضية الطاقة الذرية في غرونوبل من 1968 إلى 1998، وهو كناية عن نموذج مصغّر بمقياس 1/1 في الارتفاع و 1/100 في الحجم لمفاعل بالماء المضغوط REP طاقته 900 MWe. وقلبه الذي يحوي أكثر من 400 قلماً بالتسخين الكهربائي، كان يُبرّد، كالمفاعل الحقيقي، بجريان الماء المضغوط في العرى الثلاث الأولية، المزودة كل منها بمضخة ومُولّد للبخار. وهناك حوالي 80 اختباراً غطّت تغطية كاملة جداً مختلف أنواع التطوّرات الانتقالية الطارئة وسمحت، بفضل مجموعة أدوات متطورة جداً (أكثر من 1200 قناة قياس)، بتكوين قاعدة عريضة من البيانات لإقرار صلاحية برمجيات مثل كاتار.



الشكل 2- التحقق من نتائج حساب ببرمجة كاتار لما ينجم عن فتحة في الفرع البارد من مفاعل بالماء المضغوط بالمقارنة بنتائج اختبار أُجري على المنشأة بتسي.

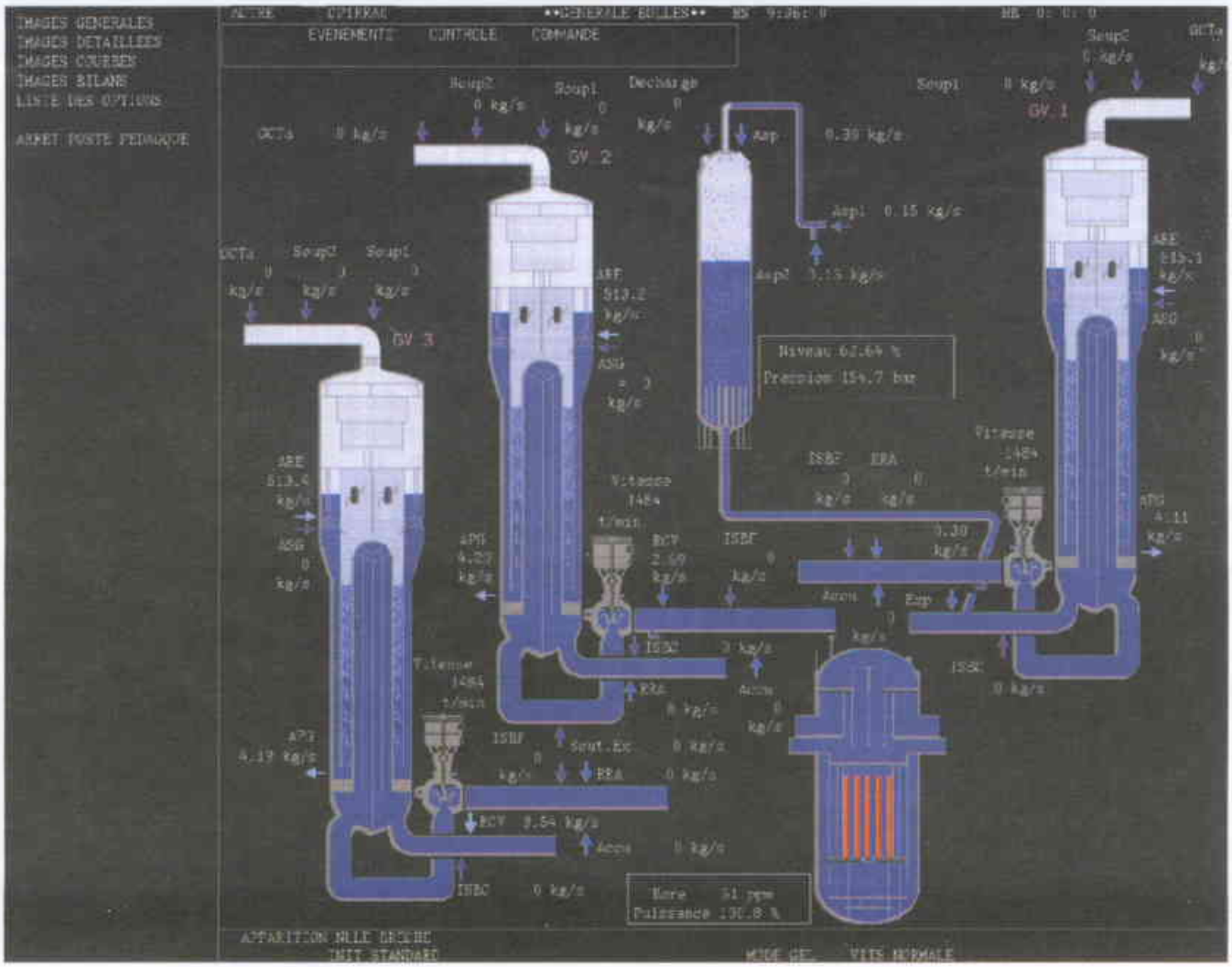
بعملية إراءة مُميّزات الجريانات الثنائية الطور في الدارات المختلفة، بالنفاذ إلى فهم ظواهرية الأحداث المحاكاة. ينبغي للمحاكيات فضلاً عن ذلك أن تُكوّن أداة فعّالة لدراسات الأمان. فكان لذلك لزاماً أن يُوسّع مجال محاكاتها، خاصة نحو حالات توقُّف المفاعل، أثناء التشغيل النظامي أو العارض أو الطارىء، وكذلك نحو حالات أخرى طارئة، ويكون تأهيل أفرقة العمل هاماً جداً لمواجهتها: إنّ الهدف الأساسي لمشروع سكار Scar (Simulator Cathare Release) كان إذاً دمج الكود المعياري في المحاكيات سيبا، مع كل ما يفرضه من قيود بشأن الزمن الحقيقي.

منهجية مشروع سكار

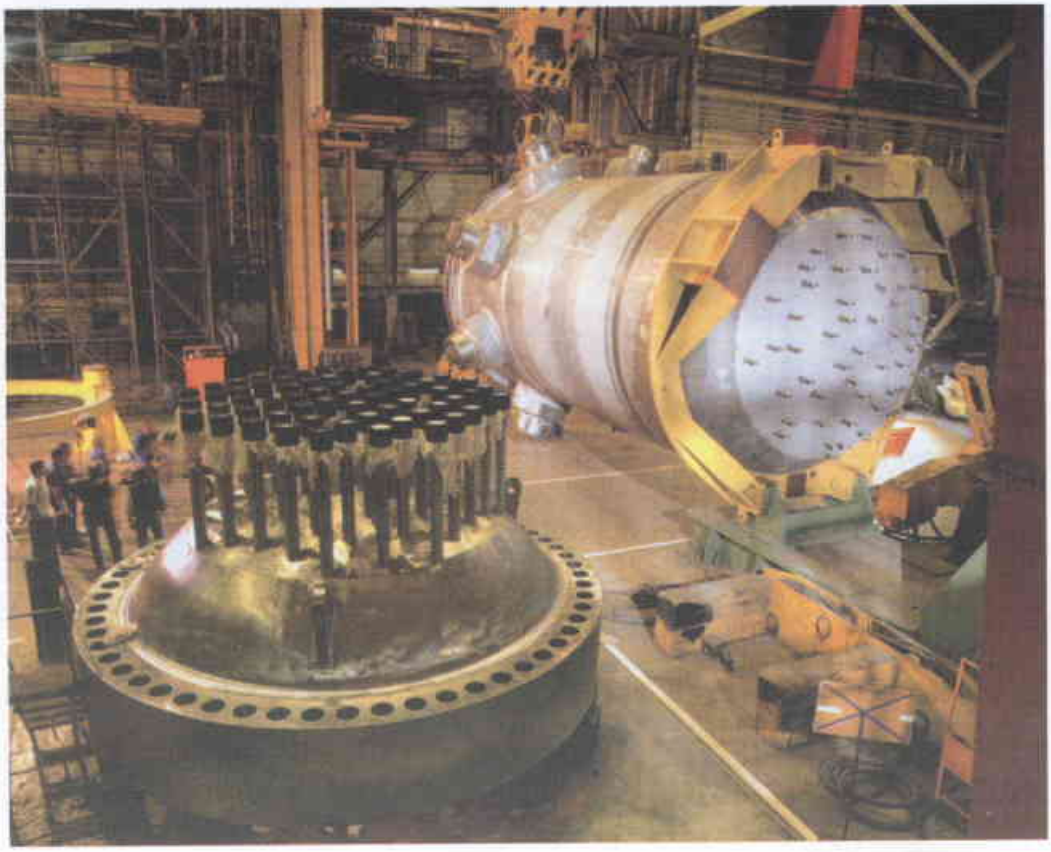
إنّ دمج كاتار في مُحاك هو أولاً مسألة سطح بَيْني. يُنَمْذج كاتار الدارتين الأولية والثانوية للمفاعل وأيضاً دارة التبريد عند الإيقاف[2] (RRA) ويتبادل البيانات مع مئة تقريباً من مكوّنات أخرى (وعاء، دارات أخرى، مراقبة، تحكّم) التي تمَّ تأمين تشغيلها بنماذج بسيطة وضعت في أماكنها في المحاكيات الأولى. هذا وإنّ مقدرة كاتار علي نمذجة RRA بالإضافة إلى الدارتين الأوّلية والثانوية شكلت مرحلة من مراحل مشروع سكار.

إنّ العمل الأساسي في المشروع هو تحديد واضح على الورق لحدود ما سيحسبه كاتار وأيضاً المتغيرات الفيزيائية التي ينبغي تبادلها مع المنظومات الأخرى. إنّ آلية التبادلات ووتيرتها تشكلان جزءاً من شكليات المحاكيات سيبا. وينبغي لكاتار تخطيطياً أن ينضبط زمنياً مع إيقاع المحاكي، وأن يحوز في كل دورة الشروط الحدّية التي ستقود الحساب، ومن

(2) إنّ نوّر الدارة RRA هو تبريد مفاعل نووي بالماء عندما يتعذّر استعمال الدارة الاعتيادية. تفيد هذه المنظومة بشكل أساسي في إخلاء الحرارة المتبقية التي يُطلقها القلب بعد توقّف التفاعل المتسلسل.



المحطة التربوية للمحاكي سيبا 2، تغذيها البرمجية كاتار



التحضير لاختبار هدروليكي للحوض (في اليمين) المُعدّ لمحطة توليد الكهرباء التابعة لكهرباء فرنسا سيفو 1 في مصنع فراماتون-ANP- في شالون سان مارسيل. وفي اليسار، يُرى غطاء الحوض مع فتحات عبور قضبان التحكم.

ثمَّ أن يُقدّم المتغيرات اللازمة إلى المنظومات الأخرى. لذلك، فقد زُوِّد كاتار بكل السطوح البَيْنيّة التي تُؤمن تبادل المتغيرات (الغَرْز وأدوات التشغيل وأخذ الأعطال بالحسبان) ويجري الأمر بحيث يُكوَّد هذا التبادل بصورة بسيطة وتلقائياً. وثم جرى تقطيع الدارات الثلاث ونمذجتها وفق التوصيات المنوّه بها في دليل المستخدم.

وثمّة مظهر آخَر للمشروع: ومفاده تأمين مستوى جيد من التأثرية للمُحاكي، وعليه زيادة سرعة حساب الكود بالبحث عن الزمن الحقيقي. إن بلوغ هذا الهدف يمرُّ، من جهة، بتنفيذ تقنيات الحساب على التوازي (المؤطر B، الوسائل المعلوماتية للمحاكاة الرقمية ذات الكفاءة العالية) على آلات متعددة المعالجات (تمَّ الحصول على عامل تسارع 50 هذه السنوات الأربعَ الأخيرة)، ويمر من جهة أخرى، بجعل الطريقة الرقمية لميز النموذج الفيزيائي موثوقة.

لقد كان دمج كاتار، المُعدّ جيداً، في المحاكي عملية ناجحة، وقد أقر حالياً بصلاحيته بـ 23 تطويراً انتقالياً من النوع القيادي والطارىء. وبإنجاز هذه الأعمال، تقوم نسخة صالحة تماماً عن البرمجية بإنعاش المحاكي سليل مشروع سكار. هذا، وبالإضافة إلى السطوح البينية التقليدية للقيادة (إجمالية ورسوم بيانية للقيادة...) تملك هذه الأداة "موقعاً تربوياً" يسمح بإراءة طبيعة الجريانات الثنائية الطور في الزمن الحقيقي في مختلف الدارات.

رؤية إجمالية وتركيبية لتتابعات طارئة

إنّ المحاكاة الرقمية للحالات الطارئة في المفاعلات النوويّة هي طريق لا يستغنى عنها لمعرفة أمان المنشآت معرفة أفضل، وضبطه وبالتالي الارتقاء به. وتستند البرمجيات المستخدمة لهذه المحاكاة إلى نماذج فيزيائية مُعقّدة وتتطلّب إذاً جهداً هاماً لإقرار صلاحيتها على أساس تجريبي متّسع جداً.

فدمج برمجية في مُحاكيات الدراسة أو التأهيل، تُعتمد لتحليل الأمان كبرمجية كاتار، يبدو خطوة متقدّمة هامة جداً، إذا كانت تسمح بربط نمذجة عالية المستوى في ترموديناميكية السوائل الطارئة بالبيئة الكاملة وبالسطح البَيْني البياني للمُحاكي. وباعتبار المُحاكي أداة تأهيل وتحليل للظواهر الفيزيائية، فإنه يُقدّم للمُشغّلين والمهندسين المكلفين بدراسات الأمان رؤية شاملة وتركيبية للتتابعات الطارئة مع احتفاظها بصلاحية الظواهر الفيزيائية المُحاكاة.

إنّ التطوّر اللازم من حيث واقعية المُحاكيات (المؤطّر E، التطوّرات في هندسة البرمجيات) ستؤدي إلى تحسين النماذج الفيزيائية، والطرائق الرقمية ومعمارية البرمجيات. وإذا ارتبطت هذه الأدوات الجديدة بتقنيات التصوير الافتراضي، فإنها ستصبح في قلب محاكيات الغد.

محاكاة التدخل في الوسط المؤذي

لوران شودورج
مديرية البحث التقاني - مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية
مركز فونتين أوروز

مُلخّص

التأكد من أن العاملين الذين يؤدون أعمالاً في المنشآت النووية لن يتعرضوا للإشعاع إلا أقل ما يمكن، ومعه الاستمثال التقني و الاقتصادي لكل عمل من هذا النوع هما الإمكانيتان اللتان تفتحان مستقبلاً كبيراً أمام محاكاة التدخل في الوسط المؤذي.

الكلمات المفتاحية: جرعة الإشعاع، التدخّل، وسط مؤذ، تآثر، تكييف، معدل الجرعة.

الهدف الأول : الوقاية الإشعاعية

التدخلات البشرية في المنشآت النووية لازمة بانتظام، سواء للصيانة أو للإصلاح أو للتفكيك. والشغل الشاغل للمسؤول عن هذه التدخلات، بصرف النظر عن إنجاحها تقنياً، هو التأكد من أن الأشخاص الذين ينفذونها لن يتعرضوا للإشعاعات إلا أقل ما يمكن. وهذا هو المقصود بالمبدأ ألارا Alara[1] الذي يعرفه مستثمرو النوويات جيداً. ولكي يجري التقيد به على أحسن وجه سيضع خبراء الوقاية الإشعاعية، الذين يمتلكون معطيات المنشأة، سيناريو للورشة يجمع بين التدخل السريع، ووضع حوائل الوقاية، واستعمال التجهيزات (ألبسة واقية ...) لعمال التشغيل، وحتى استخدام وسائل التشغيل من بعد.

إن تعديل مثل هذا السيناريو، المحرر أساساً بشكل كتيبات ومخططات، وإقرار صلاحيته يكون صعباً للغاية، لذلك يبدو أن اللجوء إلى المحاكاة يشكل وسيلة ممتازة لإعداد التدخل بصورة أفضل. وينبغي أن تأخذ العملية بالحسبان كلّ مكونات المهمة الحقيقية في تعقيدها (المشغلين والأدوات والمدة)، وأن تُقدر بالطبع جرعات الإشعاع التي سيخضع لها الأشخاص والمواد الحساسة (انظر المؤطر).

المفاعل UNGG الموجود في محطة التوليد في بوجيْ (إين) التابعة لشركة كهرباء فرنسة والموقوف في27 أيار 1994.

قبل التدخل وأثناءه وبعده

إن هذه المحاكاة مفيدة قبل التدخل وأثناءه وبعده. فقبل التدخل، تتيح المحاكاة استمثال إعداده (تقدير أبعاده واختيار أفضل سيناريو له حسب التقييدات التقنية والاقتصادية والوقاية الإشعاعية)، وتدريب المشغلين بمطالبتهم بمتابعة عمليات الشخصية التي تمثلهم في السيناريو ثم تقليد هذه العمليات، وتقديم ما يدعم تبرير التقيد بقواعد الوقاية الإشعاعية. أما أثناء التدخل، فالمحاكاة تقوم بمساعدة المشغّل، وبمقابلة نتائج المحاكاة مع التدابير والإجراءات المتخذة على الأرض، وربما تساعده على تغيير اتجاه المهمة في الزمن الحقيقي. وأما بعد التدخل، فالمحاكاة توطد استعادة التجربة، وتتيح تحسين الجهاز المحاكي بفضل الإرشادات المستمدة من المهمة الواقعية (إعادة ضبط البيانات "المعطيات" مثلاً).

انطلاقاً من الخبرة المكتسبة من تطبيق تقنيات الواقع الافتراضي، على التحكم في منظومات التشغيل من بُعد المعقدة،

(1) alara (As low As Reasonably Achievable) يستند هذا المبدأ الذي أوصت به عام 1977 اللجنة الدولية للوقاية الإشعاعية، وهي هيئة مستقلة غيرحكومية ، إلى تخفيض جرعات الإشعاع التي يتلقاها العاملون على الصعيدين الفردي والجماعي "إلى أدنى حد معقول يمكن إنجازه بمراعاة القيود الاقتصادية والاجتماعية"

بدأ الباحثون التابعون لخدمة الإنسالية والمنظومة التفاعلية في المختبر List (مختبر تكاملية المنظومات والتقانات التابع لإدارة البحوث التقانية) الموجود في مركز مفوضية الطاقة الذرية في Fontenay-aux-Roses بإحكام صنع منصة لمحاكاة الورشة تستجيب لهذه المتطلبات.

منظومة ابتكار مضاعف

توجد اليوم كودات حساب عديدة، تتيح محاكاة الظواهر الفيزيائية من أجل تقدير الجرعات في الوسط المؤذي.

بعضها يُحدّد تنشيط المصادر، وبعضها الآخر يقدر سويات التعرض أوالتكاليف، انطلاقاً من قواعد البيانات. وأخيراً يحسب أغلبها الجرعة في نقطة ما، وفقاً لنشاط المصادر وطبيعة الأشياء الحاضرة.

تعتمد هذه الكودات الأخيرة، التي هي من ثمار أفكار وتطويرات المختصين في هذا المجال [2]، على نماذج فيزيائية مستعملة معقدة نوعاً ما، وعلى طرائق مختلفة في الميز الرقمي، الحتمية منها أو الإحصائية.

ولكي تأتي المحاكاة واقعية، يجب أن يكون موقع التدخل معروفاً بأدق ما يمكن استناداً إلى الخرائط، وإلى معرفة التعديلات المحتملة وإلى الكشوف الميدانية. وأول ورقة رابحة يحملها محاكي التدخل تكمن في المزاوجة بين فئتين من الأدوات: أولاهما برمجيات تصميم بمساعدة الحاسوب CAO أو برمجيات عرض على الشاشة تقوم بوصف المنشأة والمهمات، والفئة الثانية تتضمن الكودات الرقمية (تقدير قياسات الجرعات) التي شاع استعمالها في هذه الأيام منفردة وبصورة ثابتة.

أما الورقة الرابحة الثانية الابتكارية والطموحة جداً فتكمن في تقدير الجرعات مباشرة (على الخط) وفي الزمن الحقيقي

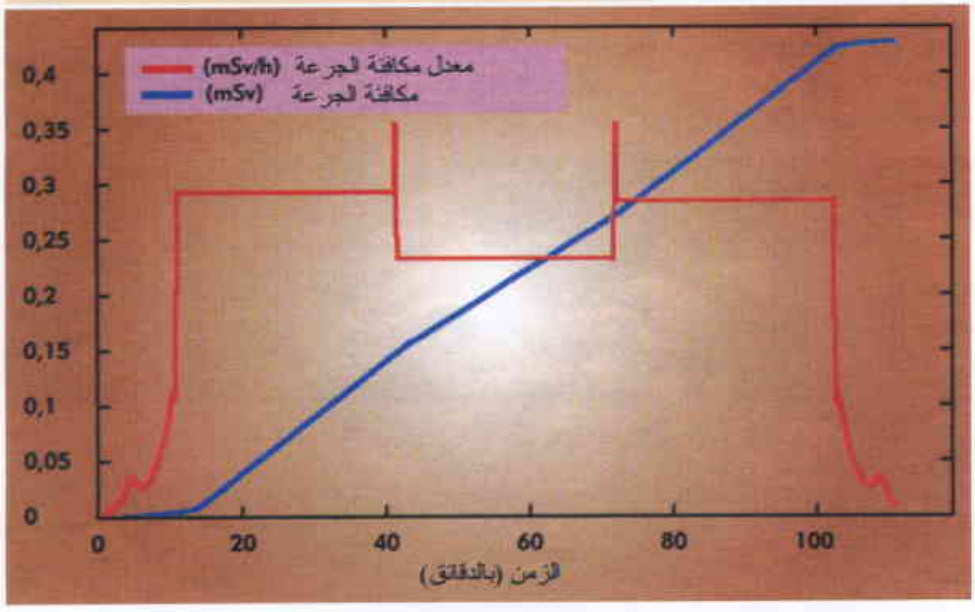
(2) قسم دراسات المفاعلات والرياضيات التطبيقية التابع لإدارة الطاقة النووية في مركز ساكلي لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية خاصة.

الجرعات ومعدلاتها

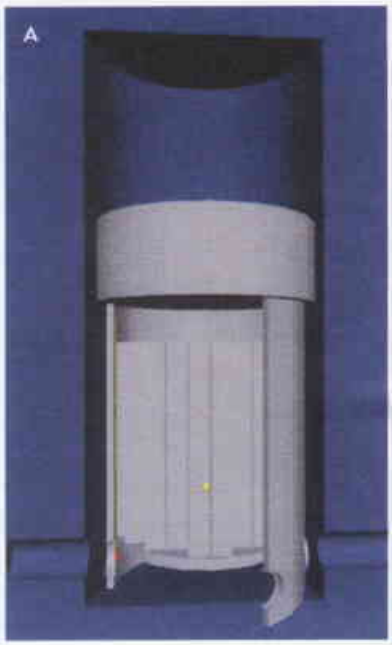
في الوسط المؤذي، ترسل مصادر النشاط الإشعاعي إشعاعات (أشعة X وأشعة غاما) أو جسيمات (ألفا وبيتا ونترونات)، تتنقل وتتأثر مع العناصر التي تصادفها. وتخضع هذه التأثرات لقوانين الاحتمال، التي تتوقف على طبيعة المادة المستهدفة (تركيبها الذري) وعلى صفات الجسيم أوالإشعاع (اتجاه انتشاره وسوية طاقته). والتأثرات مع إحدى المعدات أو مع المشغل تنتج طاقة، يبقى بعض منها في مكانه. ويُعبّر عن هذا الجزء بالجرعة، وهي تمثل كمية الطاقة التي تتلقاها كل وحدة كتلة من المادة. ووحدات الجرعة هي "غراي" (الوحدة القانونية) ورمزها Gy، و"راد" (الوحدة القديمة) ورمزها rad 1Gy=100 rad=1 J/kg.

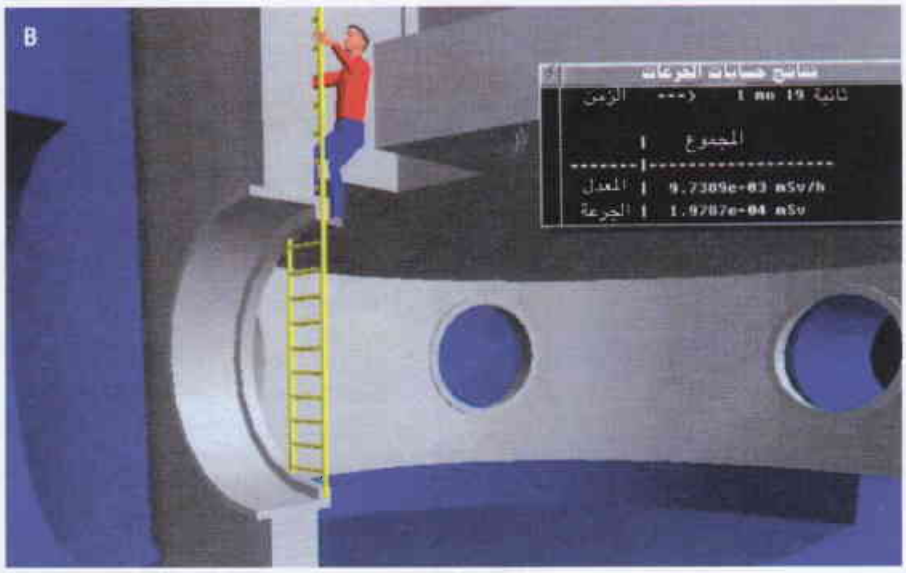
ويختلف الأثر البيولوجي في الإنسان المشغّل باختلاف الإشعاعات وطبيعة النسيج. ويستخدم عندئذ مكافئ الجرعة، ويقاس بوحدة "سيفرت" (الوحدة القانونية) أو بالوحدة "ريم" (الوحدة القديمة) ورمزها rem: 1Sv=100 rem.

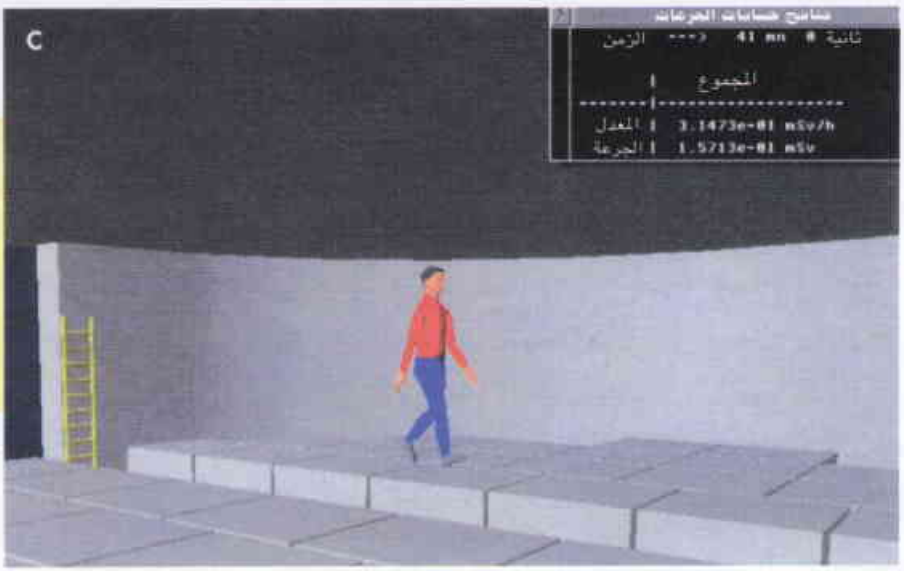
و"صبيب الجرعة" (يقاس قانونياً بالوحدة Gy/s، وغالباً بالوحدة Gy/h أو بالوحدة rad/h) الذي يختص بالتأثير في المعدات، ومعه صبيب مكافئ الجرعة (يقاس بالوحدة Sv/h أو بالوحدة rem/h) الذي يختص بالتأثير في الأشخاص، يعبّران على التوالي عن الجرعة المتلقاة في وحدة الزمن وعن مكافئ الجرعة المتلقاة أيضاً في وحدة الزمن.



التطور بدلالة الزمن لمعدل مكافئ الجرعة التي يتلقاها مشغّل يقوم بتفكيك فوق مبادلات خزان المفاعل UNGG الموجود في محطة التوليد في Bugey-1. يزداد هذا المعدل أثناء صعود المشغل لأنه يقترب من مصادر الإشعاع. ومن أجل كل عملية في الموقع حيث يبقى فيه المشغل ساكناً، يبقى المعدل ثابتاً (الخطوط الأفقية الحمراء)، يمثل المنحني الأزرق المتصاعد دوماً تكامل المعدل المتلقى مع مرور الزمن. وتشير قيمته النهائية إلى الجرعة الكلية المتلقاة.





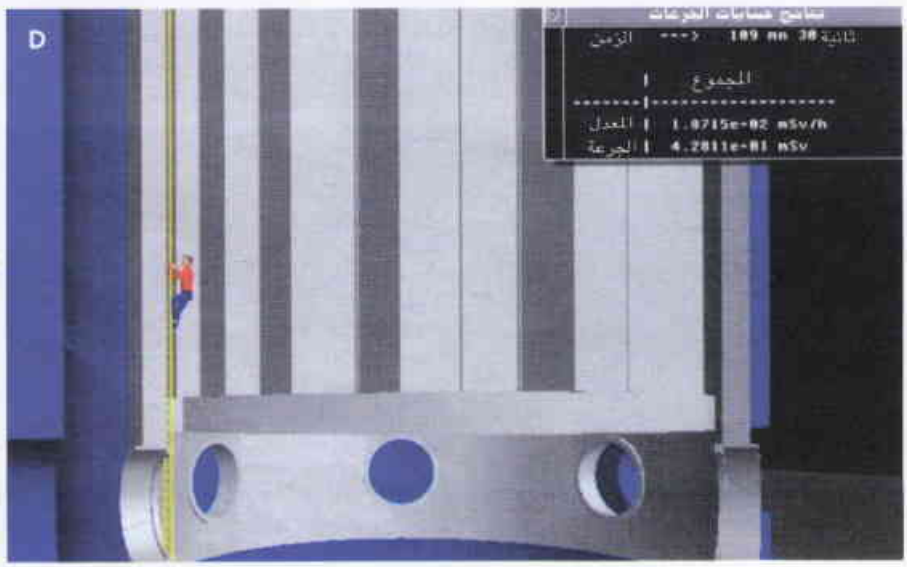


المراحل الأربع لمحاكاة التدخل في المفاعل UNGG الموجود في محطة التوليد Bugey-1، بعد وصول عامل التشغيل إلى قاعدة الخزان (منظر إجمالي)، صعد على طول مبادلات الحزان، وراح يتنقل فوقه للقيام بالأعمال المطلوبة قبل أن ينزل وينهي تدخله. وتظهر نتائج حسابات قياس الجرعات في يمين الشكل إلى الأعلى.

أثناء المحاكاة. وما يقدم هكذا من نشاط متبادل يحسن بالفعل كثيراً من إمكانيات المحاكي للتحليل.

و المراعاة الفورية للتطورات، التي تحدث في الساحة (مرور رافعة متحركة مثلاً قد "يخفي" أحد المصادر نقطياً ويحد من تأثيراته)، تُمكّن المحاكي من تغيير استراتيجية التنفيذ أثناء المحاكاة. وإذا عرف المشغل مباشرة أثر الإشعاعات التي يتعرض لها، وهو يعدّ لتدخله أو يكرره، يستطيع استمثال أعماله مباشرة.

يقضي البرنامج الكامل بأن ينصرف المحاكي تماماً مثل منصة نسقّية، مخولاً بالتدريج نَسقات برمجية مختلفة، بدءاً من تقدير قياسات الجرعات. وتتيح له هذه البنية المعمارية أن يتقدم في التطور حسب الاحتياجات ومع تحسّن الأدوات.



مرحلة تأهيل أولى قائمة على حالة حقيقية

إن إحكام عمل المحاكي تحدّه أيضاً شروط مبسطة للغاية: خوارزمية لحساب الجرعات، مناسبة لمقاربة " الزمن الحقيقي"، واقتران ببرمجية تصميم بمساعدة الحاسوب، وإدارة مصادر إشعاع نقطية. تتيح هذه الاختيارات التمهيدية إقرار صلاحية مفهوم البنية المعمارية بشأن إمكانية الصنع التقني (ضمن هذه الشروط)، والحصول على أول نموذج مصغّر توضيحي .

أجري أول توصيف لإمكانات مثل هذه الأداة على حالة دراسة حقيقية. فقد اعتمدت شركة التقنيات في وسط مؤيّن على محاكاة بهذا النموذج المصغّر، لإكمال دراسة تتعلق بعمليات تفكيك تجري فوق مبادلات خزّان المفاعل UNGG(يورانيوم طبيعي–غرافيت–غاز) الموجود في محطة التوليد فيBugey-1.

والمحاكاة التي تعتمد على الهندسة الحقيقية للمنشأة، وتتقيد بمعلوماتها الإشعاعية، (الجرعات المقيسة في الموقع) تؤكد السيناريو الذي تصورته شركة التقنيات في وسط مؤيّن، وفيه يمكن للمشغّل أن يصعد على طول المبادلات، وأن يعمل لمدة ساعة ونصف تقريباً (مؤدياً ثلاث مهام مدة كل منها نصف ساعة) على عناصر شبكة الأنابيب، ثم ينزل مفسحاً المجال لوسائل التشغيل من بعد.

التكييف مع تعقيد الواقع

قريباً سيتكيف النموذج المصغّر مع تعقيد العمليات الحقيقية، بفعل تزايد أوجه التعاون مع مختلف الشركاء.إن اكتمال الإتقان والاستمثال في إدارة الموارد (مراعاة جانبي الحجم وعدم التجانس)، والربط بمعلومات مستقاة من الميدان (إعادة تركيب البيئة، وقياس نشاط المصادر....)، وإنشاء نسقَات أخرى (محاكاة دقيقة للمهمات التَّماسية، مثل تقطيع المادة، و تركيب المكوّنات وفك تركيبها)،كل ذلك يشكل بالفعل جزءاً من أوجه التفكير والتطوير المأخوذ بها حالياً و للمستقبل، حتى تتلاقى في حينه عند صنع أداة تشغيلية لمحاكاة التدخل، تتكيف مع احتياجات المستثمرين.

أوجه التقدم في النمذجة الأولية الافتراضية

ك. أندريو
إدارة البحث التقاني
مركز فونتوني • أو • روز التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية

مُلخص

أن تتمثل شيئاً وسلوكيته، من قبْل أن تحصل على معالم أولية مادية له، أصبح إمكانية تستثمرها الصناعة أكثر فأكثر. وما حصل من تقدم في النمذجة الأولية الافتراضية، التي صارت تفاعلية تبادلية بفضل الحساب في الزمن الحقيقي، يفتح آفاقاً جديدة أمام هذا الشكل من المحاكاة في ميادين متعددة. وتشترك مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية في هذه التطورات اشتراكاً نشيطاً.

الكلمات المفتاحية: النمذجة الأولية الافتراضية، بيئة افتراضية، نموذج مصغّر رقمي، منصة الواقع الافتراضي.

من التصميم إلى الصيانة

أتاحت النمذجة الأولية الافتراضية، عند استعمالها في الأوساط الصناعية، اختصار زمن التطوير، وخفض تكاليف تصنيع المنتجات، وكذلك تكاليف التأهيل والصيانة مجتمعة. لقد أصبحت قدرات الحساب المتاحة تسمح بعد الآن، بتخليق بيئات افتراضية تمثل منظومات مصنّعة تقترب سلوكيتها من السلوكية التي تكون لها في العالم الحقيقي. كما أنها تسمح أيضاً بترئية هذه الأشياء الافتراضية على الشاشة والتعامل بها في الزمن الحقيقي، الأمر الذي يأذن بالتفاعلية التبادلية.

ليست النمذجة الأولية الافتراضية في الواقع إلا الجزء القَبْلي من عملية إدارة الدورة الحياتية للمنتج التي تأخذ في حسبانها جميع تقييدات صنع المنتج (الإنسالية، ودراسة ظروف العمل)، واستخدامه وصيانته (التدريب). ويقترح جميع كبراء التصميم بمساعدة الحاسوب، مثل كاتيا Catia (منظومات داسّو) أو شركة التكنولوجيا الوسيطية (البارامترية)، اتّباع هذا النهج من الآن فصاعداً. ويعبّر عن هذا الطلب في جميع قطاعات الصناعة الناقلة، مثل قطاعات السيارات والمركبات الجوية والفضائية والنقل والطاقة، وكذلك أيضاً في العمارة والثقافة والطبيات مثلاً.

يستعمل صناعيو السيارات والمركبات الجوية والفضائية حالياً أيضاً وبصورة واسعة النماذج المصغّرة المادية من أجل "النمذجة الأولية" لعمليات التركيب أو الصيانة. وعندما تُستخدم هذه النماذج المصغّرة كأداة للمشاهدة تظهر مع ذلك بعض المساوئ، فهي باهظة الثمن، وغالباً بالية العهد من قبل أن تستعمل، لأنها لاتعكس دائماً آخر طراز للمنتج. لذلك يسعى هؤلاء الصناعيون أكثر فأكثر إلى الاستعاضة عنها بالنموذج المصغّر الرقمي[1] وتقانات الواقع الافتراضي. ويجب أن تتيح

صورة افتراضية لقمرة الطيار في طائرة إيربوس القادمة A 380. تتوسع صناعة الطيران أكثر فأكثر في استخدام النماذج المصغّرة الرقمية لتصميم طائراتها.

هذه التقانات غمر الكائن البشري بصورة واقعية في عالم افتراضي، والاستفادة من الميزات الناتجة.

تطوير السطوح البينية اللّمْسية

لنأخذ كمثال أول تصميم حجرة سيارة من الداخل. فالمصممون توّاقون إلى معرفة ما إذا كان السائق يستطيع الوصول بسهولة إلى مختلف تجهيزات الحجرة (الراديو وعلبة القفّازات ..الخ). والممارسة الحالية تستخدم النماذج المصغّرة

(1) تعرف رابطة "تقانة المعلومات المتقدمة" النموذج المصغر الرقمي بأنه "محاكاة واقعية حاسوبية لمنتج قادر على القيام بجميع الوظائفيات المطلوبة لتصميم المنتج وصنعه وخدمته، وتستخدم هذه المحاكاة كمنصة لتطوير المنتج وعمليات إنتاجه، وللاتصال واتخاذ القرار، بدءاً من العالم الأولية لتصميم المنتج وانتهاء بصيانته وإعادة تأهيله".

المادية أو الترئية المجسّمة لنموذج رقمي على الشاشة، للحصول على نمذجة أولية لداخل المركبة. ويبدو من الحكمة أن تستنبط سطوح بينية لَمسيْة Haptique[2] تتيح "تلمّس" هذا الداخل الافتراضي، فتستطيع دراسات ظروف العمل أن تستفيد من هذه السطوح البينية، لكي توسّع ميدان الخبرة الذي تغطيه عند تصميم المركبة. وهذه الطريقة أسرع بكثير من تحقيق نموذج أولي مادي وأقل تكلفة، وأكثرشمولاً.

والمثال الثاني نأخذه أيضاً من صناعة السيارات وهو عملية تركيب القطع. يستخدم مصممو خطوط الإنتاج حالياً قطعاً مصنّعة بالطباعة الحجرية المجسّمة، لكي يختبروا عملية تركيب القطع والعُدّة التي تلزمها. ويرى هؤلاء المستخدمون أن استعمال برمجيات المحاكاة الحالية، من النمط كاتيا أو رويكاد، معقد جداً لمثل هذا النمط من العمليات. غير أن المصممين يستطيعون في مستقبل قريب، استخدام منظومات الترئية المجسّمة على الشاشة لنمذجة خطوط إنتاجهم نمذجة أولية من ناحية أولى، واستخدام السطوح البينية اللمسية مقرونة مع برمجيات المحاكاة المادية في الزمن الحقيقي (حساب الاصطدامات وقوى التماس) من ناحية ثانية، لكي يحصلوا على نماذج أولية للمهمات. وهدفهم من ذلك جعل أصحاب المهنة غير الاختصاصيين قادرين على استعمال أدوات النمذجة الأولية الافتراضية من دون أن يحتاجوا إلى برمجة سطر واحد من الكود مثلاً.

ويبدو أن التطبيقات الكبيرة الأخرى للنمذجة الأولية الافتراضية والارتكاس اللمسي، سوف تكون، في مدى قريب جداً، هي المحاكاة الافتراضية لعمليات تركيب القطع أو الصيانة، وكذلك التدريب على السلوك التقني. ولكن كل هذه التقانات يمكن استخدامها أيضاً في الميدان الثقافي. وفي إطار المشروع الأوربي MUVII (السطح البيني التفاعلي الافتراضي بين عدة مستعملين)، تطور أفرقة مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية مفهوم الزيارة الافتراضية لمتحف مع ارتكاسها اللمسي. فالزائر يستطيع مثلاً ترئية التماثيل على الشاشة مجسّمة، كما يستطيع لمسها افتراضياً. ومسألة معرفة ما إذا كانت تقانات النمذجة الأولية الافتراضية قادرة على الحلول كاملاً محل استخدام النماذج المصغّرة المادية، أصبحت من أحداث الساعة. والقدرة الحسابية التي وصلت إليها الحواسيب الشخصية والبطاقات البيانية المصاحبة أصبحت تتيح منذ أمد قريب، وبفضل القفزة الحاصلة في ألعاب الفيديو، التفكير بانتشار هذه التقانات في الصناعة بكثافة كبيرة.

المنظومة الغامرة والذراعان فيرتنوز في منظومة Phare تتيح عملاً افتراضياً ثلاثي الأبعاد واقعياً جداً.

مشروع المنصة الفرنسية للواقع الافتراضي (PERFRV)

أبدى باحثان في نهاية عام 1999، وهما ريمون فورنييه من مختبر تكامل المنظومات والتقانات (List) التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية، وبرونو أرنالدي من معهد الأبحاث المعلوماتية والمنظومات العشوائية (Irisa) التابع لمعهد (Inria)

(2) لَمسي (Haptique): جهاز يتيح استعادة الإحساس اللمسي عند الأصابع أو اليد.

المؤطر 1 الهيئات الشريكة في مشروع المنصة PERFRV

إن مشروع المنصة PERFRV. التي هي مركز تجريب في الواقع الافتراضي حول موضوع مكتب الدراسات المستقبلي، يضم هيئات شريكة من عالم البحوث ومن الصناعيين. والهيئات المجمعية (الأكاديمية) الشريكة في المشروع هي: معهدا INRIA (المعهد الوطني لبحوث المعلوماتية والأتمتة) في رين وروكانكور، والمختبر List التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية، ومدرسة المناجم في باريس، ومعهد الصورة في شالون – سور – ساون، ومختبر بوردو لبحوث المعلوماتية (LABRI)، ومختبر الإنسالية في باريس (LRP)، ومختبر المعلوماتية للميكانيك وعلوم المهندس (Limsi). أما الهيئات الصناعية الشريكة في المشروع فهي: رابطة تطوير الإنتاج المؤتمت (Adepa)، (والمركز المشترك للأبحاث الجوية الفضائية – ماترا) التابع لـ (EADS/CCR)، والمعهد الفرنسي للبترول (IFP)، ومركز لافال للموارد التقانية (CLARTE)، وطيران داسّو، وصناعات المجموعة الصناعية للأسلحة البرية (GIAT). وشركة بيجو المغفلة (PSA)، وشركة رينو، ونقليات ألستوم، وإدارة الدراسات والبحوث في شركة كهرباء فرنسة (EDF).

المؤطر 2 : المنصة Phare (المنارة)

الشكل: مخطط مبدئي لمنصة الواقع الافتراضي Phare

تتألف منصة الواقع الافتراضي Phare التي أنشأها المختبر List التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية من خمسة عناصر رئيسة (انظر الشكل):

•مُحاكٍ مادي في الزمن الحقيقي. إن مثل هذا المحاكي للتعبير البياني مرصود أساساً لوصف العالم الافتراضي والأشياء التي تقطنه عيانياً. تمتلك مختلف العناصر التي تكوّن المشهد الافتراضي نعوتاً أساسية (شكل العنصر وموضعه في الفضاء)، ونعوتاً تكميلية تغني الواقعية (النسج) أو تضيف معلومات خاصة عن الحالة (كود الألوان للتعبير عن سوية الحرارة مثلاً). وهذا النوع من المحاكيين يقدم أيضاً مفعولات تكميلية غالباً (إضاءة وحركة المصوّرات....)، وأحياناً يقدم وظائفيات الرسوم المتحركة أو الإدارة السينمائية.

في المشهد الواقعي، يتدخل عدد من الظواهر الفيزيائية، قد نرغب في محاكاتها، سواء أكانت حرارية أم موجية أم ميكانيكية أم تحريكية وحسب طبيعة النموذج تكون المعادلات النموذجية الموضوعة (للانتشار، والنقل) وطرائق حلها مختلفة.

•منظومة التقاط الحركة في الزمن الحقيقي ضوئية، اقترحتها ActiCM (الشركة الناشئة في المختبر List التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية). تتألف هذه المنظومة من 16 مصوِّرة (كاميرا)، موزعة على 4 أعمدة، وتشغّل محسّات قياس ضوئية ثلاثية الأبعاد، صممتها الشركة ActiCM وصنعتها وسوّقتها تجارياً. ويتألف كل محسّ فيها من مصورتين فيديو رقميتين، وإضاءتين نبضيتين في المجال تحت الأحمر (IR)، وجهاز تحكم إلكتروني. وكل محسّ قادر على أن يحدد بدقة تحديداً ثلاثي الأبعاد، مواقع النقاط التي تجسّدها عادة دريئات لاصقة ارتدادية الانعكاس. وهذه الدريئات منفعلة (خاملة)، أي تجتنب استعمال أدوات تقيد الجسم المتحرك (توضع في مكانها بسرعة، لاتحتاج إلى تغذية كهربائية). وتوجد إضاءة بالأشعة تحت الحمراء القريبة ترافق كل رأس لكي "تنشّطه".

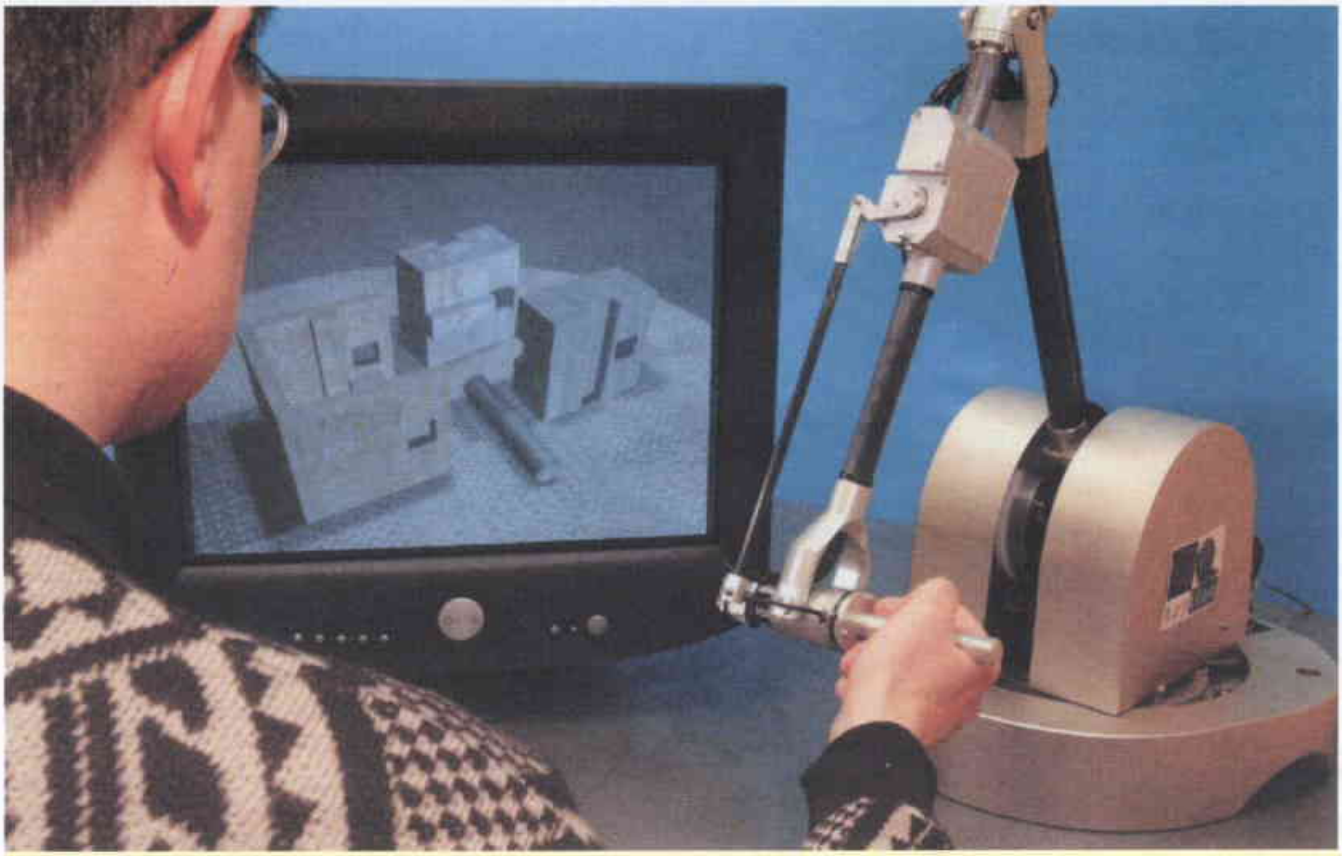
شرح الشكل: يتجول عامل تشغيل في الفضاء ثلاثي الأبعاد الذي استعادته في المنصة Phare منظومة ترئية مجسّمة على الشاشة. يتضمن مستويي عمل "الجدار والأرض" وأجهزة إسقاط ارتدادية.

وعندما توضع مثل هذه الدريئات مرتّبة وبعدد كاف فوق الجسم، فإنها تسمح بمعرفة وسطاء (بارامترات) موقعه واتجاهه في كل لحظة في الزمن الحقيقي. ويمكن استخدام عدة محسّات مترابطة تسمح بمتابعة انتقالاته.

•سطحان بينيان لهما ست درجات حرية، مع ارتداد جهد للذراع فيرتئوز 6D-RV™ من هابسيون (شركة ناشئة في المختبر List التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية). والسطح البيني فيرتئوز 6D-RV™ الذي صممه قسم الإنسالية والمنظومات التفاعلية في المختبر List التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية، وحققته الشركة هابسيون، هو سطح بيني لمسي، يتيح لمستخدمه أن يلمس ويتعامل بالأشياء الواقعة في البيئة الافتراضية، بحساسية بالغة جداً. وهو يفتح آفاقاً متعددة لتطبيقه في القطاعات الصناعية (نمذجة أولية افتراضية، تدريب على التصرفات التقنية)، والطبية (الجراحة من بعد، ومساعدة الأشخاص المُعوقين، وإعادة التأهيل) وقطاع الجمهور العام.

•حشد من الحواسيب الشخصية مكرس للرسوم البيانية. وسيكون موقع المختبر List أحد المواقع الأولى التي ستستخدم في فرنسة مثل هذا الحشد للترئية المجسّمة متعددة الشاشات. غير أن استخدام التقانات، من نوع الحاسوب الشخصي، للنمذجة الأولية الافتراضية، أساسي من أجل نشرها في الأوساط الصناعية.

• منظومة ترئية مجسّمة على الشاشة، حققتها باركو، تتضمن مستويي عمل، بعدا كل منهما 2.5×5 على الجدار وعلى سطح الأرض، مع إسقاط ارتدادي مجسّم (رؤية مجسّمة فاعلة).



الذراع فيرتنوز 6D-RV، التي صممها المختبر List التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية ونفذتها شركته الناشئة هابسيون. هي سطح بيني لمسي يتيح تناول الأشياء الموجودة في بيئة افتراضية وبقدر كبير من الحساسية.

في رين، رغبتهما في إيجاد بنية للتجريب، تسمح باستنباط حلول مبتكرة في المحاكاة الافتراضية، انطلاقاً من الاحتياجات الواقعية التي يعبّر عنها الصناعيون في مجالات التصميم أو التأهيل أو الصيانة أو التركيب أو التجميع. وأفضت هذه الإرادة إلى مشروع المنصة PERFRV. إنها منصة تابعة للشبكة الوطنية لتقانات البرمجيات (RNTL) أقرّت الوزارة المكلفة بالبحوث وَسَمْها في حزيران (يونيو) 2000 ومَوّلتها. وأعدَّت من أجل دعم برنامج علمي، يقوم حول عدة موضوعات في المحاكاة المادية لمنظومات ميكانيكية في الزمن الحقيقي (يجب أن يستند هذا البرنامج إلى طرائق جديدة في النمذجة الرقمية): التفاعل التبادلي المادي ـ تصرّف وارتكاس لمسي ـ الذي يفرض دراسة المحيطيات الابتكارية والعمل التعاوني (التفاعل التبادلي متعدد المستعملين في بيئة افتراضية) ودراسة ظروف العمل للسطوح البينية (المؤطر1).

يتدخّل المختبر List التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية في عدة أعمال تابعة للمشروع، تتصل بالارتكاس اللمسي ودراسة ظروف العمل والمحاكاة المادية في الزمن الحقيقي. وهو يعمل حالياً مع EADS وطيران داسّو ومعهد Inria على تقييم مختلف إمكانيات المحاكاة في الواقع الافتراضي لعملية من نوع التجميع. وتكمن العملية النموذجية في دمج تجهيزات في بيئة معقدة، مثل تمديدات الأنابيب المائية في صاري مفاعل الطائرة إيربوس. ويكمن الرهان في اقتراح حل أمثل، لمشكلة مهمة في عالم ورشة الطيران الرقمية. وهذا يقتضي دراسة معمقة لاحتياجات عامل التشغيل من المعلومات ومن الارتكاسات الحسّية، والبحث عن حل متعدد الأساليب، يستفيد من الأجهزة المحيطية والاستعاضات والخداعات الحسّية.

المنصة Phare هي جواب المختبر List

يطوّر قسم الإنسالية والمنظومات التفاعلية التابع لمختبر تكامل الأنظمة والتقانات (List)، منذ أكثر من ثلاثين عاماً، منظومات تشغيل من بعد مع ارتداد جهد لمراقبة الإنسالات والتحكم فيها من أجل تطبيقات عديدة: نووية وطبية ومنصات البترول البحرية، من أجل تقديم العون للمعوقين والجراحة من بعد. يحفز نشاط هذا القسم مؤهلات عالية في الميكانيك والإلكترونيات والأتمتة والمعلوماتية والسطح البيني إنسان – آلة، ودراسة ظروف عمل المنظومات. وهذه التعددية في التخصصات، مع مهمتها التقانية في البحث والتطوير، تتيح للقسم أن يقترح مقاربة شاملة وحيدة في فرنسة لدمج وتنفيذ منظومات الواقع الافتراضي. وفي سبيل تلبية احتياجات المشروع PERFRV، وبصورة عامة

كل حواشيه الخاصة في الواقع الافتراضي، أنشأ المختبر List التابع لمفوضية الطاقة الذرية الفرنسية، المنصة Phare التي تضم محاكياً مادياً في الزمن الحقيقي، ومنظومة التقاط الحركة أيضاً في الزمن الحقيقي، وسطوحاً بينية تتمتع بست درجات حرية مع ارتداد الجهد، و "حشد" من الحواسيب الشخصية المكرّسة للمعالجة البيانية، ومنظومة ترئية مجسّمة على الشاشة (المؤطر2).

لم تظهر محاكيات التعبير الفيزيائي في الزمن الحقيقي إلا منذ سنوات، وهي تحاكي الظواهر الميكانيكية والدينامية. وفي النمذجة الأولية الافتراضية التفاعلية، يجب بالفعل أن تحسب في الزمن الحقيقي التأثرات الميكانيكية ما بين مختلف المنظومات الفرعية. وهناك سببان مهمان يفسران هذا التطور هما: الطلب المتزايد على قطاع ألعاب الفيديو لمحاكاة الدينامية والتأثرات بواقعية أكبر، والاستطاعة التي بلغتها منظومات المعلوماتية وجعلتها اليوم قادرة على وضع معادلات نموذجية خاصة بهذا النمط من الفيزياء.

ومن الأهداف الرئيسة في البحث والتطوير في هذا المجال الجاري في المختبر List، شمل تطوير أو تكييف كودات حساب مع التقييدات المرتبطة بالزمن الحقيقي والتفاعلية التبادلية.

ومنظومة التقاط الحركة في الزمن الحقيقي تسمح مثلاً بالقيام بصورة طبيعية بقيادة مُجسَّد "أفاتار" (دمية رقمية) الذي يمثل عامل تركيب، ودراسة ظروف العمل في محطة التركيب. ويطور المختبر List أيضاً خوارزميات تسمح بتتبّع حركات الشخص الذي يقود المجسّد أفاتار(وضعية جسمه وذراعه وأصابعه).

وفي ميدان السطوح البينية اللمسية، فإن من الأهداف الرئيسة لفريق المختبر List المعنيّ بالبحث والتطوير، استنباط خوارزميات تتيح تحسين التعبير اللمسي، وكذلك تطوير أجيال جديدة من السطوح البينية، كالسطوح البينية المحمولة مثلاً.

وفي الختام فإن مشروعي المنصتين PERFRV و Phare سوف يتيحان للباحثين والمهندسين العاملين في المختبر List أن يَشغَلوا موقعاً مهماً في ميدان النمذجة الأولية الافتراضية والتفاعلية في أوربا. وبذلك يوفران لهم إمكانية استخدام هذه التطورات في المحاكاة التفاعلية التبادلية في ميادين جد متباينة، مثل الثقافة أو الطب أو ألعاب الفيديو.

محاكاة طرائق الهدروكربونيات

جورج دوفا، تانه ـ ها نغوين ـ بوي
مديرية التطبيقات العسكرية ـ مفوضية الطاقة الذرّية
مركز الدراسات للدراسات العلمية والتقنية في أكيتين

مُلخّص

الوقاية من الحرائق الطارئة أو السيطرة عليها عند نقل الأسلحة، من بين غيرها من المواد الحساسة، هي إشكالية أخذتها بالحسبان مديرية التطبيقات العسكريّة في مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية. والمُقاربة في هذا المجال، هي تقليدياً معْياريّة وتجريبية. إنّ المحاكاة الرقمية لحريق في مساحة واسعة لمنتج كالكيروسين، هي بالفعل واقعة عند حدّ الإمكانات الحالية للفيزياء وعلم الرقميات.

الكلمات المفتاحية: كيروسين، اضطراب دوامي، أنتروبية، مشروع أليانس.

تُشير الحوادث الجارية الحديثة إلى خطر الحرائق الطارئة التي تقع أثناء نَقْليات المواد، حتّى تلك المواد المشهورة بقلّة خطرها. ومهما تكن الاحتياطات المأخوذة، يمكن أن يؤدي الخطأ البشري إلى سيناريو فاجع. يقود هذا الواقع إلى ضرورة تفحّص نتائج الحادث، بصورة مستقلة عن الاحتياطات المأخوذة لتجنبه وعن إجراءات التدخل المتوقعة لمجابهته. تدرس مديرية التطبيقات العسكرية في مفوضيّة الطاقة الذرّية من جهتها هذا النوع من الأحداث منذ وقت بعيد حتّى تضبط الآثار الناجمة عما يخصّ نقل الأسلحة النوويّة أو تخزينها.

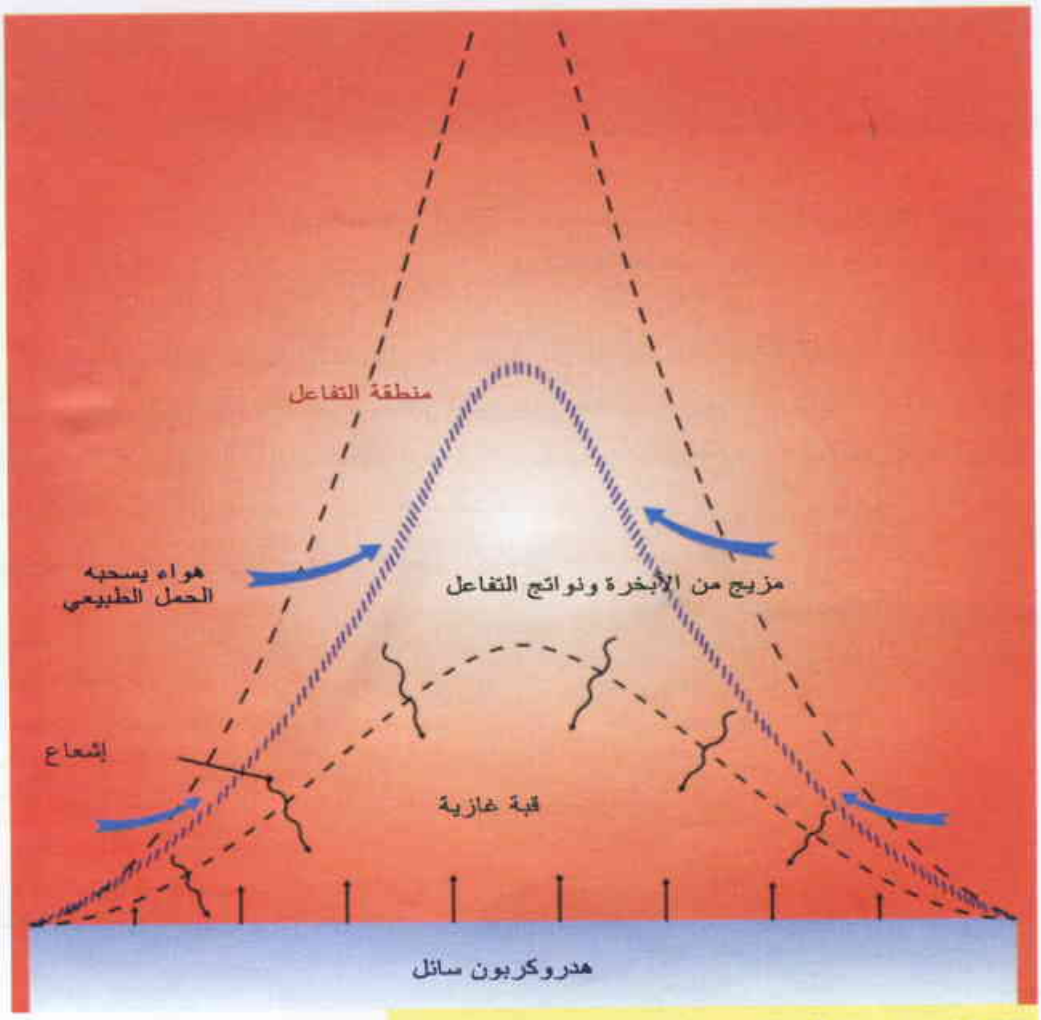
والمقاربة التجريبيّة، الوحيدة المستعملة حتّى الآن، تنعم بعدد من الميّزات، لكن لها سيّئات أيضاً. فلا يمكن تصوّر بعض الحالات: فإن لم يكن إجراء تحطّم واقعي لطائرة أو لمروحية أمراً غير معقول. إلا أنه على الأقل عمل شاق ومكلف لكن المقاربة المحاكاة لا تعاني قيداً من هذا النوع (المؤطّر A، ما هي المحاكاة الرقمية؟). إنّها تسمح أيضاً بإجراء دراسة حساسيّة على الوسطاء المُمْكنة في السيناريو، كشدّة الريح مثلاً، التي تُعدّ عُنصراً شديد التأثير في حريق يشبّ في مساحة واسعة، لأنها تغير الشكل الهندسي للهَب وشدّته. سنستعرض هُنا خاصة حرائق المساحة الواسعة من الكيروسين، وهو الهدروكربون المستعمل في النقل الجويّ.

حريق الكيروسين في الهواء الطلق.

وصف ظواهري للحريق

إن حريق المساحة الواسعة منظومة تنشر طاقة يُمكن وصفها بالأسلوب الآتي (الشكل 1). يُسخّن الكيروسين أولاً بإشعاع اللهب. وليس للحَمْل الحراريّ في السائل أو الغاز الذي يعلوه أيُّ دور إلاّ في الدقائق الأُولى، حين ينتشر اللّهب على السطح. يخضع البخار المتولّد إلى تفاعلات تفكك حراريّ وتفاعلات كيميائية. تحترق الغازات خاصة عندما تختلط بالهواء، وأن النوى العطْريّة[1] الموجودة سلفاً في الكيروسين أو التي تتركّب بالتفاعلات الكيميائية تولّد السنّاج، وهو جسيمات مفحّمة قطرها بضع عشرات النانومتر. فيشعّ هذا السناج، لأن القسم المركزيّ من اللّهب له درجة حرارة قريبة من 1400K (لهب كبير القطر وبدون ريح). في حالة حرائق الكيروسين، المحمّلة كثيراً بالسّناج، يكون إشعاع الغازات مُهْملاً. يقود هذا الإشعاع إلى استبخار طبقة الكيروسين. أما الجزء "المفقود" من الإشعاع نحو خارج الحريق فيمكن أن يُسبّب آثاراً حراريّة

(1) النوى العطرية: نوى جزيئات كالبنزين، تحوي حلقة مغلقة وتقتني الكيمياء الكمومية بأن تكون المنظومات العطرية مستقرة وتبدي تفاعلية خاصة.



الشكل 1 - تخطيط بياني لمبدأ تبادلات المادة والطاقة في حريق المساحة الواسعة.

مهمة تمتد مسافة عدّة أمتار. وفي حالة لهب بارتفاع يزيد على المتر الواحد، يكون الحريق اضطرابياً دوّامياً (المؤطّر F نمذجة ومُحاكاة الجريان المضطرب الدوامي)، وهذا ما يشكل صعُوبة هامة في النمذجة.

نماذج رهيفة تنتظر الإنشاء

إنّ تنوّع الظواهر الفيزيائية التي ينبغي أخذها بالحسبان هو إذاً كبير، ومن هذه الظواهر التي تعرض الإشكال الأكبر مايستحق اهتماماً خاصاً. إنّها حالة السناج، الذي يكوّن قسماً رهيفاً من النماذج. بالفعل، إنّ تولّد هذه الجسيمات، التي تتألف أساساً من الكربون (مع قليل من الهدروجين) والتي نجدها على شكل ركام مؤلف من كرات قطرها عدّة عشرات من النانومتر، غير معروف بدقّة. يبدو من جهة أخرى أنّه لا توجد طريقة كيميائية وحيدة تقود إلى هذه الجسيمات. تأخذ النماذج بالحسبان تكوّن جسيمات السناج بواسطة قوانين تجريبيّة، تستعين في أغلب الحالات بالأستيلين، المتولّد بكميات كبيرة في اللّهب والمعروف كمولد طليعيّ للسناج. كما ينبغي أيضاً أن تأخذ النماذج بالاعتبار الازدياد الكيميائي لهذا السناج (دوماً الأستيلين!) وتأكسده بالأكسجين والجذور المؤكسدة الموجودة بأعداد كبيرة.

أمّا الصعوبة الثانية في الأهمية فهي اضطراب اللهبات الكبيرة. فمن الممكن أن نلجأ إلى نماذج كاملة، ذات كُلفة عالية جداً، أو أن نكتفي بنماذج عادية الاضطراب، لا تؤدّي إلاّ إلى كميات ذات متوسط زمني. غير أن تراوحات درجات الحرارة تلعب دوراً هاماً إزاء التفاعلات الكيميائية. ويمكن تفادي هذا النوع من الصعوبة بحساب تغايرات درجات الحرارة والأجزاء الكسرية الكيميائية، لتوزّع إحصائيّ (مُتَحدِّر من التجربة) مفروض مسبقاً.

وأما الصعوبة الثالثة فهي الترابط بين المائع والإشعاع. وكما قيل سابقاً، فإن هذا الأخير لَبِنَة مُرتبطة ارتباطاً وثيقاً جداً بالظواهر الحمليّة والكيميائية فلا تنفك عنها مثل انتقال الطاقة وتولّد السنّاج، إلخ. ثمّة طرائق تسمح بتوصيف الوسط المدروس (العاتم داخل اللهب، والشفّاف خارجه) توصيفاً صحيحاً ودقيقاً، ولكن بكلفة معتدلة، نفذتها مفوضية الطاقة الذرّية الفرنسية وفق البرنامج الذي تُديره.

مسعى تنوعي

ينبغي أن نُشير، في معالجة المشاكل الثلاث المُنوّه بها أعلاه، إلى أنّ المسعى مختلف جداً. ففي حالة السّناج، تكون النمذجة ضعيفة الإعداد، وليست إلاّ ترجمة للتجربة مع قيمة مضافة نظرية صغيرة. أما في حالة الاضطراب الدوّاميّ، فإنّ النموذج أحسن إعداداً، لكنّ الملاحظة التجريبية هي أيضاً التي تسمح بالاحتفاظ له بمستوى مقبول من التعقيد. وأخيراً، في حالة النقل الإشعاعي، فإن النموذج المُعَدّ لا يتطلب إلا

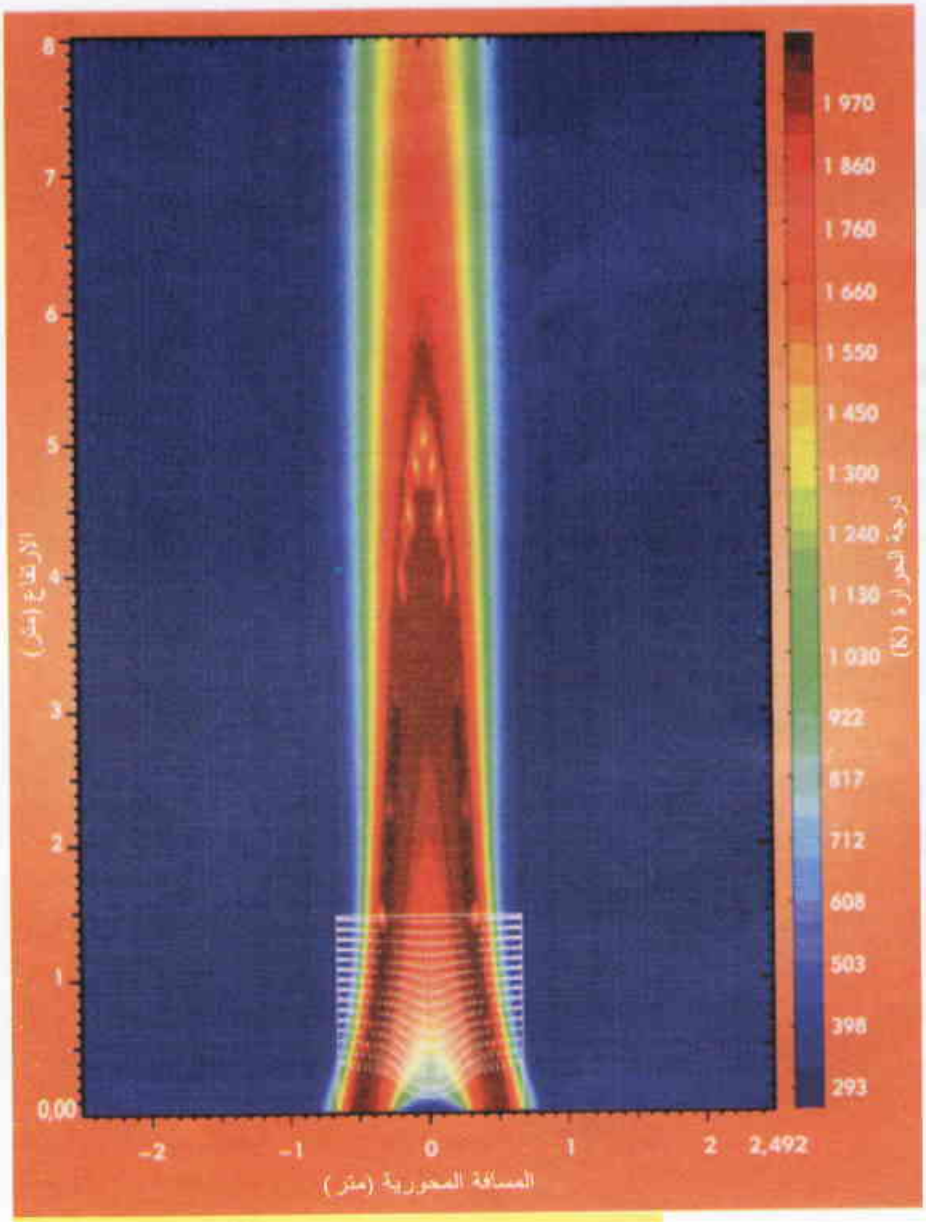
هيئة الطاقة الذرية السورية مكتب نظم المعلومات http://serversmiso.aecs.sy

مبادئ أساسية في الفيزياء، وخاصة مبدأ الأنتروبية[2] العظمى للمنظومة المؤلفة من الغاز والفوتونات.

إن حساب اللهب (الشكل 2) يتطلب إحكام كود معقد ومكلف، وخاصة كود ثلاثي الأبعاد لدراسة السيناريوهات الطارئة. وهذا المظهر الثلاثي الأبعاد ضروري أيضاً إذا رغبنا في تمثيل الاضطراب الدوامي التمثيل الأكثر دقة. وهذا يقتضي امتلاك وسائل حساب هامة.

التعاون عبر الأطلسي

وليست كل هذه الجهود ممكنة في النمذجة إلا عند امتلاك إعداد ركيزة تجريبية. فيبدو واضحاً أن تعقيد الظواهر يستبعد كل حساب بدئي، أي بدون نماذج مبسّطة منسوخة عن التجربة. هناك عدد من الصعوبات المنوّه بها آنفاً هي عامة في كثير من المشاريع التي تتعلق بالاحتراق. فالسّناج مثلاً يشكل الشغل الشاغل لمصنّعي المحركات. إذاً فالتعاون مع المختبرات الفرنسية الأخرى أمر طبيعي. أضف إلى ذلك أن هذا المشروع تتقاسمه مختبرات قسم الطاقة (Sandia National laboratory) ويشكل في الولايات المتحدة الأمريكية موضوع أحد برامج التعاون الجامعي الخمسة الكبيرة المهيأة في إطار مشروع "أليانس" Alliance.



الشكل 2- حساب لهب. لوحة درجات الحرارة ومنظر تفصيلي للتدفقات الاشعاعية.

(2) الأنتروبية: تابع يميز من وجهة نظر ترموديناميكية، لا عكوسية تبادلات الطاقة وحركات المادة.

محاكاة المراقبات اللاإتلافية: البرمجية سيفا (CIVA)

ب. كلمون
مديرية البحث التقاني - مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية - ساكلي

ملخص

إن جودة المنتجات، وأمن المنشآت، وبالتالي سلامة الأشخاص هي الرهانات الكبرى للمراقبات اللاإتلافية (CND). وفي الوقت الحاضر يستعين الصناعيون أكثر فأكثر بالمحاكاة لأمثلة الكفاءات. لقد شاركت مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية بقوة في هذا التطور. وتستمر في ذلك بتطوير ونشر البرمجية سيفا (CIVA)، ثمرة بحثها المتجلي في هذا المجال.

الكلمات المفتاحية: محاكاة، برمجية، مراقبة، كفاءة، الواقع الافتراضي.

المراقبة دون إتلاف

إن المراقبة اللاإتلافية (CND) تضم مجموع التقنيات التي تسمح بتفحّص قطعة ما والبحث عن العيوب المحتملة فيها التي قد تأتي بنتائج شؤم على الوظيفة التي تؤديها. إن التقنيات متعددة (مافوق الصوتية والكهرطيسية والتصوير الإشعاعي أو أيضاً التصوير الحراري) والتطبيقات العملية متنوعة. وهكذا تتميز، مثلاً مراقبات الصنع التي تهدف إلى التحقق من جودة منتوج صناعي قبل استخدامه والتفحصات أثناء التشغيل التي تُنفَّذ طوال حياة المنتوج.

إن الهدف، في الحالة الأخيرة، هو التأكد من عدم تدهور جودة القطعة الخاضعة لإجهادات ميكانيكية، وكيمائية، وحرارية أو أيضاً إشعاعية. فهذه التقنيات كلها شائعة الاستعمال في الصناعة. ومهما يكن القطاع المعني، فالرهانات الاقتصادية المرتبطة بالمراقبة اللاإتلافية هي دوماً مهمة جداً، غير أنها تتضاعف في بعض القطاعات كالنقليات (وبخاصة الجوية) أو في القطاع النووي، حيث ينضاف رهان كبير هو سلامة الجمهور.

محاكاة المراقبات اللاإتلافية في مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية

في نهاية الثمانينيات من القرن الماضي، انطلقت مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية في نمذجة المراقبات اللاإتلافية (المؤطر A، ماهي المحاكاة الرقمية؟). وكان الهدف آنذاك هو المساعدة على تفسير الإشارات فوق الصوتية الملتقطة أثناء التفتيش في المحطات النووية: فلم يكن الأمر يعني فقط زيادة قدرة الطرائق المعدَّة لكشف العيوب بل أيضاً لتمييزها وهكذا تزويد المختصين

مكتب معلوماتي لمعالجة البيانات (هنا إشارات فوق صوتية) بواسطة البرمجية سيفا، التي تسمح بمقارنة مباشرة بين البيانات التجريبية والنظرية.

محاكاة مراقبة المكونات CAO. في (a)، مثال على مراقبة الفرز. في (b) مثال على مراقبة سارية المفاعل (doc. EAOS). إن التنبؤ بالحقل المرن المتولد بفعل اللاقطة (المعلن في مسرح المراقبة) يسمح بتغيير تأثير الهندسة (عدم تلازم اللاقط والانعكاسات الداخلية) في كفاءات طريقة المراقبة.

بالوسائل التي بها تُقدَّر الأذيّة.

ومنذ ذلك الحين، تأكدت استراتيجية مزدوجة: اختيار طرائق نصف تحليلية مقابل الطرائق الرقمية بالكامل (عناصر منتهية وفروق منتهية.. إلخ) وتطوير نماذج مندمجة ضمن وحدات برمجية يمكن أن يستخدمها عاملون غير مختصين بالمحاكاة.

وفي عام 1993 خرجت النسخة الأولى من البرمجية سيفا (CIVA)، وهي منصة للخبرة متعددة التقنيات في المراقبة اللاإتلافية، تجمع في الوسط نفسه أدوات المَصوْرَة، والمعالجة والمحاكاة فتسمح بذلك بمقارنة مباشرة بين المعطيات التجريبية والنظرية.

ومنذ نمذجة المراقبة اللاإتلافية، استمرت أهميتها في التزايد، كما استمرت تطبيقاتها العملية في التنوّع، وعلى التوازي فإن الأهلية التي نالتها أفرقة (ج. فريق) مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية في النوويات استفيد منها وأغنيت بتطبيقات عملية أخرى، أولاً في علم الطيران، وهو ثاني أكبر باعث على البحث والتطوير في هذا المجال.

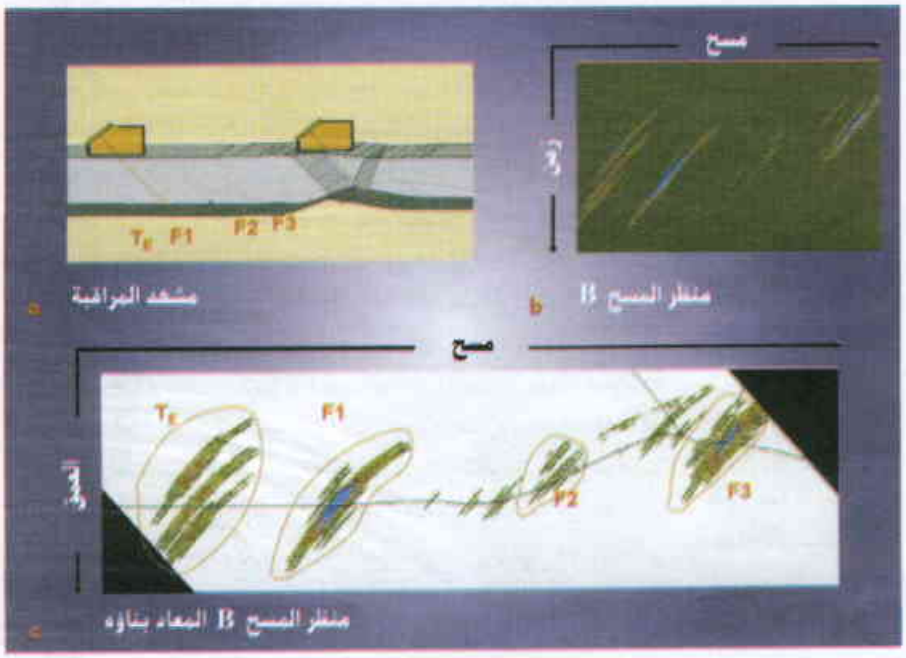
سيفا: منصّة للخبرة متعددة التقنيات

على مرّ السنين وتعاقب النسخ من سيفا CIVA، تم دمج نتائج أنشطة بحث النمذجة في المنصة، استجابة للحاجات التي تبرز دوماً لدى الصناعيين مستخدمي البرمجية. والآن، أصبحت سيفا البرمجية المرجع لمحاكاة المراقبة اللاإتلافية. ولم تنتشر فقط لدى الأطراف العاملة الفرنسية، بل أيضاً في باقي أوربا، وفي قارة أمريكا الشمالية وفي اليابان.

وبدأ طور جديد: فمن برمجية المرجع، تحولت البرمجية سيفا إلى منصة اندماج برمجي. ومنذ ذلك الحين، ثمة عدة نماذج طوِّرت في المختبرات الجامعية بفرنسة وأوربا وأدمجت في البرمجية كما وأطلقت مشاريع عديدة. يعكس هذا التطور الكبير إرادة المجتمع في تبادل الجهود في البحث والتطوير وإعداد أدوات مشتركة تتقارب نحو تحسين المراقبات، وبالتالي، غالباً، تحسين جودة المنتوجات وسلامة الجمهور.

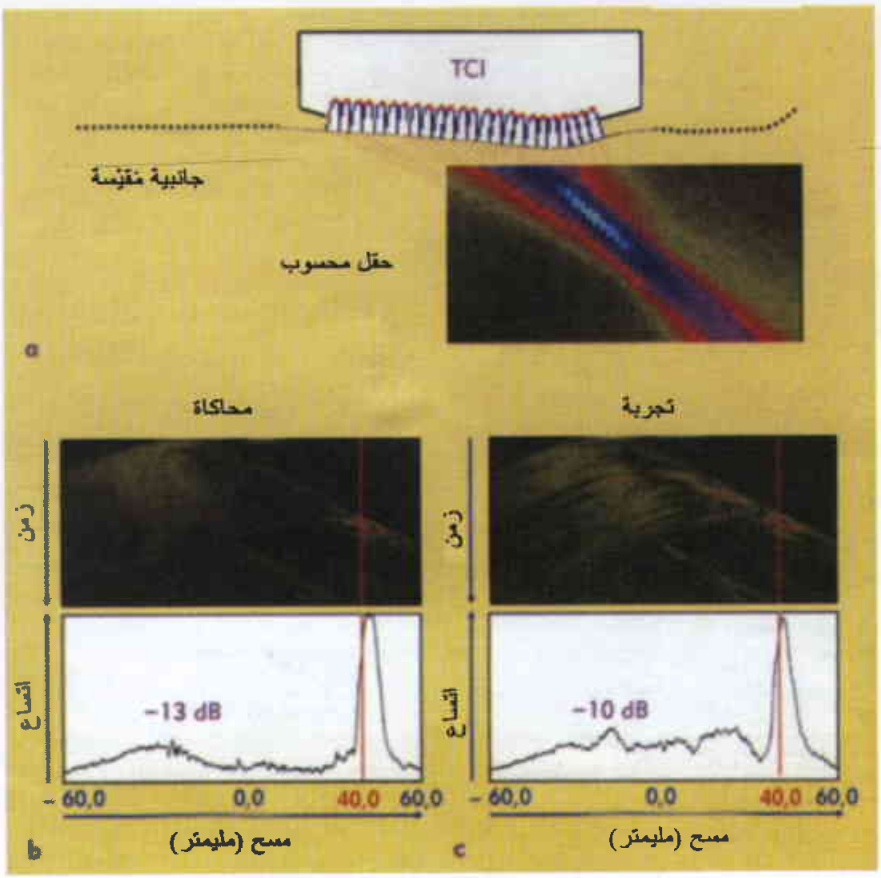
من أجل كفاءات مُثلى

إن أدوات المحاكاة فوق الصوتية وجدت على مرّ السنين مجالات إمكانية تطبيقها تتوسع لتأخذ بالحسبان تشكيلات معقدة أكثر فأكثر، تُطلب نمذجتها: مواد لامتناحية ولامتجانسة،



محاكاة مراقبة اللحام. يوضح هذا المثال العون الذي تقدمه المحاكاة إلى التحليل. يحاكي المشغل استجابة الشقوق الثلاثة (F1، F2، F3) التي أضيف إليها، لغايات المعايرة، ثقب عياري (Tc). إن نتيجة المراقبة (المخططة بيانياً في a بوضعي انطلاق اللاقط ورسوله في مشهد عملية المراقبة) هي صورة صدى (b) وهي سهلة التفسير. هناك خوارزمية لإعادة بناء الصورة تسمح بأن تتراكب على المنظر نفسه، الأصداء الملتقطة من اللحام وهندسته التي يسمح (CAO)، فتجعل تعرفها أسهل وأيسر.

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية



تصميم لاقط متعدد العناصر. إن مترجم التماس الذكي (TCI) هو كناية عن لاقط من الجيل الجديد صُمّم في مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية لمراقبة قطع ذات هندسة معقّدة. وهو مرن يمكنه أن يتطابق مع سطح غير منتظم. ثمة منظومة قياس مرتبطة به تسمح بالرجوع إلى وضع العناصر المختلفة التي تجعلها تتأثر بتأخر الكتروني محسوب لتصحيح المفاعيل الهندسية وضبط الحزمة. وفي a، ترى صورة للحزمة التي يولدها مترجم التماس الذكي (TCI) على جانبية حقيقية. وفي (b) و (c) ثمة مقارنة الكفاءتين (موضع الحزمة واتساعها) اللتين تتنبأ بهما المحاكاة وهما مقيستان فعلاً.

مكوّنات هندستها غير منتظمة، أجيال جديدة من لواقط تقوم على تقانة متعددة العناصر. لم تتغير الفلسفة، والنماذج النظرية المطوّرة قامت على طرائق نصف تحليلية تتطلب تقريبات فيزيائية مختارة بدقة بدلالة التطبيق المعالَج.

إن نوعية من التشكيلات تمت محاكاتها بفوق الأصوات، مثلاً، توضّح هذا الاختيار. فمسافات الانتشار هنا كبيرة جداً، مقارنة بطول الموجة، مما يجعل الحلّ العددي لمعادلة انتشار الأمواج المستندة إلى تشبيك مكاني للحجم المعني مكلفاً جداً. وتعد المقاربة النصف تحليلية في الوقت الحاضر الحلّ الذي يؤمّثل في الوقت نفسه إجهادات الوثوقية الكمّية وسهولة تفسير النتائج، وتقلّب الحالات المحاكاة والكفاءات الرقمية. في الواقع، إذا تترجم تقدم المعلوماتية بزيادة هائلة ومستمرة لقدرات الحوسبة (الحواسيب المكروية ومحطات العمل)، فإنّ استعمال الكودات نفسها يتطورعلى التوازي ويصبح أكثر فأكثر شدة في إطار حملات المحاكيات المتعددة الوسيطية. وهذه هي، على سبيل المثال حالة تبيان كفاءات الطرائق أو في إطار استراتيجيّات القلب inversion. وهذه الأخيرة، التي لم يعد أبداً الهدف منها محاكاة استجابة عيب معين، بل الرجوع آلياً، وانطلاقاً من نتيجة مراقبة، إلى مميزات العيب أو العيوب التي ولّدته، تتطلب في الواقع مضامين من الحساب كبيرة جداً.

ومن يقول نمذجة، وبالأحرى نماذج تقريبية، يقول إثباتات تجريبية، ثمة تجارب أجريت في مختبرات مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية لتقييم دقة التنبؤات النظرية في حالات منضبطة تماماً. لكن إثبات صحة النماذج يستند أيضاً إلى الإحصاءات العائدة من تجربة المستخدمين التي تغطي أكبر مجال من الحالات. وأخيراً، فإن المقارنة بين النماذج مفيدة جداً أحياناً، بغية اختبار أحد التقريبات النوعية.

تصميم طرائق المراقبة وتبيان الكفاءات

إن الإمكانات المتاحة اليوم بالتقانات الجديدة للواقط تترافق بطبيعة الحال بتعقيد أكبر في التنفيذ. وإن العون على تصور طرائق جديدة من المراقبة، والتصميم وقيادة اللواقط المبتكرة يكوّن تطبيقاً ذا قيمة مضافة كبيرة إلى المحاكاة. وفي علم الطيران، يذهب هذا الإجراء إلى أبعد من ذلك أيضاً، ويبلغ الطموح هنا حدّ تقييم إمكانية مراقبة القطع منذ تصميمها في مكتب الدراسات. وإن الربط مابين المحاكاة و CAO الذي تحقق في سيفا-6 (CIVA 6) يمثل تقدماً كبيراً في هذا الاتجاه. فمن الممكن الآن، في بيئة المحاكاة، قراءة وتفسير علبة بطاقات CAO في المقاسات المعيارية، وتحريك اللاقط إلى موضع مختار وإجراء حسابات على مركّبات ذات هندسة معقدة جداً.

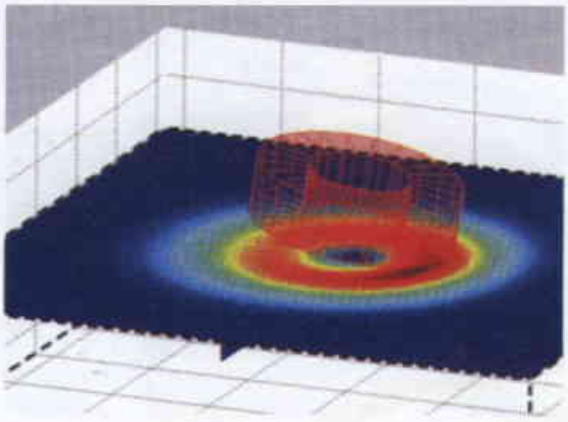
وبموازاة تصميم طرائق المراقبة، فإن إثبات كفاءات الطرائق الموجودة هو تطبيق آخر للمحاكاة حيث الرهان عظيم. وهكذا، ففي القطاع النووي، ثمة مسعى إلى توصيف تقني لهذه الطرائق طُبِّق منذ عام 1997: تشارك النمذجة فيه مشاركة مهمة. وفي الواقع، إن تنفيذ المحاكاة هو وحده القادر على استكشاف الحالات الممكنة كلها استكشافاً شاملاً بقدر كاف. إن التجريب والمحاكاة هما هنا متكاملان، يسمح الأول

بإقرار صلاحية الثانية في حالات اختبار مستهدفة.

محاور البحث

هناك بانوراما جزئية توضّح غنى أعمال البحوث الجارية في مفوضية الطاقة الذرية الفرنسية، وهي كثيرة جداً لايمكن ذكرها. إن أول جزء مهم من نشاط المخابر كناية عن بحوث نظرية في النمذجة يهدف إلى توسيع حقل تطبيق أدوات سيفا في المحاكاة، مثلاً نمذجة انتشار الأمواج المرنة السطحية على قطع لامتناحية ذات هندسة منحنية أو نمذجة انتشار الأمواج فوق الصوتية في أوساط متعددة الانتثارات، كبعض الخرسانات betons.

وثمة محور بحث آخر واعد يقوم على تطوير نماذج هجينة تربط طريقة نصف تحليلية لمعالجة الانتشار على مسارات طويلة ببنية خيالية ذات عناصر منتهية تشتغل في منطقة مصغّرة جداً مكانياً. إنه يتفق مع الصعوبة التي أشير إليها أعلاه ومفادها أنه ينبغي أن تستعمل طرائق مبنية على تشبيك الحجم الذي تنتشر فيه الموجة فوق الصوتية. وتسمح مثل هذه النماذج بالتنبؤ بجواب العيوب المعقدة بوجه خاص من أجل تكلفة عددية دنيا. وبالاستناد إلى استخدام كثيف للمحاكاة، فإن مفهوم وحدات المعالجة للمعطيات (البيانات) المقتناة،



إن وجود عيب في مواد ناقلة يمكن أن يكشف بطريقة كهرطيسية. يحرّض لاقط (سوار عروية باللون الأحمر) تيارات في صفيحة معدنية. وتمثّل شدة تيارات من نوع فوكو هذه بعد الحساب على سطح الصفيحة بألوان مصطنعة. تسمح المحاكاة بدراسة، من أجل هذا التشكيل، تأثير وسيط مشوش (وهو هنا تقلب اللاقط) في طريقة المراقبة.

لغايات التمييز، والقلب، أو أيضاً إعادة البناء والمَصورَة يشكل موضوع دراسات عديدة. إن مثل هذه المقاربة تقدم فعلاً إمكانات ضخمة في تحسين كفاءات التحليل.

الربط بأدوات الواقع الافتراضي

أخيراً، وإلى أمد بعيد بعض الشيء، إن ربط محاكاة المراقبات اللاإتلافية بأدوات الواقع الافتراضي، يشكّل إمكانية تطوير كبير. فيجعل الاندماج ممكناً في محاكاة البيئة والمشغل، وكذلك على سبيل المثال مراعاة ضيق المنشأة الذي يجعل التدخل البشري صعباً، أثناء تقييم قابلية مراقبة قطعة ما، أو أيضاً التقدير الكمي للأثر الواقع على مشغل بيئة مؤذية (راجع محاكاة التدخل في وسط مؤذ خطر وكذلك أوجه التقدم في النمذجة الأولية الافتراضية).

كشاف

2003

باب المقـــالات

	العدد	الصفحة
في المجال الفيزيائي		
1) الأجواف المكروية نصف الناقلة:نصف ضوء ونصف مادة..... جرمي ج. بومبيرغ – ترجمة هيئة التحرير	83	7
2) أصل كتلة النترينو – هيتوشي موراياما – ترجمة هيئة التحرير.....	83	13
3) السبينترونيات – د. غروندلر – ترجمة هيئة التحرير.....	83	19
4) المادة الفائقة البرودة – ك. ساوثول – ترجمة هيئة التحرير.....	84	7
5) الذرّات الباردة والتحكّم الكمومي – س. شو – ترجمة هيئة التحرير.....	84	8
6) تكاثف بوز – آينشتاين للغازات الذرّية – جيمس ر.أنغلين، وولفغانغ كترلي – ترجمة هيئة التحرير	84	15
7) الضوئيات الذرّية اللاخطية والكمومية – س ل . رولستون و و . د .فيليبس– ترجمة هيئة التحرير	84	27
8) مواجهات كمومية للنوع البارد – ك. بورنت وآخرون – ترجمة هيئة التحرير.....	84	36
9) علم قياس التواتر الضوئي – ث. أودم ، ر. هولزورث، ت. و. هانش – ترجمة هيئة التحرير..	85	7
10) المعالجة الكمومية للمعلومات بالذرّات والفوتونات – س . مونرو– ترجمة هيئة التحرير.	85	14
11) مفعول كازيمير: قوة من لا شيء – أستريد لامبرشت – ترجمة هيئة التحرير.....	85	27
12) الفيزيائيون يستعيدون صورة تشكل الكون في لحظاته الأولى بُعيد الانفجار العظيم..... م. غونين – ترجمة هيئة التحرير	85	32
13) استخدام الطاقة النوويّة في الفضاء – ك. ربسيت، ب. بمبي – ترجمة هيئة التحرير....	86	17
14) المفاعلات ذات الاستطاعة الصغيرة والمتوسطة لإنتاج الطاقة في الماضي والحاضر.... ب. بارّه – ترجمة هيئة التحرير	86	23
15) مُصادم الهدرونات الكبير تحدٍّ تقانيّ لا سابق له– ج – و. باروش – ترجمة هيئة التحرير....	86	27
16) البلازمات فائقة البرودة وغازات ريدبرغ – س. بيرغيسون، ت. كيلّيان – ترجمة هيئة التحرير....	88	7
17) ملاقط ضوئية: الجيل القادم – ك. ظولاكيا، م. ماكْدونالْد، ج. سبالدينغ – ترجمة هيئة التحرير...	88	13
18) التعريف بجسيم هِغز الصغير – م. شمالتز – ترجمة هيئة التحرير.....	88	20
19) إشعاع تيراهرتز عالي الاستطاعة من إلكترونات نسبوية..... ج. ل. كار وآخرون – ترجمة هيئة التحرير	88	24
20) الطرائق الكهربائية والضوئية لقياس ارتفاع حاجز كمون شوتكي في الكواشف..... ذات الحاجز السطحي – د. خالد مصري، د. بيداء الأشقر	88	30
في المجال الكيميائي		
1) اشتعال شديد – ج. غريفث – ترجمة هيئة التحرير.....	**83**	**25**
2) إزالة مُلوحة مياه البحر بالمُفاعلات النوويّة – س. نيسان، ل. فولبي – ترجمة هيئة التحرير.	**86**	**7**
في المجال البيولوجي		
1) اهبطي من جنّة عدْن: الخلايا الجذعية وأعشاشها..... ف. م. وات، ب. ل. م. هوغان – ترجمة الدكتور عادل باكير	87	7
2) لماذا الخلايا الجذعية؟ – د. فاندر كوي، س. فايس – ترجمة الدكتور إياد غانم	87	14
3) الدّور الحاسم للعش في تقرير مصير الخلايا الجذعية الميلانينية..... إمي. ك. نيشيمورا وآخرون – ترجمة الدكتور عمار مدنية	87	19
4) نقل نتائج بحوث بيولوجيا الخلايا الجذعية وأسلافها إلى التطبيق السريري: العوائق والحظوظ .. إ. ل. وايزمن – ترجمة الدكتور عدنان الاختيار	87	27
5) تغيير المقدرة الكامنة باندماج تلقائي – ك – ل. ينغ وآخرون – ترجمة هيئة التحرير.....	87	35

	العدد	الصفحة
6) سلالات خلوية جذعية جنينية من أكياس أرومية بشرية: تمايز جسمي في الزجاج..... ب. ي. روبنوف وآخرون – ترجمة الدكتور أحمد عثمان	87	40
7) تمايز الطلائع العصبية القابلة للازدراع المأخوذة من خلايا جذعية جنينية بشرية في الزجاج..... س – ش. زهانغ وآخرون – ترجمة الدكتور محي الدين عيسى	87	50
8) الخلايا النجمية: نجوم جديدة للدماغ – ف. فريغر، س. شتاينمتز – ترجمة الدكتور غسّان عليا..	87	58
9) خلايا الدبق العصبي النجمية تحرّض على تكوين العصبونات من الخلايا الجذعية العصبية البالغة. هـ. سونغ وآخرون – ترجمة الدكتور غسّان عليا	87	64
10) تعدُّد قدرات الخلايا الجذعية المتوسطية من منشأ نقوي بالغ ..... ي. جيانغ وزملاؤه – ترجمة الدكتور وليد الأشقر	87	74
11) خلايا نقي العظم تتبنى النمطَ الظاهري لخلايا أخرى باندماج خلوي تلقائي..... ن. تيرادا وآخرون – ترجمة الدكتور عبد الرحمن مراد	87	88
12) خلايا نقي العظم ترمّم عضلة القلب المصابة بالاحتشاء..... ج. كاجســتيرا وآخرون – ترجمة الدكتور أيمن المريري	87	93
13) الخلايا الجذعية في النسج الظهارية – ج. م. و. سلاك – ترجمة الدكتور أحمد عثمان...	87	100
14) الخلايا الجذعية التي تصنع الجنوع – د. وايجل وآخرون – ترجمة الدكتور نجم الدين الشرابي..	87	105
في المجال الجيولوجي		
1) رؤية باطن الأرض بالهزّات الأرضية الصنعية س. بولر – ترجمة هيئة التحرير.....	83	31

باب الأخبار المتفرقــة

في المجال الفيزيائي

1) محطّم الذرّات يسبر مملكة "الغاز" النووي	83	39
2) قياس الحقول المغنطيسية الضخمة	83	39
3) ضبط الليزر بالبلّورات السائلة	83	41
4) البوزترونات الباردة تدعم نظرية الفناء	83	42
5) البطّارية: لم يحن الوقت بعد لاعتبــارها حالة نهائية	83	44
6) مناقشة حساب ميزانية الإشعاع الشمسي	83	50
7) هندسة العُيوب الواعدة في الفوتونيات	84	48
8) الآثار الكمومية للثقالة	84	49
9) تحطيم مائع فائق	84	51
10) تقوية الضوء الليفي	84	52
11) عوالم الحركة المُتبادَلة	84	54
12) وضع المعايير	84	56
13) المجاهر الإلكترونية تسبر أبعاداً جديدة	84	57
14) الذرّات والنوى والتفاعلات النووية	84	58
15) بزوغ فجر إلكترونيات الكربون؟	85	48
16) الحزم الإلكترونية تصغر في حجمها	85	56
17) المخرّبون الشريرون	85	57
18) حَشْوة القطيرة المُصدِرة للضوء	86	36
19) مسرّع يهدف إلى إيجاد منبع جميع العناصر	86	39

	العدد	الصفحة
20) البوزونات تساعد في قهر ضغط فرمي	86	41
21) الناقلية الفائقة القائمة على البلوتونيوم بدرجة حرارة انتقال أعلى من 18 كلفن	86	42
22) الأمواج الكونية تُظهر الاستقطاب	86	45
23) نقطة ثلاثية في النواة	88	36
24) متى تتفكك الإلكترونات إلى سبين وشحنة	88	37
25) استطاعة بتواترات التيراهرتز	88	40
26) كيف ساعدت محطات الطاقة النووية في اليابان على كشف أسرار الشمس	88	43
27) الثوابت الفيزيائية الأساسية	88	46
في المجال الكيميائي		
1) الكوبالت	84	61
2) نبائط البوليمير تعيش أطول	85	49
3) بلّورات سائلة تتكدّس فوق بعضها	85	51
4) الراديوم	85	58
5) الليتيوم تحت الضغط يصبح ناقلاً فائقاً	86	37
6) البلوتونيوم	86	49
7) الأشباح الجزيئية	88	39
8) السيزيوم	88	44
في المجال البيئي		
1) أشجار تختنق	83	40
في المجال البيولوجي		
1) إيجـــاد طرق جديدة لحماية نباتات ضربها الجفاف	83	47
2) اندماج خلوي يسبب إرباكاً	87	113
3) مفاهيم جديدة تتطلب كلمات جديدة في جدل الخلية الجذعية	87	115
4) طعوم جنينية للعصبون تمهّد الطريق لعلاجات بالخلية الجذعية	87	116
5) فأر أحادي النّسيلة؟	87	118
6) استخدام تسميات غير مناسبة يجعل باحثاً في الخلايا الجذعية في مأزق	87	120
7) أوربة تواجه تحدّي البحث في الخلايا الجذعية الجنينية	87	121
8) تنافس الخلايا الجذعية	87	123
في مجال الوقاية		
1) معاناة الأولاد جرّاء تعرُّض الآباء للإشعاع	83	43
2) ملامح الوقاية الإشعاعية لصوف العزل المعدني بالنشاط الإشعاعي الطبيعي المعزّز	85	52
3) استراتيجيات وطرائق أمثلة التعرّض الداخلي للعاملين الناجم عن المصادر الطبيعية والاصطناعية	85	54
4) حان وقت ارتداء الثياب للعاملين في المجال النووي	88	42
في مجال الزراعة		
1) آلية "كرة الطاولة" لنقل البورون في جذور النبات	86	46

باب ورقات البحـــوث

	العدد	الصفحة
في المجال الفيزيائي		
1) تقييم منبع النترونات الفوتونية في مفاعل منبع النترونات السوري المصغر ..... د. إبراهيم خميس	83	54
2) الاسترخاء المغنطيسي لشريحة ذات ناقلية: وصف التحول الزمني – د. عادل نادر	84	64
3) قياس درجة الحرارة الوسطية لقلب مفاعل منبع النترونات السوري المصغّر باستخدام التفاعلية د. إبراهيم خميس	86	60
4) مطابقة سويات نموذج البوزونات المتفاعلة الرابع إلى النموذج الطبقي ..... د. سهيل سليمان، د. سامي حداد، د. حازم سومان	88	59
5) محاكاة التنمية اللامتناحية للبلورات بالاعتماد على الطريقة الخلوية ..... د. محسن شحود وآخرون	88	62
6) حساسية النبائط Si-JFET للضجيج بعد تشعيعها بأشعة غاما ..... د. جمال الدين عساف	88	69
في المجال الكيميائي		
1) النموذج الثلاثي الأطوار في متعدّد الإسترات المتلدنة بالحرارة والمسحوبة: مقارنة بين تجارب.. قياسات التحليل الحراري التفاضلي وتيار إزالة الاستقطاب المثار حرارياً – د. منذر قطان، أ. دارجنت، ج. غرينت	86	53
2) خواص مركّبات خشب – بلاستيك: تأثير الإضافات اللاعضوية..... د. إلياس حنا بكرجي، نعمان سلمان	86	64
في المجال البيئي		
1) تقييم التلوث بعناصر الأثر في بيئة نهر بردى باستخدام..... تقانة التحليل بالتنشيط النتروني، د. إبراهيم خميس وآخرون	83	58
2) معدّلات ترسيب وتأريخ تلوث بحيرة جافة: بحيرة العتيبة، د. محمد سعيد المصري وآخرون...	83	68
في المجال البيولوجي		
1) التغيرات المورفولوجية لبيوض الأسكارس لمبريكويدز المشعّة بأشعة غاما..... معتصم شماء، محمد عمار العدوي	83	76
2) تأثير جرعات من أشعة غاما المثبطة لإثبات درنات البطاطا على بيوض حشرة فراشة درنات البطاطا Phthorimaea operculella Zeller (Lep., Gelechiidae) - د. جورج سعور، د. حياة المكي	84	69
3) دور التصوير المقطعي بإصدار البوزترونات (PET) في كشف ..... وتحديد انتشار لمفوما لا هودجكن ضعيفة الخباثة (Low grade NHL) – د.فادي نجار	85	61
4) التصوير المقطعي بإصدار البوزترونات باستخدام الفلوروديوكسي غلوكوز ..... والتصوير الومضاني باستخدام مستقبلات السوماتوستاتين لتشخيص وتحديد انتشار أورام الكارسينوئيد: علاقات الارتباط مع المشعرات المرضية Ki-67&p53 – د. فادي نجار	88	74
في المجال الجيولوجي		
1) إزاحات ذات منشأ زلزالي على امتداد صدع سرغايا: أحد الفروع..... النشطة لنظام صدع البحر الميت في سورية ولبنان – د. معاوية برزنجي وآخرون	83	78
2) تأثير إرجاع الكبريتات ومساهمة غاز CO_2 الأرضي في تحديد أعمار المياه ..... الجوفية المقدرة بطريقة الكربون ^{14}C – دراسة حالة لنظام المياه الجوفية في الحامل المائي للباليوجين في شمال – شرق سورية – د. زهير قطان	85	83

	العدد	الصفحة
في المجال الزراعي		
1) التغيرات في مياه الغسل خلال التحلية والمادة الجافة والمواصفات التكنولوجية لألياف القطن – د. محفوظ البشير	83	62
2) تأثير رطوبة التربة والسماد البوتاسي على تكوين العقد الجذرية وإنتاج المادة الجافة وتثبيت الآزوت الجوي في الحمّص (Cicer arietinum L.) والفول (Vicia faba L.) د. فواز كرد علي، فريد العين، محمد الشماع	84	75
3) تأثير إضافة النترات على كفاءة استخدام سماد كبريتات الأمونيوم على الذرة تحت الظروف المالحة – الجزء الثاني: التجربة الحقلية – د. خلف خليفة، د. علي زيدان	85	69
4) تأثيرات إصابة بذور الشعير بالعامل الممرض Pyrenophora graminea في بروتينات التخزين (الهوريدين)– د. محمد عماد الدين عرابي، د. نزار مير علي، محمد جوهر، د. بسام الصفدي	85	79
5) تقييم بعض المواد العلفية غير التقليدية للمجترّات في الزجاج عن طريق معامل هضم المادة العضوية والطاقة والكتلة الحيوية المِكروبية – د. محمد راتب المصري	86	68
6) استجابة الغلّة الحبّية ووزن الحبّة، والإصابة بمرض التبقع السبتوري في القمح للتسميد الآزوتي والبوتاسي ــ د. محمد عماد الدين عرابي، محمد جوهر	88	81

باب التقارير العلميــة

	العدد	الصفحة
في المجال الفيزيائي		
1) معالجة إحصائية لنتائج برنامج المقارنة الداخلي لقياس الناقلية الكهربائية EC – عبد الغني شخاشيرو	84	84
2) تصميم مرشحات ضوئية متعددة الطبقات العازلة كهـربائياً لليزر رامان المضخوخ بليزر ND-YAG مضاعف التواتر ولليزرات الصباغية المضخوخة ببخار النحاس، د. محمد بهاء الصوص	85	96
3) أحدث الاتجاهات في تطوير الخلايا الشمسية – د. محسن شحود	85	97
4) تحليل آليّة نقل التيّار في الخلايا الشمسيّة $ZnO/CdS/CuGaSe_2$ د. معين سعد، د. عمار قسيس	86	77
5) تصميم وتنفيذ لوحات إلكترونية محلية لنظام التحكم الآلي بالمفاعل MNSR د. إبراهيم خميس، موفق نصري	86	79
في المجال الكيميائي		
1) تعيين الانزياح النظيري طيفياً لبعض المركبات المحتوية على نظائر مستقرة بتقنية FTIR... د. عبد الوهاب علاف، د. محمد درغام زيدان	83	84
2) دراسة تأثير أشعة غاما على قوة لصق مـادة الإيبوكسي – زكي عجي	84	89
3) أتمتة عملية إدارة حركة العيّنات في مخابر التحليل – عبد الغني شخاشيرو، حسين الأشقر..	84	93
4) دراسة معقدات اليورانيوم في المخلصات العضوية بالـ FTIR – د. موسى الإبراهيم	85	100
في المجال البيولوجي		
1) الفحص المسحي لقصور الدرق الخلقي عنـد الأطفال حديثي الولادة د. ندوة حمادة، نور الدين علي، فاطمة الشيخ، إيفاد الغوري	85	101
في المجال الزراعي		
1) تأثير أشعة غاما في الحمولة المِكروبية والخصائص النوعية للجبنة البلدية د. محفوظ البشير، سمر فرح	83	88

	العدد	الصفحة
2) تقييم تحمل الملوحة عند بعض أصناف الكرمة المحلية في الزجاج.....	83	89
د. طريف شربجي، زهير أيوبي		
3) الأداء الإنتاجي لصيصان الفروج المغذاة على مسحوق اللحم والعظم المعامل بالتشعيع.....	83	92
د. محمد راتب المصري		
4) تأثير جرع منخفضة من أشعة غاما على تحمّل نباتات الشعير المزروعة تحت الظروف المالحة....	84	86
د. طريف شربجي، د. خلف خليفة، فريد العين		
5) تأثير الأشعة والتقليم وإزالة جذور نباتات الكرمة المستنبتة في الزجاج على نمو هذه	84	91
النباتات في مرحلة الأقلمة – د. طريف شربجي، زهير أيوبي، عجاج دحدوح، د. سعد الدين خرفان		
6) توصيف بعض المؤشرات التناسلية عند إناث أغنام العواس السوري خلال مراحل مختلفة..	85	103
د. معتز زرقاوي		
7) أشكال الفسفور في الأتربة السورية وتحديد المتاح منها – د. فارس أصفري.....	86	81
د. رفعت المرعي، محمد حاميش		
8) تأثير أشعة غاما في بعض الأنواع الجرثوميّة من مستحضر عِرق السُّوس السريع الذوبان..	86	84
وفي الخصائص الكيميائية والحسيّة لخلاصته المائية – محمد عمار العدوي، عبير القائد		
د. محفوظ البشير		
9) تأثير التسميد الأخضر من نبات السيسبان Sesbania aculeate في إنتاج المادة الجافة.....	88	91
وامتصاص الآزوت لنباتات ذرة السورغوم العلفية Sorghum bicolor النامية في ترب مالحة		
وترب غير مالحة باستعمال تقنيتي تقفٍ بالنظير 15N – د. فواز كرد علي		
10) التغيّرات في الطاقة الكلّية ومكونات الجدار الخلوي لبعض المنتجات الزراعية الثانوية	88	94
المعاملة بهيدروكسيد الصوديوم أو حمض هيدروبروميك – د. محمد راتب المصري		
في المجال الجيولوجي		
1) التحرّي الإشعاعي والجيوكيميائي عن اليورانيوم في التوضعات الرباعية	84	88
والنيوجينية في منطقة منظومة فالق الرصافة (الجهة الشامية – الفرات الأوسط)		
أحمد العلي، د. يوسف جبيلي، موسى عيسى		
في مجال الوقاية		
1) تصميم فانتوم لضبط الجودة لتجهيزات التشخيص الشعاعي بأشعة X–	83	86
د. محمد حسان خريطة، أسامة أنجق، خالد والي		
2) استخدام الزجاج في التدريع الإشعاعي – سراج يوسف	83	91
3) النشاط الإشعاعي الطبيعي في بعض مصادر مياه الشرب في المناطق الساحلية والشمالية...	85	99
والشرقية والجزيرة في سورية– د. محمد سعيد المصري، عماد بيرقدار، يُسرأمين، سامر أبوبكر		
4) تعيين تراكيز السيزيوم 137، 134 و السترونسيوم 90 في بعض منتجات سلسلة الجبال..	86	83
الساحلية الزراعية – د. محمد سعيد المصري، عامر نشواتي، بشرى العاقل		
5) التأثيرات الصحية الناجمة عن التعرض المهني لبعض العناصر الكيميائية المستخدمة	88	87
في الصناعة ومؤسسات البحث العلمي وطرق الوقاية منها– د. عدنان بدور، د. عبد الوهاب علاف		
6) إزالة تلوث معدات وتجهيزات مخبرية ذات طبيعة وسطوح مختلفة	88	89
د. محمد حسان خريطة، مصطفى خيطو، خالد والي		

باب الكتب الحديثـــة

		العدد	الصفحة
في المجال الفيزيائي			
1) كهرباء نظيفة من الفولطيات الضوئية.....	(تأليف: ماري د. أرشر و روبرت هل) (عرض وتحليل: ريتشارد كوركِش)	83	97
2) مدخل إلى مسرّعات الجسيمات الثنائية والبصريات اللاخطية المترابطة ذات الإكسيتونات	(تأليف: إ. ج. ن. ويلسون)..... (عرض وتحليل: ر. د. روث)	84	96
3) فيزياء الوقاية الإشعاعية	(تأليف: جيمز إ. مارتن)..... (عرض وتحليل: ج. أ. دي)	84	97
4) أسرار عالم الجسيمات الأولية..... أوديسة الجسيم: رحلة إلى قلب المادة	(تأليف: ف. كلوز- م. مارتن- ك. سوتون) (عرض وتحليل: ك. بيتش)	85	107
5) التشابك: أعظم سرٍّ في الفيزياء	(تأليف: أ. أكزيل)..... (عرض وتحليل: ف. فيدرال)	86	88
6) أسرع من سرعة الضوء: قصة تأمل علمي	(تأليف: ج. ماجيغو)..... (عرض وتحليل: ج. إليس)	86	89
7) أسس وتطبيقات الأمواج فوق الصوتية	(تأليف: ج. دافيد، ن. تشيك)..... (عرض وتحليل: م. ليفي)	88	99
8) قياس الزمن: الزمن والتواتر والساعة الذرّية ..	(تأليف: ك. أودوين، ب. جينوت)..... (عرض وتحليل: ج. فانيه)	88	100
في المجال الكيميائي			
1) طرائق تبعثر أشعة X والنترونات في عالم ..... البوليميرات	(تأليف: يونغ – جوي روي)..... (عرض وتحليل: تشارلز ج. غلينكا)	83	98
2) الأكسجين: الجزيء الذي صنع العالم	(تأليف: ن. لين)..... (عرض وتحليل: توماس ب. ل. كيركوود)	85	108
في مجال الوقاية			
1) الجرعة المسموح بها: تاريخ الوقاية الإشعاعية... في القرن العشرين	(تأليف: ج. صامويل ووكر)..... (عرض وتحليل: ج. أ. دي)	84	97

at the boundary of actual possibilities of physics and digitation.

Key words
kerosene, turbulence, alliance project, entropy.

THE SIMULATION OF (CND) NON DESTRUCTIVE CONTROLS: THE SOFTWARE (CIVA)

P. CALMON
Direction de la recherche technologique
CEA centre de Saclay

ABSTRACT

The quality of products, the security of the installations, and therefore the safety of persons, are the major bets of non destructive controls (CND). Nowadays, the industrialists increasingly resort to the simulation for optimizing the achievements. The French Commission of Atomic Energy (CEA) has strongly contributed to this advancement, and it continues to do this through developing and spreading the software (CIVA) which is a fruit of its upstream research in this field.

Key words
non-destructive control, the software (CIVA).

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

INTER VENTION SIMULATION IN HOSTILE MEDIUM

L. CHODORGE
Direction de la recherche technologique
CEA centre de Fontenay-aux-Roses

ABSTRACT

Ensure that the staff working in the nuclear installations will be also the least exposed to radiations and to optimize technically and economically every action of this type: these two possibilities open great future to the inter vention simulation in hostile medium.

Key words

radiation dose, intervention, hostile medium, interaction, adoptation, dose rate.

PROGRESSES IN VIRTUAL PROTOTYPING

C. ANDRIOT
Direction de la recherche technologique
CEA centre de Fontenay-aux-Roses

ABSTRACT

To represent an object, as wellas its behaviour, before obtaining material outlines of it, has become a possibility that is increasingly exploited by industry. The occurred progresses in virtual prototyping, which have become interactive by virtue of real time calculations, open new perspectives to this form of simulation in many fields. CEA is actively participating in these developments.

Key words

virtual prototyping, virtual environment, digital maquette, the platform of the virtual reality.

THE SIMULATION OF HYDROCARBONS' FIRES

G. DUFFA & T-HÀ N-BUI
Direction des applications militaires
CEA centre d'études scientifiques et techniques d'Aquitaine

ABSTRACT

The prevention or control of fires related to accidental origins at the time of transport of weapons, among other sensible materials, is a problematic taken into consideration by the department of military applications of French Atomic Energy Commission. The approach, in this field, is traditionally normative and experimental. The digital simulation of the fire of some product surface such as kerosene is, indeed,

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

Key words

soldering, austentic steel, isostatic hot compaction.

THE OPTIMIZATION OF COMPACT THERMIC EXCHANGES BY DIGITAL SIMULATION

P. MERCIER & P. TOCHON

Groupement pour la recherche sur les échangeurs thermiques (GRETh)
Direction de la recherche technologique, CEA centre de Grenoble

ABSTRACT

In the field of exchanges of heat, investigators carry on basic studies of the mechanisms that govern the turbulent flows. Such a study is determinant but still partially unclear. In the meantime, industrialists call always for technological developments with better achievement. At the junction of these concerns, the tools of simulation play a major role.

Key words

thermic exchangers, digital simulation, turbulent flow.

NUCLEAR REACTORS FROM SIMULATION TO SIMULATORS

B. FAYDIDE

Direction de l'énergie nucléaire, CEA centre de Grenoble

ABSTRACT

The conception and demonstration of nuclear installations safety, especially the pressurized water reactors, largely rely on digital simulation, which, in itself, is supported by fundamental and analytical, as well as comprehensive experimentations that enrich the physical models which serve as bases to the simulation.

There is software for thermohydraulic simulation such as cathare, which is developed by CEA and its partners, is being integrated in the simulators that permit, among others things, operators to confront accidental situations, even the less probable ones.

Key words

nuclear reactor, software, simulation, simulators, cathare code.

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

dealing with a new assembly of plutonium fuel, capable of securing maximum consumption of the latter inside pressurized water reactors. Further to physical concept of the assembly and its integration inside the reactor, modelling would allow establishing a complete flux of matter and would help modelling the production of an electronuclear compound as a whole.

Key Words

plutonium, Uranium, recycling, nuclear fuel, software.

PREDICTING THE 3D STRUCTURE OF PROTEINS

H. ORLAND

Direction des sciences de la matière, CEA centre de Saclay

ABSTRACT

Defining the spatial structure of a protein, in three dimensional configuration, on basis of its chemical formula, poses a problem that has no real experimental answer nowadays. Nevertheless, it is an affair of great interest, especially to the understanding of certain ailments and to the designing of requested drugs. The mechanisms of action of a protein are indeed closely related to its form and the way it folds itself in. the digital simulation of that process has achieved too much progress during the last few years.

Key words

Proteins, genome, molecular modelling, amino acids.

THE VIRTUAL SOLDERING

A. FONTES

Direction de la recherche technologique, CEA centre de Saclay

Y. LEJEAIL

Direction de l'énergie nucléaire, CEA centre de Cadarache

È. LARIOTTE

Direction des applications militaires, CEA centre de Valduc

H. BURLET

Direction de la recherche technologique, CEA centre de Grenoble

ABSTRACT

It turned out that digital simulation is an effective means to control the principal effects of soldering, and to becoming assure of the reliability of the soldered joints. In order that simulation be predictive, it should model, in a simplified but proper manner, the interactions between the physics of the operation, the conduct of the bath of soldering, thermal physics, metallurgy and the mechanics of the procedure.

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

BEHAVIORAL MODELING

N. LECLER, A. MASSON AND J. VANDERVLIET
Direction des applications militaires, CEA/DAM - Ile-de-France

ABSTRACT

When the performance tests of complex systems are dependent on many parameters, it is often difficult to determine which will be the sole "good" experimentation that needs to be achieved. The behavioral modeling implemented at the directorate of military applications, of the French Atomic Energy Commission, constitutes an effective aid for optimizing such systems.

Key Words

behavioral modeling, experimentation, optimization, systems.

THE SIMULATION PROGRAM: THE GUARANTEE OF WEAPONS WITHOUT NUCLEAR TESTING

D. BESNARD
Direction des applications militaires, CEA center DAM - Ile de France

ABSTRACT

The Simulation, from now on, composes the basic methodology upon which will depend the guarantee of reliability, security and performance of french nuclear weapons that will replace the nowadays operational heads – This work will take place without new tests, but with resorting to a new interpretation of last once. Modelling, digital stimulation and experimentation remain in fact, an indissociable set, progressive by equipped with new and powerful tools.

Key Words

Reliability of nuclear weapons, treaty for the prohibition of nuclear testing, digital simulation, simulation tools.

NUCLEAR FUEL
THE MODELLING OF ADVANCED PLUTONIUM ASSEMBLY

R. LENAIN
Direction de l'énergie nucléaire, CEA centre de Saclay

ABSTRACT

The advantage of modelling in the nuclear domain is best illustrated by the study example

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

are the new misadventures of the idea that illustrate, for example, in the physics of particles, the quantic theory of fields, and that conduct the notion of effective theory.

Key words
misadventures, interactions, transmissions, normalization, fractal, quantic.

THE SIMULATIONS IN PHYSICS OF PARTICLES

B. MANSOULIÉ
Direction des sciences de la matière
CEA centre de Saclay

ABSTRACT

In the simulations that associate experimentations on physics of particles, the detailed description of physical process, beside elaboration of more and more sensible detectors, plays an essential role. But chance is not at all absent, because it presents the best means not to introduce a roundabout way in the choice of data which need be injected in the modelling of complex phenomena, and because quantic physics is intrinsically a mere probability. These simulations produce virtual data that are very near to what would the reality be later on.

Key Words

Monte-Carlo simulation program, simulation of boson Higgs decay, virtual data, modelling of phenomena, large hadron collider.

THE MODELLING OF SURFACES, INTERFACES AND NANOSTRUCTURES

M-C. DESJONQUÈRES, D. GREMPEL, H. NESS AND C. BARRETEAU
Direction des sciences de la matière, CEA centre de Saclay
D. SPANJAARD
laboratoire de physique des solides - Orsay

ABSTRACT

The comprehension of a process and the control of its manipulation, such as the spontaneous nanostructure of surfaces and the conduction between a microscopic point and a surface, are essential for the industry of new technologies, where miniaturization is a major challenge. In this domain, modelling shall take into account the atomic character of matter with extremely high accuracy.

Key Words

Physics of surfaces, chemistry of surfaces, interfaces nanostructures, scanning tunneling microscope.

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

the flow of neutrons induce a structural development of materials (called aging) that can be translated into a modification in its properties. How could we predict the behaviour of materials on the very long run? And how could we extrapolate their development under new conditions of irradiation? How could we even predict their properties under severe exposure conditions? Numerical simulation shows to be an inescapable tool, both for supporting experimentation augmenting the "return of investment", and as a unique resort when experimention is inaccessible.

Key Words

simulation, Monte-Carlo method, tomographie atomic probe, Algorithm, theory of density dependence.

THE MODELIZATION OF BIOLOGICAL MACROMOLECULES

M. J. FIELD

Institut de biologie structurale

J. PIERRE EBEL

Direction des sciences du vivant - Grenoble

ABSTRACT

The simulation shows that it is the appropriate instrument which permits to explore the best quantity of the large amount of data that comes from the construction of important projects of the gentic inheritance of different organisms.

In this frame, the Atomic Energy Commission (AEC) in France is interested especially in the modelization of the structure of biological systems and its duties as proteins. In addition to deepining the knowledge, these researches will have industrial and pharmaceutical sequences as development of new antibiotics, medicine and biological mimeties.

Key Words

modelisation, macromolecules, genome, protein, antibiotic, mutation, nucleic acids.

THE MISADVENTURES OF THE THEORY FOR A PREDICTIVE PHYSICS

J. ZINN-JUSTIN

Direction des sciences de la matière

CEA centre de Saclay

Whether theory precedes the experiment or follows it, it should, in the field of physics, carry out certain simplifications in a more or less provisional manner .

Under this condition, it turns practically to be predictive in agiven moment .It should particularly identify all the important parameters which permit describing the phenomenons in given scale. These

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

ABSTRACT

Earth climate is the result of complex interactions between numerous processes that involve atmosphere, oceans and continental surfaces. How does this system work? Would it be possible to forecast its evolution at the scale of one season or longer term? Do the human activities modify, in their course, the big climatic balances on earth. What are the consequences of these activities on humanbeing life in future? There are so many questions that render the researches on climate and its evolution particularly sensible, and that focus light on climate models and their results. These digital models, known under the term "models of general circulation" permit to simulate the temporal evolution of the three-dimensional characteristics of the atmosphere and oceans, taking into consideration their interactions with the continental surfaces and glaciers.

Key Words

climate, atmosphere, oceans, continental, surfaces, glaciers, digital, models.

SIMULATION AND STORAGE OF NUCLEAR WASTES

I. TOUMI, E. MOUCHE AND A. BENGAOUER

Direction de l'énergie nucléaire - CEA center de Saclay

ABSTRACT

In the domain of storage and deposition of nuclear wastes, simulation comes, as in other domains, to complement experimentation. But, here, when one takes into account the related time scales, it can also substitute experimentation more than is the case in other domains. What is the role of simulation? It is to facilitate the search for determinant parameters in the evolution of sites, materials and packages, and, finally, in the evolution of radiation doses intended to be preserved as long as they still induce an effect on humans.

Key Words

simulation, storage, deposition, geological medium.

THE SIMULATION OF MATERIALS

G. MARTIN

Direction de l'énergie nucléaire - CEA center de Saclay

G. ZERAH

Direction des applications militaires - CEA center DAM-Ile de France

ABSTRACT

In nuclear industry, materials largely contribute to increase the reliability and safety of reactors in one hand, and the installations of the cycle of fuel themselves on the otherhand. Their behaviour under irradiation is obviously a major concern for the metallurgist. Indeed, the action of ionized radiations and

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

ABSTRACT OF THE SUBJECTS PUPLISHED IN THIS ISSUE

COMPREHENSION, DESIGN AND EXECUTION: THE THREE PURPOSES OF SIMULATION

E. KLEIN
Direction des sciences de la matière
CEA centre de Saclay

ABSTRACT

As a scientific activity, simulation seems to offer, in advance, as much promises as risks. Researchers and Engineers shall be kept aware of its limitations since it provides an indispensable mean for bypassing the insufficiencies and incapabilities of experimentation.

Key Words

simulation, experimentation, modeling, theory.

SIMULATION AS A METHODOLOGY FOR R&D

D. BESNARD
Directeur du programme simulation
Direction des applications militaires - CEA center DAM - Ile de France

ABSTRACT

Scientific research, which is traditionally organized in accordance with the dialectic of theory and Experiment, is progressively structured according to a triplicity that firstly associate theory and modeling, and then join to numerical simulation that is followed by experimental verification. This methodology of Simulation in different levels of maturity, according to the sectors, impose itself everywhere today.

Key Words

methodology of simulation, dialectic theory/experiment, digital simulation, validity, modelisation of the climat.

THE MODELLING OF CLIMATE

P. BRACONNOT & O. MARTI
Laboratoire des sciences du climat et de l'environnement - CEA-CNRS
Direction des sciences de la matière - Saclay

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

- INTERVENTION SIMULATION IN HOSTILE MEDIUM ..... L. CHODORGE 118
- PROGRESSES IN VIRTUAL PROTOTYPING ..... C. ANDRIOT 122
- THE SIMULATION OF HYDROCARBONS' FIRES ..... G. DUFFA & T-HÀ N-BUI 127
- THE SIMULATION OF NON DESTRUCTIVE CONTROLS: (CND) ..... P. CALMON 130
  THE SOFTWARE (CIVA)
- **2003 SUBJECT INDEX** 135
- **ABSTRACTS OF THE SUBJECTS PUBLISHED IN THIS ISSUE IN ENGLISH** 152

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

CONTENTS

EDITORIAL ..... B. BOUQUIN 7

THE SIMULATION, NEW TECHNIQUE, ANCIENT TRADITION ..... M. SERRES 8

COMPREHENSION, DESIGN, EXECUTION: THE THREE PURPOSES OF SIMULATION ..... E. KLEIN 13

SIMULATION AS A METHODOLOGIE FOR R&D ..... D. BESNARD 17

I- SIMULATE FOR UNDERSTANDING 23

THE MODELING OF CLIMATE ..... P. BRACONNOT, O. MARTI 24

SIMULATION AND STORAGE OF NUCLEAR WASTES ..... I. TOUMI, E. MOUCHE, ET AL 31

THE SIMULATION OF MATERIALS ..... G. MARTIN, G. ZERAH 35

THE MODELIZATION OF BIOLOGICAL MACROMOLECULES ..... M. J. FIELD, J. PIERRE EBEL 44

THE MISADVENTURES OF THE THEORY FOR A PREDICTIV PHYSICS ..... J. ZINN-JUSTIN 50

THE SIMULATION IN PHYSICS OF PARTICLES ..... B. MANSOULIÉ 54

THE MODELLING OF SURFACES, INTERFACES AND NANOSTRUCTURES ..... M-C. DESJONQUÈRES, ET AL 57

BEHAVIORAL MODELLING ..... N. LECLER, ET AL 63

II- SIMULATE FOR DESIGN 67

THE SIMULATION PROGRAM: THE GUARANTEE OF WEAPONS WITHOUT NUCLEAR TESTING ..... D. BESNARD 68

NUCLEAR FUEL: THE MODELLING OF ADVANCED PLUTONIUM ASSEMBLY ..... R. LENAIN 80

PREDICTING THE 3D STRUCTURE OF PROTEINS ..... H. ORLAND 87

THE SIMULATION OF BIOLOGICAL SYSTEMS ..... X. GIDROL 92

THE VIRTUAL SOLDERING ..... A. FONTES, ET AL 99

THE OPTIMIZATION OF COMPACT THERMIC EXCHANGES BY DIGITAL SIMULATION ..... P. MERCIER & P. TOCHON 104

III- SIMULATE FOR ACTING 110

NUCLEAR REACTORS FROM SIMULATION TO SIMULATORS ..... B. FAYDIDE 111

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

Notice: Scientific matters and different inquiries; subscriptions, address changes, advertisements and single copy orders, should be addressed to the journal's address:

Damascus, P.O.Box 6091 Phone 6111926/7,Fax 6112289, Cable; TAKA.

E-mail :aalam_al_zarra@aec.org.sy

Subscription rates, including first class postage charges : a) Individuals $ 30 for one year

b) Establishments $ 60 for one year

c) for one issue $6

It is preferable to transfer the requested amount to:

The commercial Bank of Syria N-13 P.O. Box 16005 Damascus-Syria account N-3012/2

Cheques may also be sent directly to the journal's address.

The views expressed in any signed article in this journal do not necessarily represent those of the AEC of Syria, and the commission accepts no responsibility for them.

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية

AALAM AL-ZARRA

JOURNAL OF THE ATOMIC ENERGY COMMISSION OF SYRIA

Managing Editor

Dr. Ibrahim Othman

Director General of A. E. C. S.

Editorial Board

Dr. Tawfik Kassam

Editor In-Chief

Dr. Mohammed Ka'aka

Dr. Fouad Al-Ijel

Dr. Ahmad Haj Said

Dr. M. Fouad Al-Rabbat

Dr. Elias Abouchahine

Antoune Marine

Dr. Ziad Qutob

90 - 89

19 th Year / JANUARY-FEBRUARY / MARCH-AP

2004

A journal published in Arabic six times a year, by the Atomic Energy Commission of Syria. It aims to disseminate knowledge of nuclear and atomic sciences and of the different applications of Atomic energy.

http://serversmiso.aecs.sy مكتب نظم المعلومات هيئة الطاقة الذرية السورية