

SZIMULÁCIÓS ALGORITMUSOK OKTATÁSA PROJEKT SZEMLÉLETBEN

DR. KELEMEN ANDRÁS, KELEMEN@JGYPK.SZTE.HU
ÁRGILÁN VIKTOR SÁNDOR, GILAN@JGYPK.SZTE.HU

SZTE JGYPK ATTI INFORMATIKA ALKALMAZÁSAI TANSZÉK

ABSZTRAKT

A „Szimulációs algoritmusok” a Szegedi Tudomány Egyetemen választható kurzus a IV éves informatika tanár szakos hallgatók számára. A kurzus fő célkitűzése, hogy a hallgatókban kialakítsa az informatika, mint tudományág multidiszciplináris szemléletét. További célkitűzés, hogy a leendő informatika tanárok a közoktatásban támogatni tudják az informatika integrálását az egyes tantárgyak oktatásába. A kurzus végére a hallgatóknak egy általuk választott témából beadandó dolgozatot kell készíteniük, melynek megoldására átlagosan 6 hét időtartam áll rendelkezésre. Végtermékként pedig a hallgatóktól a teljesen működő szoftvert, fejlesztői dokumentációt, felhasználói kézikönyvet, és prezentációt várunk. Mivel elsősorban tanár szakos hallgatóknak van meghirdetve a kurzus, így a számonkérés során a prezentációs készség is figyelembe van véve az osztályzat kialakításánál.

KULCSSZAVAK: Szimuláció, algoritmusok, multidiszciplináris, fizika, projekt munka

BEVEZETŐ

A természettudományos kutatások Galilei óta a számítógépek megjelenéséig elméleti és kísérleti módszerre támaszkodtak. Az elméleti módszer deduktív jellegű, a már ismert általános törvényekből matematikai módszerek alkalmazásával jut el az egyes jelenségek magyarázatához. A kísérleti módszer ellenőrizhető, megismételhető módon méréseket végez. A mérések paramétereit szintén ellenőrizhető módon változtatja. A mérések során mindig az adott jelenség egy kicsiny részletére kíváncsi. Az elmélet és a kísérlet szorosan kapcsolódik egymáshoz, ugyanis az elmélet által jósolt eredményeket kísérletileg is ellenőrizni kell. Fordítva is igaz a dolog: a kísérletek által észlelt új jelenségeket elméletileg is meg kell magyarázni. Azonban mind az elméleti, mind a kísérleti módszernél gyakran korlátokba ütközünk. Az elméleti oldalon belefuthatunk olyan differenciálegyenletekbe, melyet analitikusan nem tudunk megoldani, ekkor eszközként a numerikus analízist kell választani. Ebben az esetben nem a megoldásfüggvényt kapjuk meg, hanem a függvény értékeit egy számsorozatban. Kísérleti oldalon pedig az egyre fejlettebb technológiát igénylő mérési módszerek csak aránytalanul nagy költségekkel valósíthatóak meg. A számítógépek megjelenésével lehetőségünk van az elméleti és kísérleti módszerekkel nem kezelhető jelenségek szimulációs módszerrel történő vizsgálatára.

18.MONTE CARLO MÓDSZEREK

A Manhattan projekt keretében Neumann János, Stanislaw Ulam és Enrico Fermi azzal a problémával szembesült, hogy a projektben dolgozóknak radioaktív anyagokkal kellett

kísérletezniük és meg kellett oldani az árnyékolást, azaz milyen anyagból milyen vastag védőpajzs kell. Az egyes sugárzás fajtákra a fizikai részleteket ismerték, azonban a kapott differenciálegyenleteket nem tudták megoldani. A megoldáshoz Ulam a Solitaire játékból indult ki. Ismerjük az összes szabályt, tudjuk pontosan hány kártya van a pakliban. Az a kérdés, hogy az összes véletlenszerű kezdeti állapotból hány állapotban lehet sikeresen kirakni a menetet. Ez nagyon bonyolult kombinatorikai számításhoz vezet. Egy gyakorlati megoldás: rakjuk ki 100-szor a játékot. Számoljuk meg hányszor sikeres a kirakás. Ebből tudunk következtetni arra, hogy mi lehet a valószínűsége annak, hogy ki lehet rakni a játékot. Hasonló módszerrel számolták a neutron elnyelődést is: elindítottak egy neutron a szimulációban és követték. Sokszor megcsinálták ezt más kezdeti sebesség mellett. Ebből ki lehetett következtetni azt a valószínűséget, amire kíváncsiak voltak. Ebből született meg a Neumann János által Monte Carlo módszernek nevezett szimulációs eljárás, ahol a szimulációhoz szükséges mérési eredményeket a tényleges kísérlet jellegének megfelelő véletlenszám sorozatokkal állítják elő. Ehhez természetesen megfelelő véletlenszám generátorok is kellenek. Módszert akkor használják, amikor nem lehet zárt formájú megoldást találni a feladatra, vagy amikor nem éri meg determinisztikus algoritmust alkalmazni (pl. Molekuláris Dinamika, numerikus számítások).

19.SZIMULÁCIÓS ALGORITMUSOK KURZUS

A „Szimulációs algoritmusok” a Szegedi Tudomány Egyetemen kötelező kurzus a IV. éves informatika tanár szakos hallgatók számára. A kurzus fő célkitűzése, hogy a hallgatókban kialakítsa az informatika multidiszciplináris szemléletét, a különböző tudományágakkal való szoros kapcsolatát. Továbbá célkitűzés még, hogy a leendő informatika tanárok a közoktatásban támogatni tudják az informatika integrálását az egyes tantárgyak oktatásába. A rendelkezésre álló időkeretek miatt a kurzuson belül a hangsúly a matematika és a fizika egyes viszonylag könnyen algoritmizálható fejezeteire koncentrálni a következő tematika alapján:

- A szimuláció fogalma, jelentősége a természettudományokban.
- Monte Carlo módszerek alapjai. Véletlenszám generátorok és implementálásuk.
- Véletlenszámok használata (a π értékének meghatározása, lotto játék)
- Analitikus függvények grafikus ábrázolása számítógépen
- Párhuzamos programozás alapjai
- Numerikus analízis elemei (Euler, Runge-Kutta)
- Számítógépes fizika - harmonikus oszcillátor
- Számítógépes fizika – hővezetés
- Számítógépes fizika – bolygómozgás
- Számítógépes fizika – Brown mozgás
- Számítógépes fizika – rezgőkör
- Kioldódási modellek

A szemináriumok gyakorlat orientáltak. A kurzus során a hallgatók 2 db zárthelyi dolgozatot írnak, valamint a kurzus végére egy általuk választott témából beadandó dolgozatot kell készíteniük. melynek megoldására átlagosan 6 hét időtartam áll rendelkezésre. Végtermékként pedig a hallgatóktól a teljesen működő, részletesen dokumentált tesztesetekkel tesztelt szoftvert, fejlesztői dokumentációt, felhasználói kézikönyvet, és prezentációt várunk. A bemutatandó szoftverrel szemben követelmény a grafikus felület, a választott jelenség jól érthető esztétikus demonstrációja, valamint az egyszerű kezelhetőség. Mivel elsősorban tanár szakos hallgatóknak van meghirdetve a kurzus, így a számonkérés során a prezentációs készség is figyelembe van véve az osztályzat kialakításánál.

20.SZEMELVÉNYEK A HALLGATÓK MUNKÁIBÓL

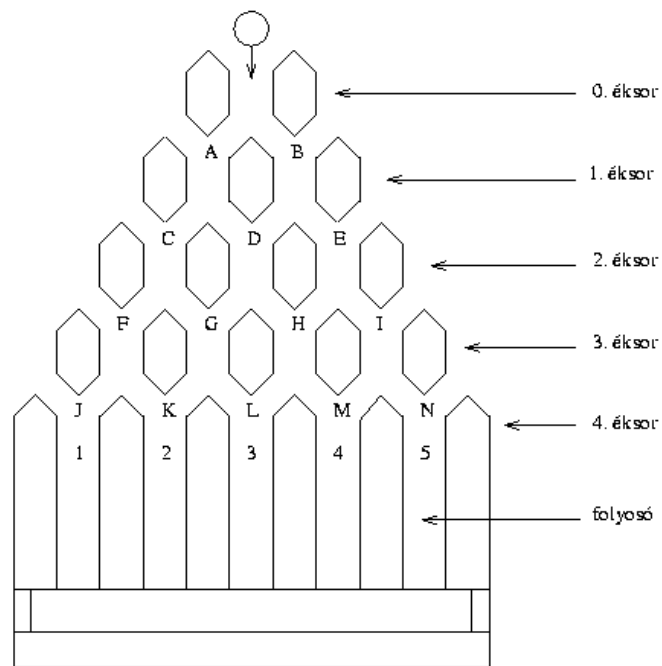
Az előző fejezetben már említettük, hogy a kurzus teljesítési követelményei között házidolgozat is szerepel. A házidolgozat során egy adott témára kell szimulációs szoftvert készíteniük. A szoftverrel szemben követelmény, hogy a szimulációt grafikusán szemléltesse. A beadott dolgozatban természetesen körül kell járni az adott szimuláció elméleti hátterét is. A továbbiakban három hallgatók által készített munkát ismertetünk.

3.1. A Galton deszka

A Galton deszkát a normális eloszlás kísérleti szemléltetésére szokták alkalmazni. Az eredeti deszka párhuzamos sorokban szabályos háromszög alakban felvert ékekből áll. A legfelső szögre egy golyót ejtünk. Innen két irányba térhet ki: jobbra vagy balra. Rápattan a következő szögre és ott hasonlóan jobbra vagy balra pattan és így tovább. A legvégén eléri az alsó sor alá helyezett tartályok valamelyikét és beleesik. Milyen eredményre számíthatunk? Annak a valószínűsége, hogy egy golyó a k. csatornába esik

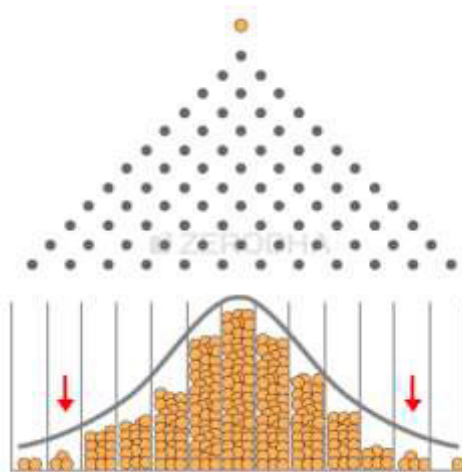
$$P_k = \binom{n}{k} \frac{1}{2^n} \quad (k = 0, 1, 2, \dots, n) \quad (1)$$

Azaz binomiális eloszlást követ. A nagy számok törvénye alapján azonban, ha N elég nagy, akkor a binomiális eloszlás a normálishoz közelít, melynek eloszlás sűrűségfüggvénye haranggörbe alakú.



1. ábra: Az eredeti Galton deszka sematikus rajza. .

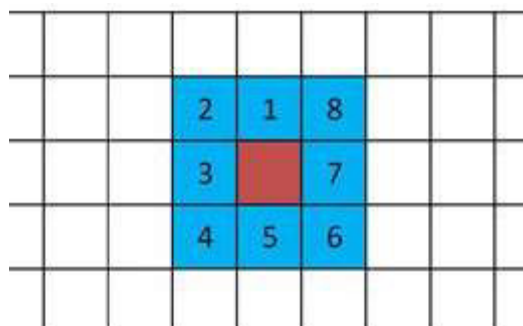
Ha egy kísérlet során a tartályba esett golyók hisztogramjára felrajzoljuk a normális eloszlás görbáját, akkor nagyszámú kísérlet esetén (N elég nagy) a golyók eloszlása jól megközelíti a görbét.



2. ábra: A kísérlet során a tartályokba esett golyók eloszlása.

3.2. Conway féle életjáték

John Horton Conway cambridge-i matematikus által alkotott életjáték “nullszemélyes”, mivel a játékosnak csak annyi a feladata, hogy megadjon egy kezdőalakzatot, és figyelje a



változásokat. A játék egyes lépéseit a számítógép számolja ki, és hajtja végre. Maga a játék alapja egy négyzetrács, ez az élettér. A mezőket celláknak, a cellákba helyezett korongokat pedig sejteknek nevezzük. Egy cellába egy sejt kerülhet. Egy sejt szomszédjainak tekintjük a négy kereszt irányban levő és a négy átlós irányban levő korongokat. Így egy sejtnak 8 szomszéd cellája van.

3. ábra: Sejt a szomszédos mezőivel.

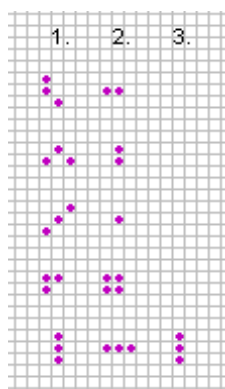
A sejtek által alkotott halmazt alakzatnak nevezzük. Kezdeként megadunk egy alakzatot, ez a kiinduló alakzatunk, a kezdő lépés, vagyis a kezdő generáció. Minden lépés egy új generáció. A játék remekül modellezi az életfolyamatokat: születés, túlélés, halál. Ezért is nevezhető szimulációs játéknak. Conway genetikai szabályai nagyon egyszerűek, egy sejttel egy lépésben a következő három dolog egyike történhet:

1. Új sejt születik minden olyan cellában, melynek környezetében pontosan három sejt található.
2. A sejt túléli, vagyis életben marad a következő generációra, ha két vagy három szomszédja van.
3. A sejt elpusztul, ha kettőnél kevesebb, vagy háromnál több szomszédja van (elszigetelődés/túlnépesedés).

Fontos megjegyezni, hogy az összes születés és halál egyidejűleg következik be, ezért a következő algoritmus jól működik:

Első lépésben megjelöljük azokat a sejteket, amelyek el fognak pusztulni. Második lépésben berakjuk az új sejteket azokba a cellákba, melyek szomszédjába három sejt is található. A harmadik lépésben pedig töröljük a megjelölt sejteket.

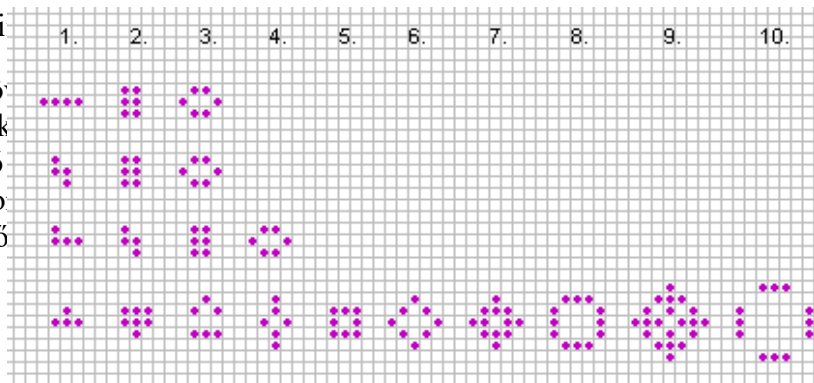
Több formációt különböztethetünk meg a kiinduló alakzat alapján. A kiinduló alakzatok sokfélék lehetnek, és a játék közben is mindenféle érdekes, szép alakzat létrejöhet. Megjegyzendő, hogy ha a kezdő alakzat nem volt szimmetrikus, a játék közben



szimmetrikussá válhat, de a kezdetben szimmetrikus alakzat mindig szimmetrikus marad!

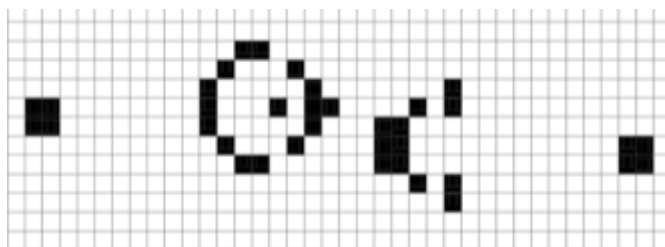
4. ábra: Ki

Bizonyos alakzatok rö-
marad életben. Vannak
önmagukba visszatérő
alakzatok (ezeket Co
végtelenségig növekedő



em
san
adó
nég

A végtelenségig növekedő formációk bebizonyításához egy érdekes történet is társul. Conway 50 dolláros díjat ígért annak, aki egy bizonyítottan végtelenül növekedő formáció kiinduló alakzatát megadja. Sokan próbálkoztak ezen kiinduló alakzat megtalálásával, de végül a Massachusetts Egyetem Mesterséges Intelligencia Csoportjának két tagja nyerte egy "sikló kilövővel".



5. ábra: Sikló kilövő

Az induló alakzat "ágyúvá" alakul, ami először a 40-ik lépésben lő ki egy "siklót", majd ütemesen ismétlődve, minden további 30-ik periódusban egy-egy továbbit. Mivel minden "sikló" születésekor öt újabb sejt kerül a táblára, a népesség nyilvánvalóan korlátlanul növekszik

3.3. Inga szimulációja

A matematikai inga egy elég kedvelt rendszer a fizikusok körében, hiszen kis kitérések esetén azonosítható a harmonikus oszcillátorral. Az inga mozgásegyenlete ekkor a következő:

$$\frac{d^2\Theta}{dt^2} + \frac{g}{l}\Theta = 0,$$

ahol Θ a kitérés szöge, g a gravitációs gyorsulás, l pedig az inga hossza. A fenti differenciálegyenlet analitikusan is megoldható, mely megoldás az inga kitérését leíró időfüggvény:

$$\Theta(t) = \Theta_0 \sin(\omega t + \varphi),$$

ahol $\omega = \sqrt{\frac{g}{l}}$ a lengés körfrekvenciája. Az inga lengésideje:

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}}$$

Ha a mozgás során a csillapítást is figyelembe vesszük, akkor a differenciálegyenlet a következőképp módosul:

$$\frac{d^2\Theta}{dt^2} + \frac{g}{l}\Theta + q \frac{d\Theta}{dt} = 0,$$

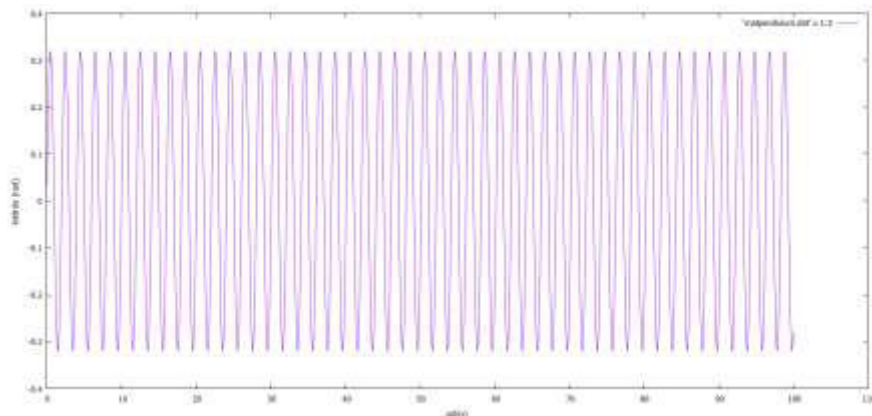
ahol q a csillapítási tényező. Az egyenlet analitikus megoldása a következő

$$\Theta(t) = \Theta_0 e^{-qt} \sin(\omega t + \varphi),$$

ahol $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - q^2}$.

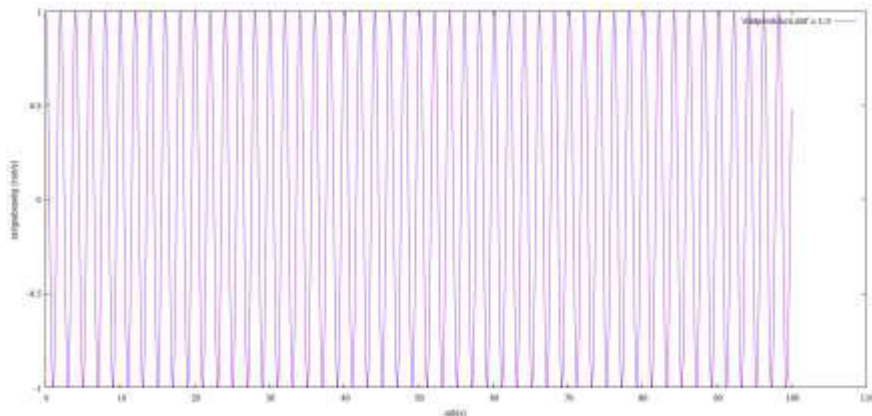
Szimulációnk során egy C++-ban írt szimulációs programot használtunk, mely az inga differenciál egyenletét a negyedrendű Runge-Kutta módszert alkalmazva numerikusan oldotta meg. A szimuláció során a kezdőértékek a következők voltak: az inga hossza 1 m , a csillapítási tényező $0,5$. A kezdő kitérés 0 , a kezdősebesség $1\frac{1}{s}$, míg a maximális integrálási idő 100 s volt.

A szimuláció során a kitérést és a szögsebességet számoltuk, melyekkel egyértelműen meg lehet határozni a rendszer állapotát. A 6. ábrán jól látható, hogy az inga mozgásegyenletének numerikus megoldása igen jól közelíti az analitikus megoldást, s a vártan megfelelően szinuszos alakú.



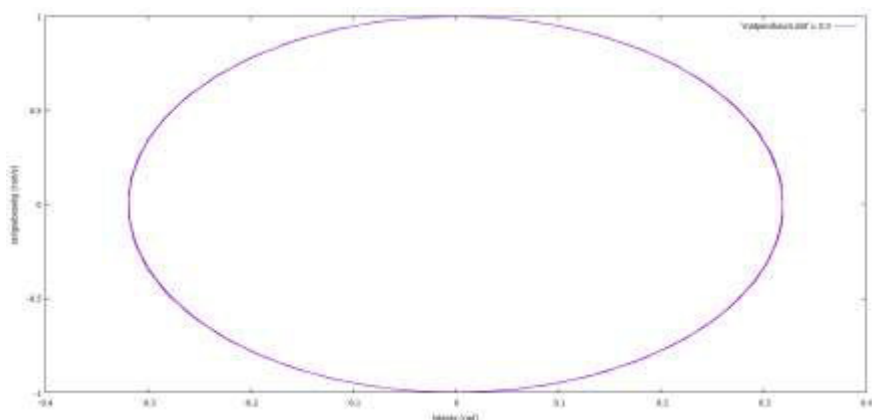
6. ábra: A matematikai inga kitérés-idő grafikonja.

A 7. ábrán jól látható, hogy a szögsebesség is szinuszosan változik az időben.



7. ábra: A matematikai inga szögsebesség-idő grafikonja

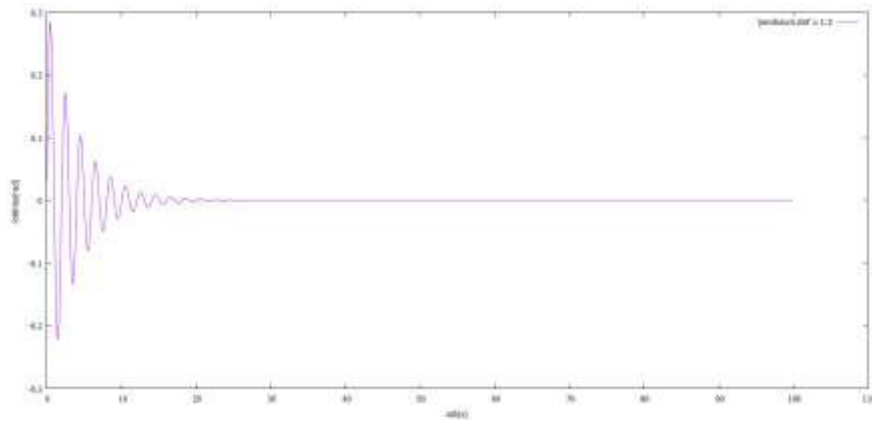
A 8. ábrán jól látható, hogy a matematikai inga fázistere a várakozásoknak megfelelően ellipszis alakú.



8. ábra: A matematikai inga fázistere

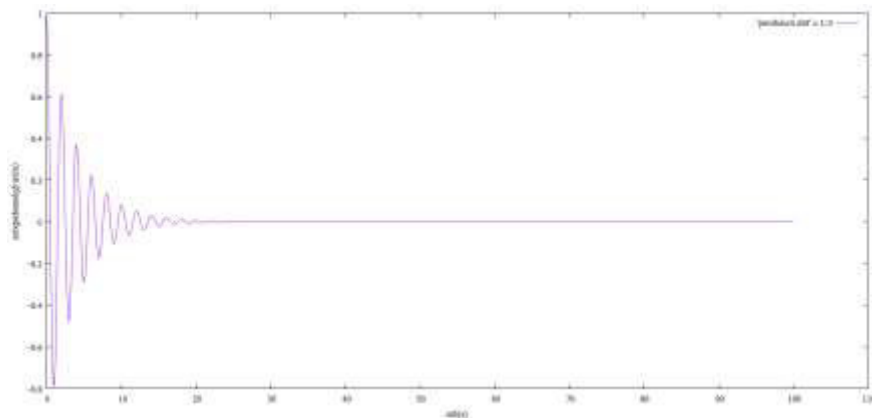
A kapott ábrákból és értékekből levonhatjuk azt a következtetést, hogy a matematikai ingára a negyedrendű Runge-Kutta módszerrel dolgozó szimulációnk megfelelő pontosságú volt.

A matematikai ingához hasonlóan a csillapított inga differenciálegyenletét is megoldottuk numerikusan a negyedrendű Runge-Kutta módszert alkalmazva. A 9. ábrán jól látható, hogy kezdetben a rendszer viselkedése szinuszos, amelynek amplitúdója gyorsan lecseng, majd végül 0 lesz



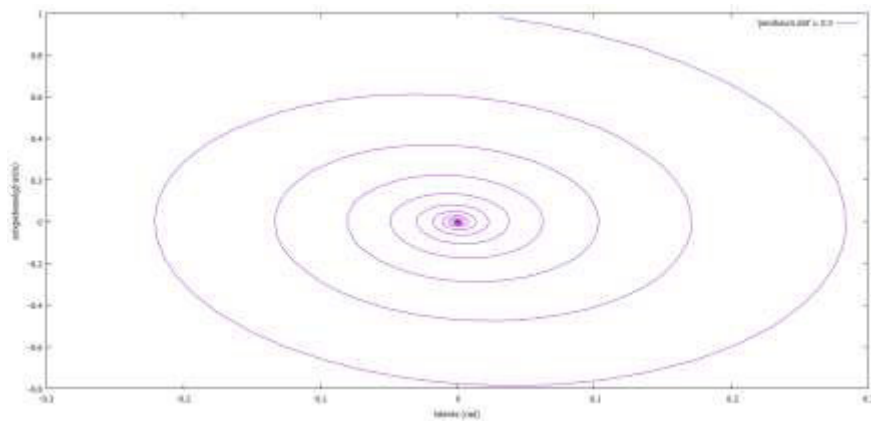
9. ábra: A csillapított inga kitérés – idő grafikonja.

A 10. ábra a csillapított inga szögsebességének időbeli változását mutatja, mely hasonló viselkedést mutat a kitéréssel. Azaz az inga szögsebessége is igen hamar 0-ra csökken. Időben pont akkor, amikor a kitérése is.



10. ábra: A csillapított inga szögsebesség – idő grafikonja.

A csillapított inga fázisdiagramja (11. ábra) a vártak megfelelően spirál alakú, mely a csillapítással megfelelő ütemben spirálozik be a fázisdiagram (0, 0) pontjába.



11. ábra: A csillapított inga fázistere.

Összevetve az analitikus megoldással itt is megállapítható, a negyedrendű Runge-Kutta módszerrel dolgozó szimulációnk megfelelő pontosságú volt.

ÖSSZEFOGLALÁS

Tapasztalataink szerint a kurzus végre az informatika tanár szakos hallgatók már kezdtek az informatikára, mint multidiszciplináris tudományra tekinteni. Továbbá mivel a házi dolgozatban egyedül kellett egy komplett projektet végig vinniük (szoftverfejlesztés, dokumentáció, prezentáció), így már nem ismeretlen számukra a különböző szoftverfejlesztési projekteken való részvétel. Vélelmezhető még, hogy az informatika tantárgy keretén belül pozitívabban fognak a programozás oktatásához hozzáállni.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Dr. Aradi Petra, Gräff József, Dr. Lipovszki György (2014): Számítógépes szimuláció
http://www.tankonyvtar.hu/en/tartalom/tamop412A/2011-0042_szamitogepes_szimulacio/ch05s02.html
2. Geda Gábor: Matematikai modellezés és számítógépes szimuláció
https://dea.lib.unideb.hu/dea/bitstream/handle/2437/90900/Geda_G_ertekezes.pdf;jsessionid=C1706AFCA213D013F656D41D3AA54FCE?sequence=9
3. Geda Gábor, Bíró Csaba, Tánczos Tamás: Számítógépes szimuláció lehetőségei
http://old.ektf.hu/agriamedia/data/present/156/156_present.pdf
4. Galton deszka
<https://phet.colorado.edu/hu/simulation/plinko-probability>
5. Conway féle életjáték
<https://bitstorm.org/gameoflife/>