

SZÁMÍTÓGÉPES FOLYAMATMODELLEK AZ ELMÉLETI FIZIKÁBAN

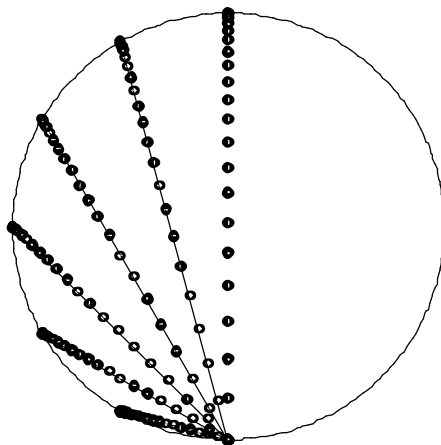
Bárdos Gyula, bardos@ntp.atomki.hu
Elméleti Fizikai Tanszék, Kossuth Lajos Tudományegyetem

Computer experiments in the education of theoretical physics

Computers have been involved intensively in the education of theoretical physics at Lajos Kossuth Uni-versity for one and half years. The students meet them first at the Department of Theoretical Physics in the ground education of applied mathematics, than on the exercises for Mechanics, Electrodynamics, Quantum mechanics and Statistical mechanics and finally they take part in specialized courses on the methods of Com-puter Simulations. The paper presents the aims and the outlines of these courses and provides a review on the collected experiences of the education.

1. Bevezetés

Közel ötszáz éve, hogy Galilei megfogalmazta a fizika két módszertani alapelvét, melynek szel-lemében fejlődik azóta is a fizika. Az első elvnek megfelelő módszertani eljárásnak - mely szerint a természet törvényei a matematika nyelvén íródtak, így azok csak e nyelv elsajátítása révén érthetők meg - köszönheti létét az *elméleti fizika*. A második eljárás, mely az $s = 1/2at^2$ összefüggés lejtőn történő kimérésében valósult meg először a fizika történetében, az évszázadok alatt *kísérleti fizikává*



1. ábra

Galilei a lejtőn történő mozgás és a szabadesés kapcsolatát kimutató gondolkísérletének stroboszkópikus ábrázolása

nötte ki magát. E közismert tények mellett kevésbé ismert azonban, hogy Galilei e két, az idők folya-mán hatalmas gazdagságra szert tevő módszertani eljárás mellett, alkalmazott a természet megismerésében egy két és felediket is, a gondolkísérletet. Bár ez az eljárás ugyancsak jelen volt végig a fizika történetében, csak az utóbbi évtizedekben kezdett a másik kettővel szemben önállósodni, s így szerény múltja miatt legfeljebb rokonaival dicsekedhet.

Ha a fizika e harmadik ágának nincs is még elfogadott neve, az előforduló elnevezések (számítógépes fizika, számítógépes szimuláció, számítógépes kísérletek, algoritmikus fizika) jól jelzik egy-egy jellegzetességét. Nem véletlenül utal szinte mindegyik a számítógéppel való szoros kapcsolatra. Galilei szép

aforizmája, hogy a természet nagy könyve a matematika nyelvén íródott, a szó szoros értelmében igaz a számítógépes modellekre. A filozófia nyelvén úgy is fogalmazhatnánk, hogy a matematikával megfogalmazott gondolat kísérletek testet öltenek a számítógép révén. Az ily módon létrejövő "virtuális valóság" alkalmazási lehetőségei beláthatatlanok; én itt csak egyetlen területével, a fizikai valóság megismerésében játszott szerepével kívánok foglalkozni. Ennek is, a konferencia témájával összhangban, nem annyira az új ismeretet létrehozó eredményeivel, hanem a már meglévők átadásában kibontakozó szerepével.

Az elmúlt két évben egyrészt a FEFA-nak, másrészt a TEMPUS-nak köszönhetően a KLTE Elméleti Fizikai Tanszékén megteremtődtek az objektív lehetőségei annak, hogy a számítógépeket az elméleti fizika oktatásának szerves részévé tegyük. Oktatói részről erre elsősorban azok voltak nyitottak, akik kutatási témája szorosan kapcsolódott a számítógépes szimulációkhoz. S ez nem véletlen. Ők érzékelték a legjobban, hogy amit csinálnak, módszertani szempontból leginkább egy hídra emlékeztet a kísérlet és elmélet között. Kísérletes szempontból ugyanis érdektelen, hogy a kísérlettel kapcsolatos jóslások egy számítógépes modellen történő "mérés" eredményei, vagy valamilyen kép-letből adódnak, melyet ráadásul többnyire szintén számítógép számol ki. A lényeg a valóságos méréssel való összhang. A kísérleti fizikus szempontjából a *számítógépes fizika* elméleti fizika. Az elméleti fizikus számára egy számítógépes modell ismeretelméleti szempontból akkor kezd igazán érdekessé válni, amikor a kísérleti fizikus már több oldalról megerősítette, hogy a modell jó, úgy viselkedik, mint a valóság. Ettől kezdve a modell jelentős segítséget nyújthat az elméletalkotásban, hiszen olyan feltételek mellett vizsgálható a viselkedése, amelyek a valóságos kísérletekben egyáltalán nem, vagy csak nagyon körülményesen valósíthatók meg. Így az elméleti fizikus oldaláról nézve a számítógépes fizika: kísérleti fizika. Ez a kettős jelleg jól megmutatkozik a számítógépes fizika oktatásának gyakorlatában is, melyek az oktatót időnként sokkal inkább emlékeztetik egykori kísérletes laboratóriumi méréseire, mint egy számolási gyakorlatra.

A számítógépes oktatásba bekapcsolódó oktatók másik részét a számítógép, s ezen belül első-sorban a Computer Algebra nyelvek iránti vonzalom motiválta. E nyelvek megjelenése, illetve felhasználása nélkül nehezen képzelhető el a rendszeres gyakorlati modellezés. Erre a feladatra a tan-széken elsősorban a Mathematicát használjuk. Hosszas mérlegelés után döntöttünk e nyelv mellett, egyrészt a grafikai és animációs lehetőségei, másrészt gazdag irodalma miatt.

E cikk első részében először a *számítógépes fizika* oktatásának célkitűzéseit és területeit vázoló fel- majd részletesen foglalkozom közülük az egyikkel, a folyamatmodellezéssel.

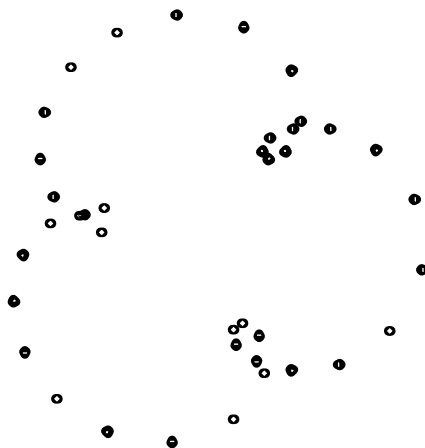
2. A számítógépes fizika oktatása a KLTE Elméleti Fizika Tanszékén

A számítógépes fizika oktatása szorosan kötődik a számítógéppel végzett gyakorlathoz, a számítógépes laboratóriumhoz. Következésképp az előadásoknak is igyekeznünk demonstrációs gyakorlat jelleget adni, ami azt jelenti, hogy a hallgató a számítógép képernyőjén is követi az előadásban hallottakat, s az adott modelleket előállító programokat azonnal futtathatja. A gyakorlatokon így módja van az előadáson megismert programokat variálni, illetve újakat írni. Mindebből következik, hogy az oktatás hatékonyságát növeli, ha megelőzi egy szintrehozó alapozó képzés az alkalmazott matematikából, összekapcsolva a számítógépes problémamegoldások bemutatásával.

A számítógépes fizika oktatása így számítógépes alkalmazott matematikaoktatással kezdődik. Bár Európa egyetemlein régóta oktatnak alkalmazott matematikát elméleti fizikusok, ez nálunk csak néhány éve kezdődött, s eddig csak a mechanikát, elektrodinamikát alapozó matematikát foglalja magában. Természetesen nem akarjuk elvenni a matematikusok kenyerét, de úgy látjuk, hogy a matematika "nyelvtudományának" tanítását jól kiegészíti a "nyelvhasználat" fizikához kötődő gyakorlása. Ezt a korábban elkezdett matematika oktatást az elmúlt évben kiegészítettük annak bemutatásával, hogyan oldhatók meg a magasabb matematikát is alkalmazó feladatok a számítógép felhasználásával. Így a hallgató differenciálni, integrálni, sajátértékproblémát megoldani, ... stb. nemcsak papíron, ce-ruzával tanul, hanem az "intelligens kalkulátorként" használt számítógéppel is.

A számítógépes fizika oktatásának magja az alapfizika kurzusok: mechanika, elektrodinamika, kvantummechanika, statisztikus fizika számolási gyakorlatainak számítógépes laborral történő kiegészítése. A másfél éves tapasztalat, amivel ezen a téren rendelkezünk, győzött meg arról - amit a bevezetésben is

említettem -, hogy az új tartalom új didaktikát kíván. Ahogy a kísérleti fizika képzése is magában foglal előadást, számolási gyakorlatot és laboratóriumot, úgy a számítógépes fizika is új módszertannal jelenik meg az eddigi elméleti fizika előadások, illetve számolási gyakorlatok mellett. A tantervi korlátok miatt jelenleg két lehetőséggel élünk. Az egyik, hogy a számolási gyakorlatokon illusztrációs lehetőségként használjuk a feladatok gépi feldolgozását, az elérési út megadásával, illetve írásos példatári melléklettel segítve a vállalkozó kedvű hallgatók munkáját. A másik a speciálkollégiumi forma, amelynek kicsiszolásához jó lehetőséget jelent számunkra a programtervező matematikusok számára négy féléven keresztül 2+2 órában, számítógépes folyamatmodellezés témában megvalósuló szakirányú képzés.



2.ábra

A Merkúr egy földi éves pályájának stroboszkópikus képe a Földről nézve

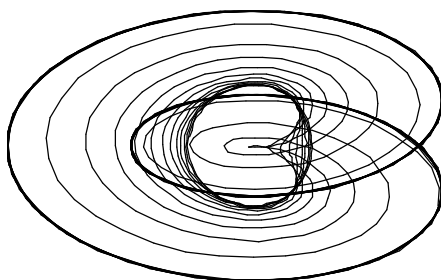
Ez utóbbiba nemcsak az alapfizika oktatásához illesztett gyakorlatok tapasztalatait építettük be, hanem a számítógépes fizika oktatásának harmadik szintjéhez tartozókat is. Ide sorolható az a szak-képzés, amely elsősorban speciálkollégiumok révén a számítógépes kísérletek (szimulációk) tudományos módszertanával ismerteti meg az ez iránt érdeklődő hallgatókat. E témakörben eddig egy speciálkollégium indult, melyet diplomamunkások, doktoranduszok hallgattak. Itt említeném meg a szakosított tanártovábbképzésünk tervét is, melyben a statisztikus fizika szakirány egy sor területe számítógépes modellezéssel kerül bemutatásra.

3. Folyamatmodellezés

Bár a fizika is foglalkozik sztatikai, egyensúlyi jelenségekkel, központi témája mégis az időbeli változás, a mozgás, a folyamat. Galilei első valódi és gondolatkísérletei is az egyenletesen változó mozgás kinematikájának megértését szolgálták (1.ábra). Ettől kezdve, fejlődésének sok évszázados története alatt, a fizika a matematika eszköztárával leírt folyamatok egész kincstárát halmozta fel. Ez magában foglal többek között közönséges és parciális differenciálegyenletekkel leírható determinisztikus mozgásokat, melyek eredményezhetnek stabil (reguláris) vagy kaotikus folyamatokat. De találunk itt sztochasztikus differenciálegyenlettel leírható véletlen folyamatokat éppúgy, mint minőségi átalakulást eredményező fázisátmeneteket, melyek problémaköre már átvész a nem térkitöltő struktúrákat, népszerű nevén fraktálokat létrehozó folyamatok világába. A folyamatmodellezés oktatásának alapproblémája így az volt, hogyan válogassunk e folyamatok között úgy, hogy azok egyrészt tükrözzék ezt a gazdagságot, másrészt olyan egyszerűek legyenek, hogy a hallgatók előtt a modell mozgásba jöjjön.

Az első félév anyag reguláris determinisztikus folyamatokat foglal magában. Itt elsősorban a gravitációs térben, szemünk előtt lezajló mozgások számítógépes modellezésével foglalkozunk. Ez egy olyan mozi élményét nyújtja a hallgatóknak, melyekben a matematikai képletek holt függvényei jönnek mozgásba. Szemükkel érzékelhetik, hogy a nézőpont megváltoztatása (Naphoz vagy Földhöz rögzített

koordináta-rendszerből nézzük az égitestet) a folyamat egész más látványát eredményezi (2. ábra); vagy, hogy az űrhajó Föld körüli esése ugyanaz a folyamat, mint a fáról leeső almáé. Megmutatható, hogy ugyanaz a folyamat hogyan modellezhető egyre mélyebb, lényegibb összefüggései alapján. Először leírhatjuk kinematikailag, ahogy a szemünk előtt van, azaz egyszerűen az időt, mint paramétert tartalmazó függvények stroboszkópikus (egymásravezített) vagy animálható, filmszerű ábrázolásaként. Mélyebben értjük, s általánosabb alapról modellezzük a folyamatot, ha a mozgást valamely fizikai mennyiség mérlegegyenletét jelentő mozgásegyenlethez eredeztetjük. S még mélyebben, ha magát a mozgásegyenletet is származtatjuk. Fontos információt szerezhetünk a folyamat változásairól, például a stabil mozgás beállításáról, ha olyan komponenseit is ábrázoljuk, amit nem a szemünkkel érzékelünk. Például az impulzust is a gerjesztett lineáris rezgésnél.



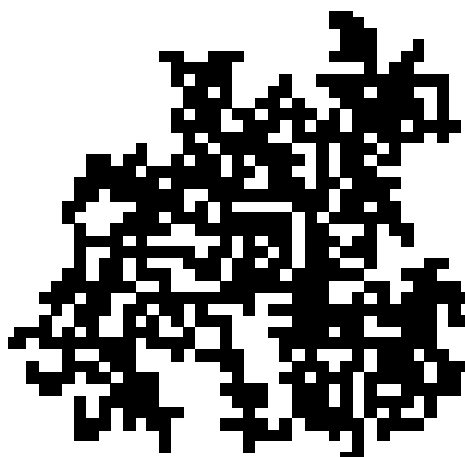
3. ábra

Egydimenziós kényszerrezgés stabil mozgásának kialakulása a fázistérben. A mozgás periódusról periódusra formálódik a külső nem stabil mozgástól a belső kör stabil mozgásáig.

Az előbbi kényszerrezgés, bár még reguláris folyamat, de már kiindulópontul szolgálhat a determinisztikus káosz megértéséhez. A hullámmozgás parciális differenciálegyenletének Fourier soros megoldása és megjelenítése a húr rezgésének animációjában jó példa egyes folyamatok új oldalára, részfolyamatokból való összetettségére, az interferenciára. Ilyenkor a húr rezgésének modellezésénél sajnálja az előadó, hogy hangkártya hiányában matematikai filmje még néma, nem hangos.

A második félév anyaga különféle rácson modellezhető folyamatokat foglal magában. Algoritmizált folyamatoknak is nevezhetnénk, hiszen itt az átmenetet egyik rácsállapottól a másikba néhány szabály szabja meg, mely függhet véletlen számtól: sztochasztikus folyamatok, vagy lehet szigorúan determinált: sejtautomata. Az előbbieken tárgyaljuk a bolyongást, mely a fizikában Brown-mozgás-ként híresült el, de modelleznek vele biológiai és pénzügyi mozgásokat is; bemutatunk növekedési és terjedési jelenségeket; valamint a mágnesezettség Ising modelljét, mely a fázisátalakulások megértésében játszik alapvető szerepet. E folyamatmodellek érdekessége azon túl, hogy esetenként messze túlnyúlnak a fizikán, az, hogy általuk a hallgató a nem szokványos mértékfogalommal tárgyalható folyamatok (fraktálok, multifraktálok) világába csöppen. A sejtautomaták között tárgyaljuk az életjátékot, az önszerveződő kritikusság példaként a hópihéket, de van itt erdőtűz és közlekedési modell is. Bár ezeket a modelleket fizikai folyamatok modelljeinek is tekintjük, a hallgatóságtól függően több-kevesebb hangsúly kerül a fizikán túlnyúló alkalmazási területekre is.

Az előbbieken olyan oktatási programokról volt szó, melyek mögött gyakorlati tapasztalat is húzódik, hiszen ezek legalább egyszer, bizonyos részek többször is előadásra kerültek. A továbbiakban csak vázolóan azokat a terveket, melyek alapján a folyamatmodellezés oktatását folytatni kívánjuk.



4. ábra

A járványterjedés egy inváziós perkolációs modellje.

A harmadik félévben a kaotikus folyamatokkal foglalkozunk kis és nagy szabadsági fokú rendszerekben. Az előbbi esetben különféle modelleken, például ütközésekben, annak megmutatása a cél, hogy determinisztikus folyamatot is feltételezve miként következik be a kaotizáció, míg a másodikban arra keresünk modellszerű választ, hogyan jelennek meg a nagy szabadsági fokú kaotikus mozgású molekuladinamikai rendszerekben determinisztikus mozgástörvények. S ezzel, például a diffúzió problémájánál, visszajutunk a parabolikus parciális differenciálegyenlettel leírható determinisztikus mozgás folyamatához.

Mielőtt rátérnék az oktatásban szerzett érdekesebb módszertani tapasztalatok ismertetésére, megemlítem, hogy a folyamatmodellezést szakirányként hallgatók számára a negyedik félévben a neuronhálózatok, illetve a gazdasági folyamatok modellezését tanítjuk. Az előbbieket tudományos kutatásába, statisztikus fizikai ismereteik alapján, rendszeresen bekapcsolódnak fizikusok. Az utóbbi oktatása részünkről tulajdonképpen kalandozás, melyet a vállalkozó szellemű kollégák csak azért nem tekintenek kalandorkodásnak, mert egyrészt a fizika révén a különféle folyamatok matematika nyelvén történő leírásában széleskörű tapasztalatra tettek szert, másrészt mert támaszkodnak az e témában hozzáférhető szakirodalomra.

4. Módszertani tapasztalatok

Befejezésként két oktatás közben szerzett élményt szeretnék közkinccsé tenni. Az első annak a már kutatásból ismert helyzetnek az oktatás módszertanára gyakorolt hatásával kapcsolatos, mely szerint a számítógépes fizika a kísérleti és elméleti fizika között helyezkedik el. Ha röviden akarjuk jellemezni, a kísérleti fizika oktatására alapvetően az induktív, míg az elméleti fizikáéra a deduktív jelleg jellemző. A folyamatok modellezésének oktatását állandó ingázás jelzi a két módszer között. Leginkább a fizika történetének logikájára emlékeztet, ahogy az az induktív (kísérletes) és deduktív (elméleti) felismerések egymást váltogató folyamatában haladt egyrészt ugyanazon folyamatok egyre mélyebb megértése felé, másrészt a valóság olyan újabb területei felé, melyek az állandóan fejlődő kísérletes eszközök, illetve matematikai nyelvezet révén elérhetővé váltak.

A másik élmény a számítógép folyamatos jelenlétének lehetősége az oktatásban. Az írott könyv a számítógép képernyőjén, megfelelő programmal párosítva nem holt betű többé. Az interaktivitásnak, a tudás testhez igazított strukturált átadásának olyan lehetőségei kezdenek kirajzolódni, melyek gyökeresen átalakíthatják a tankönyvírást, s ezzel az oktatást is. Interaktivitás alatt itt azt értem, hogy az elektronikus könyv a matematika nyelvén írt műveleteket az olvasó által megszabott feltételeknek megfelelően végrehajtja, az eredményeket a kívánt módon bemutatja. Ezen túlmenően a megismerés kalandélményé válik, ha az olvasó az

által megkívánt irányokban mélyítheti el tudását a rendszerbe szedett fogalmak hálózata segítségével, ahhoz hasonlóan, ahogy a különféle információkat gyűjti az Internet-hálózaton kalandozva.

Meg kell említenem, ilyen tankönyvíró program még nem áll rendelkezésemre. Megrendeltük ugyan a Mathematica for Microsoft Word-öt, de hónapok óta csak ígérik a szállítását. E program már biztosítaná az interaktivitás lehetőségét, párosítva a szokásos matematikai formalizmussal írt tankönyvalakkal, ami jelentős előrelépés a Mathematica saját szövegszerkesztője által viszonylag szűkreszabott lehetőségekhez képest. Hogy ez mikor bővül olyan programmal, mely lehetővé teszi a fogalmak közötti barangolást, még nem látni, de a fejlődés ütemét nézve ez nem lehet nagyon távol.