

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΙΓΑΙΟΥ  
ΠΑΙΔΑΓΩΓΙΚΟ ΤΜΗΜΑ ΔΗΜΟΤΙΚΗΣ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗΣ

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ  
«ΕΠΙΣΤΗΜΕΣ ΤΗΣ ΑΓΩΓΗΣ –ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΝΕΩΝ  
ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ»

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**«ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ ΜΟΝΤΕ CARLO ΚΑΙ ΤΩΝ  
ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΤΗΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΑΣ ΣΤΗΝ  
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ:  
ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΣΤΗ ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΥΣΙΚΗ»**

ΒΑΣΙΛΗΣ Ι. ΤΑΤΣΗΣ

ΡΟΔΟΣ, ΙΟΥΝΙΟΣ 2008

ΒΑΣΙΛΗΣ Ι. ΤΑΤΣΗΣ

Εφαρμογές της Μεθόδου Monte Carlo και των Τεχνολογιών της Πληροφορίας και Επικοινωνίας στην  
Εκπαίδευση: Προσομοιώσεις στη Μοριακή Φυσική.

---

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΙΓΑΙΟΥ  
ΠΑΙΔΑΓΩΓΙΚΟ ΤΜΗΜΑ ΔΗΜΟΤΙΚΗΣ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗΣ

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ  
«ΕΠΙΣΤΗΜΕΣ ΤΗΣ ΑΓΩΓΗΣ –ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΝΕΩΝ  
ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ»

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ  
ΒΑΣΙΛΗ Ι. ΤΑΤΣΗ  
Α.Μ: 413/2006/024

ΤΙΤΛΟΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

***ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ MONTE CARLO ΚΑΙ ΤΩΝ  
ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΤΗΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΑΣ ΣΤΗΝ  
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ:  
ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΣΤΗ ΜΟΡΙΑΚΗ ΦΥΣΙΚΗ***

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ  
ΨΥΧΑΡΗΣ ΣΑΡΑΝΤΟΣ , ΛΕΚΤΟΡΑΣ, ΠΑΝ/ΜΙΟ ΑΙΓΑΙΟΥ  
ΣΥΜΒΟΥΛΕΥΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ  
ΤΣΟΛΑΚΙΔΗΣ ΚΩΝ/ΝΟΣ, ΕΠΙΚ. ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ, ΠΑΝ/ΜΙΟ ΑΙΓΑΙΟΥ  
ΧΙΟΝΙΔΟΥ ΜΑΡΙΑ , ΕΠΙΚ. ΚΑΘΗΓΗΤΡΙΑ, ΠΑΝ/ΜΙΟ ΑΙΓΑΙΟΥ

ΡΟΔΟΣ , ΙΟΥΝΙΟΣ 2008

## ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Κατ' αρχήν ευχαριστώ τον κ. Ψυχάρη για την συνεργασία καθ' όλη τη διάρκεια του μεταπτυχιακού αλλά και για την εμπιστοσύνη του κατά την ανάθεση του θέματος της μεταπτυχιακής εργασίας, του οφείλω τη γνωριμία μου με την Υπολογιστική Φυσική και τις Στοχαστικές Προσομοιώσεις.

Ευχαριστώ τους διδάσκοντες και τους φοιτητές στο μεταπτυχιακό που δημιούργησαν γόνιμο περιβάλλον επιστημονικού προβληματισμού, ειδικότερα τους Θ. Παναγιωτόπουλο και Κ.

Διακομανώλη που τους ταλαιπώρησα.

Ευχαριστώ τους γονείς μου Γιάννη και Σοφία για τον τρόπο σκέψης και εργασίας που μου έδωσαν και τη Μ. Χατζημανωλάκη που πέρα από όλα τα αλλά που μου χάρισε, συνεχίζει να μου χαρίζει το χαμόγελό της.

Ευχαριστώ όλους όσους συντέλεσαν στην πραγματοποίηση της παρούσας εργασίας και δεν αναφέρονται εδώ.

## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

<b>I. ΕΙΣΑΓΩΓΗ</b>	<b>6</b>
<b>II. ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ</b>	<b>9</b>
A. ΓΕΝΙΚΑ	9
B. ΤΡΙΣΔΙΑΣΤΑΤΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ	13
C. ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΠΟΥ ΟΔΗΓΟΥΝΤΑΙ ΑΠΟ ΧΡΟΝΟ ΚΑΙ ΑΠΟ ΓΕΓΟΝΟΤΑ	15
1) EVENT BASED	16
2) TIME BASED	16
D. ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΣ	17
E. ΠΑΙΔΑΓΩΓΙΚΗ ΧΡΗΣΗ	19
<b>III. ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ</b>	<b>24</b>
A. ΓΕΝΙΚΑ	24
B. ΤΥΧΑΙΟΙ ΑΡΙΘΜΟΙ	26
1) ΑΝΑΓΩΓΙΚΕΣ ΓΕΝΝΗΤΡΙΕΣ ΨΕΥΔΟ-ΤΥΧΑΙΩΝ ΑΡΙΘΜΩΝ	26
2) ΚΑΤΑΝΟΜΕΣ	28
C. ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΙ	31
<b>IV. ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΥΝΑΜΙΚΗ</b>	<b>33</b>
A. ΦΥΣΙΚΗ	33
B. ΠΑΙΔΑΓΩΓΙΚΗ ΧΡΗΣΗ	34
C. ΚΙΝΗΣΕΙΣ ΜΟΡΙΩΝ	36
D. ΑΠΟΜΑΚΡΥΣΜΕΝΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ	38
E. ΑΕΡΙΑ	39
1) ΙΔΑΝΙΚΑ ΑΕΡΙΑ	39
2) ΚΑΤΑΝΟΜΗ Maxwell – Boltzmann	41
3) ΕΣΩΤΕΡΙΚΗ ΕΝΕΡΓΕΙΑ	43
4) ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ	45
5) ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΧΡΗΣΗ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΑΕΡΙΩΝ	45
F. ΥΓΡΑ	46
1) ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΧΡΗΣΗ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΥΓΡΩΝ	47
G. ΣΤΕΡΕΑ	47
1) ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΧΡΗΣΗ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΣΤΕΡΕΩΝ	48
<b>V. MONTE CARLO</b>	<b>49</b>
A. ΓΕΝΙΚΑ	49
B. ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ ΜΕ MONTE CARLO	51
C. ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ $\pi$	52
D. ΑΝΟΜΟΙΟΜΟΡΦΗ ΔΕΙΓΜΑΤΟΛΗΨΙΑ (IMPORTANCE SAMPLING)	53

<i>E.</i>	<i>ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ MARKOV (Markov Chain)</i>	54
<i>F.</i>	<i>ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ METROPOLIS</i>	55
<i>G.</i>	<i>ΜΟΝΤΕΛΟ ISING</i>	56
<b>VI.</b>	<b><i>MATLAB – SIMULINK</i></b>	<b>60</b>
<i>A.</i>	<i>MATLAB</i>	60
<i>B.</i>	<i>ΤΟ ΕΡΓΑΛΕΙΟ MATLAB ΣΤΟ ΣΧΟΛΕΙΟ</i>	62
<i>C.</i>	<i>SIMULINK</i>	65
<i>D.</i>	<i>SIMMECHANICS</i>	69
	<i>1) ΣΗΜΑΝΤΙΚΟΤΕΡΕΣ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΕΣ</i>	69
<b>VII.</b>	<b><i>ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ</i></b>	<b>72</b>
<i>A.</i>	<i>ΣΤΕΡΕΟ</i>	72
	<i>1) ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΙ - ΠΑΡΑΔΟΧΕΣ</i>	73
	<i>2) ΜΟΝΤΕΛΟ</i>	74
	<i>3) ΠΡΟΤΑΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ</i>	75
<i>B.</i>	<i>ΜΕΘΥΣΜΕΝΗ ΣΦΑΙΡΑ</i>	77
	<i>1) ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ</i>	77
	<i>2) ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΣ</i>	78
	<i>3) ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ</i>	80
<i>C.</i>	<i>ΜΠΙΛΙΑΡΔΟ</i>	81
	<i>1) ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ</i>	82
	<i>2) ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΣ</i>	83
	<i>3) ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ</i>	84
<i>D.</i>	<i>ΑΕΡΙΟ 1</i>	85
	<i>1) ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ</i>	85
	<i>2) ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΣ</i>	86
	<i>3) ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑ</i>	88
<i>E.</i>	<i>ΑΕΡΙΟ 2</i>	90
	<i>1) ΔΕΔΟΜΕΝΑ</i>	90
	<i>2) ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ</i>	90
	<i>3) ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ</i>	93
<i>F.</i>	<i>ΔΙΑΤΟΜΙΚΟ ΑΕΡΙΟ</i>	95
	<i>1) ΔΕΔΟΜΕΝΑ</i>	95
	<i>2) ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ</i>	96
	<i>3) ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ</i>	96
<b>VIII.</b>	<b><i>ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ</i></b>	<b>99</b>

## Ι. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Τα εργαλεία προσομοιώσεων είναι ιδανικά μέσα για να υποστηρίξουν την ερευνητική και ανακαλυπτική μάθηση (de Jong et al, 1999). Αρκετές προσομοιώσεις αναπτύχθηκαν υπό τη μορφή λογισμικού. Οι προσομοιώσεις που χρησιμοποιούν Τεχνολογίες Πληροφοριών και Επικοινωνιών κυριαρχούν σε ποσότητα έναντι οποιονδήποτε άλλων στην εκπαιδευτική διαδικασία.

Το ζητούμενο μιας προσομοίωσης σε Η/Υ εμφανίζεται υπό τη μορφή δεδομένων. Τα αποτελέσματα αυτά μπορεί να έχουν τη μορφή αριθμών, κειμένου, γραφικών σε δύο διαστάσεις ή σε τρεις και ήχου. Μιας και το οπτικό σύστημα παρατήρησης καταλαμβάνει στον άνθρωπο το μεγαλύτερο κομμάτι του εγκεφάλου του (Miller, 1992) τα τρισδιάστατα γραφικά αποτελούν τη βέλτιστη λύση παρουσίασης μιας εκπαιδευτικής προσομοίωσης. Οι τρισδιάστατες προσομοιώσεις δίνουν τη δυνατότητα για παρουσίαση των φυσικών συστημάτων σχεδόν όπως είναι, προωθώντας έτσι εμπειρίες που βοηθούν τους μαθητές να κατανοήσουν τα διδακτικά αντικείμενα (van Joolingen & de Jong, 1996).

Η μοριακή φυσική δίνει απαντήσεις για τα φυσικά φαινόμενα στηριζόμενη στην ανάλυση των κινήσεων των μορίων της ύλης. Στην εκπαιδευτική διαδικασία οι αντιλήψεις που άπτονται της μοριακής δομής της ύλης, δίνουν στο μαθητή τη δυνατότητα να προσεγγίζει τις ίδιες τις δομές των ουσιών αρχικά, αλλά και τις μεταβολές τους στη συνέχεια, κατά τη διάρκεια των φαινομένων. Η ανάπτυξη μοντέλων του μικρόκοσμου κατά τη διδασκαλία με χρήση Τεχνολογιών της Πληροφορίας και της Επικοινωνίας, δίνουν την δυνατότητα επίλυσης των παραδοσιακών προβλημάτων στη διδασκαλία εννοιών της Χημείας και της Φυσικής (Hyde et al, 1996). Η δυνατότητα για διαδραστικό χειρισμό της μοριακής δομής της ύλης με κατάλληλο διδακτικό υλικό συνεπικουρείται με τη χρήση τρισδιάστατων απεικονίσεων αυτής.

Η μοριακή δυναμική εξετάζει τις αλληλεπιδράσεις και τη συμπεριφορά των μορίων και ερμηνεύει τα μακροσκοπικά φυσικά φαινόμενα με μικροσκοπικό τρόπο, από την πιο απλή θεώρηση τους στην πρώτη δημοτικού μέχρι τη κβαντική θεωρία ερμηνείας των φαινομένων. Η γνώση παρέχεται ως ένα ενιαίο οικοδόμημα χωρίς ανατροπές και διορθώσεις δίνοντας έτσι πεδίο εφαρμογής της κονστρουκτιβιστικής θεωρίας στην εκπαίδευση. Ανάλογα με τη κατάσταση της ύλης που εξετάζεται διακρίνουμε διαφορετικά χαρακτηριστικά για τη δημιουργία μοντέλου μοριακής δυναμικής.

Στα αέρια, οι αποστάσεις μεταξύ των μορίων είναι μεγάλες σε σχέση με το μέγεθος των μορίων και οι δυνάμεις μεταξύ τους πολύ μικρές. Γι αυτό και δεν υπάρχει συγκεκριμένο σχήμα και όγκος για τα αέρια μιας και παίρνουν το σχήμα και τον όγκο του δοχείου που τα περιλαμβάνει. Προκειμένου να μελετηθεί η συμπεριφορά των αερίων, χρησιμοποιείται η υπόθεση του ιδανικού αερίου. Ένα στοχαστικό μοντέλο μοριακής δυναμικής ιδανικού αερίου μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη διδασκαλία της Πίεσης και της Ατμοσφαιρικής Πίεσης, της συμπιεστότητας των αερίων, του νόμου

του Μπερνούλι για αέρια και υγρά, της συστολής και διαστολής αερίων και θερμοδυναμικών αξιωματών.

Τα μόρια του υγρού παρουσιάζουν την ίδια συμπεριφορά με αυτά του αερίου με τη διαφορά όμως ότι εδώ τα μόρια βρίσκονται πολύ πιο κοντά το ένα με το άλλο και κινούνται με μικρότερες ταχύτητες. Ένα στοχαστικό μοντέλο μοριακής δυναμικής υγρού μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη διδασκαλία της Εξάτμισης, Διάλυσης, Διύλισης, Διήθησης, Άνωσης, Υδραυλικής και γενικότερα όλων των φαινομένων που σχετίζονται με υγρά.

Στα στερεά, τα μόρια βρίσκονται σε συγκεκριμένη θέση ή μάλλον περιοχή όπου ταλαντώνονται, ξεχωριστή για κάθε μόριο, σχηματίζοντας όλα μαζί ένα τρισδιάστατο πλέγμα. Ένα στοχαστικό μοντέλο μοριακής δυναμικής στερεού μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη διδασκαλία της Συστολής-Διαστολής, Μαγνητικών ιδιοτήτων των υλικών (μοντέλο Ising), Ηλεκτρικών ιδιοτήτων (μονωτές, αγωγοί, ημιαγωγοί) κ.α..

Οι προσεγγίσεις της μοριακής δομής της ύλης, γίνονται συνήθως με τη χρήση κατάλληλων στοχαστικών μοντέλων (Παπαγεωργίου, 2007), μιας και συγκεκριμένη, αναλυτική λύση δεν είναι εφικτή. Για παράδειγμα ένα δοχείο ενός λίτρου, περιέχει κατά προσέγγιση  $10^{22}$  μόρια. Με ένα τυπικό ρυθμό συγκρούσεων  $10^9$  ανά δευτερόλεπτο, έχουμε  $10^{31}$  αλλαγές καταστάσεων ανά δευτερόλεπτο (Αναγνωστόπουλος, 2006). Με αυτά τα δεδομένα θα πρέπει ο H/Y, που θα επεξεργαστεί μια τέτοια προσομοίωση ενός δευτερολέπτου, έχοντας ταχύτητα επεξεργαστή 10 GHz να εργαστεί για  $10^{21}$  sec, δηλαδή για  $31,7 \times 10^{12}$  χρόνια, περίπου 32 τρισεκατομμύρια χρόνια όταν η ηλικία του σύμπαντος, σύμφωνα με εκτιμήσεις, είναι 12,5 δισεκατομμύρια χρόνια.

Τα στοχαστικά μοντέλα εξελίσσονται τυχαία ως προς το χρόνο ή οποιαδήποτε άλλη παράμετρο, περιγράφουν τη διαδοχική εξέλιξη ως προς την όποια παράμετρο και εκφράζονται από μια συλλογή τυχαίων καταστάσεων, σε κοινό χώρο πιθανοτήτων (Γκανάτσιου & Τζώρτζιος, 2005). Σημαντικό ρόλο στη λειτουργία της στοχαστικής προσομοίωσης παίζει η παραγωγή τυχαίων καταστάσεων.

Η μέθοδος δημιουργίας στοχαστικών μοντέλων, Monte Carlo (M.C.) χρησιμοποιείται σε πλήθος περιπτώσεων όπου η αναλυτική λύση είναι δύσκολη ή αδύνατη. Δημιουργήθηκε με την εμφάνιση των υπολογιστών για την στοχαστική προσομοίωση φυσικών συστημάτων. Μια σημαντική βελτίωση της μεθόδου MC είναι η τεχνική της Ανομοιόμορφης δειγματοληψίας (Importance Sampling IS). Οι τυχαίες καταστάσεις δεν προκύπτουν από ομοιόμορφη κατανομή αλλά από μια κατανομή που ταιριάζει καλύτερα στις απαιτήσεις του μοντέλου. Γι αυτό σημαντικό ρόλο για τη δημιουργία μιας προσομοίωσης MC κατέχει η δημιουργία των τυχαίων αριθμών από συγκεκριμένη κατανομή. Γενικότερα χρησιμοποιείται για την επίλυση προβλημάτων σε φυσική, χημεία, βιολογία, πρόβλεψη οικονομικών συμπεριφορών, μακροχρόνια πρόβλεψη καιρικών φαινομένων και για την μελέτη κοινωνικών επιδράσεων. Η μέθοδος εφαρμόζεται για τον υπολογισμό σύνθετων ολοκληρωμάτων και γενικότερα εμβαδού με χαρακτηριστικότερο το παράδειγμα υπολογισμού του αριθμού  $\pi$  και σε

ΒΑΣΙΛΗΣ Ι. ΤΑΤΣΗΣ

Εφαρμογές της Μεθόδου Monte Carlo και των Τεχνολογιών της Πληροφορίας και Επικοινωνίας στην  
Εκπαίδευση: Προσομοιώσεις στη Μοριακή Φυσική.

---

στοχαστικές προσομοιώσεις, όπου πιο γνωστές εφαρμογές είναι η επίλυση του προβλήματος του μεθυσμένου ναύτη, του μοντέλου Ising, και προβλημάτων μοριακής δυναμικής. Μια σπουδαία υλοποίηση της μεθόδου είναι ο αλγόριθμος Metropolis που έχει αναγορευθεί ως ένας από τους δέκα σημαντικότερους αλγόριθμους του 20<sup>ου</sup> αιώνα από το περιοδικό Computing in Science and Engineering (Dongarra et al, 2000).

Τμήματα της παρούσας εργασίας έχουν δημοσιευτεί ως έχουν στις εργασίες (Psycharis & Tatsis, 2007), (Ψυχάρης & Τάτσης 2007α), (Ψυχάρης & Τάτσης 2007β), (Psycharis & Tatsis 2008), (Ψυχάρης & Τάτσης 2008).



## II. ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ

### A. ΓΕΝΙΚΑ

Η λέξη προσομοίωση προέρχεται από τη λέξη «προσόμοιος» που σημαίνει αυτός που είναι σχεδόν όμοιος, παρεμφερής. Από τον ορισμό της λέξης παρατηρούμε ότι η προσομοίωση είναι η σχεδόν, και όχι απόλυτα όμοια διεργασία σε σχέση με την προσομοιούμενη φυσική διεργασία. Ο αντίστοιχος αγγλικός όρος ορίζεται ως simulation με έννοια pretend like ή act like.

Οι προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκαν ανέκαθεν για διδακτικούς σκοπούς. Οποιοδήποτε πείραμα αποτελεί την σε εργαστηριακές συνθήκες προσομοίωση κάποιου φυσικού φαινομένου. Οι προσομοιώσεις εκτός από εκπαιδευτικούς σκοπούς χρησιμοποιούνται και ως εργαλεία έρευνας σε όλους σχεδόν τους επιστημονικούς τομείς. Υπάρχει σαφής διάκριση ανάμεσα στη προσομοίωση που χρησιμοποιείται στο σχολείο και σε αυτή που δημιουργείται για ερευνητικούς σκοπούς. Οι προσομοιώσεις που δημιουργούνται σε Η/Υ είναι πολύτιμες για ένα μεγάλο εύρος επιστημονικών τομέων όπως βιολογία, γενετική, γεωλογία, χημεία, φυσική, περιβάλλον, κοινωνικές επιστήμες, οικονομικά και μαθηματικά (Means et al, 1993).

Τα οπτικοποιημένα πειράματα συμπληρώνουν τα πραγματικά πειράματα δίνοντας στους μαθητές τη δυνατότητα να δουν με μεγαλύτερη προσέγγιση αυτό που υπαγορεύει η θεωρία δημιουργώντας έτσι ιδανικές συνθήκες μάθησης (Rezaï & Katz, 2002, Δημόπουλος κ.ά., 2007). Επίσης η χρήση των αναπαραστάσεων καθίσταται συμπληρωματική του γραπτού και του προφορικού λόγου και φαίνεται απαραίτητη κατά την κοινωνική αλληλεπίδραση (Ainsworth, 1999). Οι οπτικοποιήσεις αυτές μπορεί να έχουν τις εξής μορφές:

- Μόνο εικόνα
- Εικόνα και κείμενο
- Εικόνα και αφήγηση
- Εικόνα, κείμενο και αφήγηση
- Γραφικά με ή χωρίς ήχο σε Η/Υ, χωρίς δυνατότητα επίδρασης του μαθητή
- Γραφικά με ή χωρίς ήχο σε Η/Υ, με περιορισμένες δυνατότητες διάδρασης με το χρήστη.
- Γραφικά με ή χωρίς ήχο σε Η/Υ, με αυξημένες δυνατότητες διάδρασης με το χρήστη.
- Περιβάλλον Η/Υ με ή χωρίς ήχο με τρισδιάστατα γραφικά
- Περιβάλλον Η/Υ εικονικής πραγματικότητας

Οι προσομοιώσεις που χρησιμοποιούνται για εκπαιδευτικούς σκοπούς μπορεί να διακριθούν σε (van Joolingen & de Jong, 1996):

- Φυσικών συστημάτων. Όπου ένα φυσικό σύστημα ή διεργασία του πραγματικού κόσμου προσομοιώνεται στον Η/Υ.

- Διαδικασίας. Όπου ο μαθητής καλείται να αναπτύξει ικανότητες χειρισμού καταστάσεων ή συσκευής.
- Καταστάσεων. Ο μαθητής τοποθετείται σε μια υποτιθεμένη κατάσταση και αναλαμβάνει να διεκπεραιώσει ένα ρόλο.
- Εξέλιξης Διαδικασιών. Με τον μαθητή να παρατηρεί και να προχωρεί σε συμπεράσματα για την εξέλιξη της προσομοίωσης.

Άλλα δύο χαρακτηριστικά των προσομοιώσεων (de Jong et al, 1999) που έχουν σχέση με τον τρόπο δημιουργίας και εκτέλεσης του μοντέλου είναι:

- Η πολυπλοκότητά τους, που αφορά τον τρόπο με τον οποίο έγινε η δημιουργία του μοντέλου αλλά και τις δεξιότητες που απαιτούνται από τον χρήστη κατά την εκτέλεσή του. Σύνθετες διεργασίες προσομοιώνονται με πολύπλοκα μοντέλα. Ανάλογα με το επίπεδο των μαθητών που απευθύνεται μια προσομοίωση παρουσιάζει αντίστοιχη πολυπλοκότητα. Επίσης για την ίδια φυσική διεργασία αναπτύσσονται διαφορετικά μοντέλα ανάλογα με το επίπεδο των μαθητών που απευθύνονται, μιας και για την ίδια φυσική διεργασία διαφορετικοί και πιο σύνθετοι είναι οι μαθησιακοί στόχοι όταν αυτό διδάσκεται στο Γυμνάσιο απ' ότι όταν διδάσκεται στο Δημοτικό. Γενικά οι προσομοιώσεις για ερευνητικούς σκοπούς είναι αρκετά πιο πολύπλοκες μιας και πρέπει να λάβουν υπόψιν τους το δυνατόν όλες τις παραμέτρους και να υπάρχει η δυνατότητα κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης να αλλάζουν οι τιμές των παραμέτρων αυτών.
- Η δυσκολία κατά τη χρήση. Το χαρακτηριστικό αυτό αναφέρεται στις προγενέστερες γνώσεις που απαιτούνται πάνω στο διδακτικό αντικείμενο από τους μαθητές – χρήστες της προσομοίωσης. Επίσης ως δυσκολία χρήσης ορίζονται και οι δεξιότητες χρήσης Η/Υ που απαιτούνται από τους μαθητές κατά την εκτέλεση της προσομοίωσης.

Η προσομοίωση που εξυπηρετεί εκπαιδευτικούς σκοπούς είναι συνήθως αρκετά απλή στην εκτέλεσή της, ώστε να μπορεί να εφαρμοστεί στα περισσότερα σχολικά εργαστήρια και αν είναι δυνατόν στη σχολική αίθουσα. Προκύπτει πολλές φορές από μια απλοποιημένη μορφή μιας προσομοίωσης για ερευνητικούς σκοπούς. Η εφαρμογή της σχολικής προσομοίωσης παρότι αποσκοπεί στην απόδειξη των φυσικών νόμων δεν έχει όμως την ακρίβεια και την αξιοπιστία των δεδομένων μιας ερευνητικής προσομοίωσης. Κυρίως όμως μια προσομοίωση για εκπαιδευτικούς σκοπούς πρέπει να παρέχει τις απαραίτητες συνθήκες όπως:

- Διαδραστικότητα με το μαθητή προκειμένου η μάθηση να επιτυγχάνεται με τρόπο ανακαλυπτικό.
- Δυνατότητα επικοινωνίας των μαθητών μεταξύ τους αλλά και με τη προσομοίωση ώστε να εξασφαλίζονται συνθήκες κοινωνικού κουνστρουκτιβισμού.

- **Μεταγνωστικότητα.** Οι προσομοιώσεις θα πρέπει να δημιουργούν τις κατάλληλες προϋποθέσεις για την ανάπτυξη της μεταγνωστικής ικανότητας των μαθητών.
- **Αξιοπιστία.** Η μετάδοση των γνώσεων ενισχύεται όταν οι συνθήκες εκπαίδευσης ελαχιστοποιούν τη διαφορά ανάμεσα σε εκπαίδευση και πραγματικές συνθήκες (Alessi, 1988, 1995).
- **Γραφικά αποτελέσματα.** Σε μια ερευνητική προσομοίωση μοιάζει να είναι αρκετή η παρουσίαση των αποτελεσμάτων υπό τη μορφή οποιουδήποτε τύπου δεδομένων, στην εκπαίδευση όμως χρειάζεται όσο το δυνατόν, γραφικά καλύτερη παρουσίαση των αποτελεσμάτων αυτής.
- **Ενδιαφέρουσα και ενταγμένη στο κοινωνικό και μαθησιακό περιβάλλον του σχολείου.** Μια μη ενδιαφέρουσα για τους μαθητές προσομοίωση ενέχει τον κίνδυνο όχι μόνο να μην επιφέρει τα επιθυμητά μαθησιακά αποτελέσματα αλλά και να δημιουργήσει αρνητική επίδραση στην δημιουργούμενη από προσομοιώσεις μεταγνωστική ικανότητα των μαθητών.
- **Δεν θα πρέπει να δημιουργεί σύγχυση στους μαθητές ανάμεσα στην πραγματικότητα και την προσομοίωση.** Ίσως μια πολύ καλή προσομοίωση να δώσει την εντύπωση ότι και στον πραγματικό κόσμο είναι όλες οι διεργασίες και συνέπειες αντιστρεπτές.

Με την ανάπτυξη των Τεχνολογιών της Πληροφορίας και της Επικοινωνίας (ΤΠΕ) και της ένταξής τους στην εκπαιδευτική διαδικασία, εκτός από τις άλλες χρήσεις που αναπτύχθηκαν, χρησιμοποιήθηκαν κύρια ως μέσω προσομοιώσεων. Έτσι αρκετές προσομοιώσεις αναπτύχθηκαν υπό τη μορφή λογισμικού και πλέον οι προσομοιώσεις με Η/Υ κυριαρχούν σε ποσότητα έναντι των οποιονδήποτε άλλων στην εκπαιδευτική διαδικασία. Η χρήση των Η/Υ για αυτό το λόγο αποδείχθηκε μια αρκετά πιο εύκολη, εύχρηστη και γρήγορη εφαρμογή, όπου μπορούν να ενταχθούν οι απαιτήσεις των σύγχρονων παιδαγωγικών θεωριών. Βέβαια αυτό άργησε σχετικά να ενταχθεί στις προσομοιώσεις λόγω της σχετικής, αρχικά, άγνοιας των εκπαιδευτικών φορέων στη χρησιμοποίηση των ΤΠΕ. Έτσι οι πρώτες προσομοιώσεις δημιουργήθηκαν αποκλειστικά από προγραμματιστές που δεν γνώριζαν ούτε τη σχολική πραγματικότητα αλλά ούτε και τις παιδαγωγικές θεωρίες.

Ως προσομοιώσεις φυσικών συστημάτων στον Η/Υ μπορούμε να θεωρήσουμε τις εφαρμογές που έχουν δημιουργηθεί με γλώσσα προγραμματισμού και αντιστοιχούν στην αναπαράσταση και τη μοντελοποίηση ενός πραγματικού συστήματος. Οι προσομοιώσεις ενσωματώνουν ένα μαθηματικό μοντέλο και γι' αυτό αναφέρονται και ως μοντέλο προσομοίωσης δηλαδή, ένα σύνολο υποθέσεων/ενεργειών/κανόνων για τη λειτουργία ενός συστήματος, την εξήγηση ενός φαινομένου ή την επίλυση ενός προβλήματος, εκφρασμένων υπό μορφή μαθηματικών ή λογικών σχέσεων μεταξύ των αντικειμένων του συστήματος κωδικοποιημένων σε κάποιο λογισμικό ή σε γλώσσα

προγραμματισμού. Ανάλογα με το είδος της μοντελοποίησης διακρίνονται τρία είδη προσομοιώσεων (Kristensen & Pedersen, 2003):

- Συγκεκριμένη αναλυτική μοντελοποίηση, που βασίζεται στις μαθηματικές εξισώσεις που περιγράφουν τα φυσικά συστήματα. Αποτελούν συνδυασμό των μαθηματικών εξισώσεων κάθε επιμέρους φυσικού συστήματος ανάλογα με το πώς επηρεάζει η κάθε μία εξίσωση το τελικό αποτέλεσμα. Για μεγάλα συστήματα όπου οι παράμετροι είναι πολλοί επιλέγονται κάθε φορά οι σημαντικότεροι παράμετροι ή συνδυασμός αυτών και αποτελούν στο τέλος και τις παραμέτρους προσομοίωσης.
- Πιθανοκεντρικά μοντέλα, όπου η δομή των συστημάτων προκύπτει από στατιστική ανάλυση δεδομένων πραγματικών συστημάτων. Χρησιμοποιείται συνήθως για πολύ μεγάλα συστήματα όπου η μαθηματική ανάλυση είναι πολύ δύσκολη έως και αδύνατη. Έτσι γίνεται δειγματοληψία των δεδομένων (έξοδος) που μας δίνει το φυσικό σύστημα σε συνδυασμό με τα δεδομένα που εισάγονται στο σύστημα. Ακολουθεί στατιστική ανάλυση των δεδομένων απ' όπου προκύπτει μια τελική μαθηματική σχέση ως το μοντέλο του συστήματος.
- Στοχαστικά μοντέλα, όπου η προσομοίωση βασίζεται στη δημιουργία πολλών τυχαίων (random) καταστάσεων, όπου η ανάλυσή τους οδηγεί στο τελικό αποτέλεσμα. Εφαρμόζεται σε συστήματα που τη λειτουργία τους δεν μπορεί να τη περιγράψει μαθηματικά αλλά και ούτε να δημιουργηθεί στατιστικό μοντέλο. Το μοντέλο εδώ είναι νοητικό – στοχαστικό και προκύπτει με βάση μια υπόθεση εργασία για τη λειτουργία του συστήματος.

Ως παράδειγμα προσομοίωσης που ενδεχομένως να μοντελοποιηθεί και με τα τρία είδη θα αναφέρουμε το οικονομικό μοντέλο ενός χρηματιστηρίου. Είναι γνωστό ότι δεν μπορεί με μαθηματική ανάλυση να γίνει πρόβλεψη των τιμών του χρηματιστηρίου, έτσι απορρίπτεται το πρώτο είδος μοντελοποίησης. Αρκετές μέθοδοι μοντελοποίησης όμως με βάση τη στατιστική ανάλυση έχουν αναπτυχθεί με αμφιλεγόμενα, κυρίως βραχυπρόθεσμα αποτελέσματα. Λόγω της χαοτικής συμπεριφοράς του χρηματιστηρίου η γενικότερη πορεία του να μπορεί να παρασταθεί με αποτελέσματα εφαρμογής τυχαίων καταστάσεων σε μια ήδη υπάρχουσα. Ο βαθμός της τυχαιότητας, ο αριθμός των παραμέτρων που θα δοθούν τυχαίες τιμές αλλά και το σύστημα που θα εφαρμοστούν αυτά, είναι αντικείμενο που θα επιλεγεί στοχαστικά από τον δημιουργό του μοντέλου. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης είναι αυτά που δικαιώνουν ή όχι το δημιουργό του στοχαστικού μοντέλου. Κυριότερη μέθοδος στοχαστικής προσομοίωσης είναι η μέθοδος Monte Carlo.

Τα παραπάνω είδη μοντελοποιήσεων μπορεί να χρησιμοποιηθούν εξ ίσου για εκπαιδευτικούς σκοπούς ανάλογα με το προσομοιούμενο αντικείμενο. Βέβαια λόγω της συγκεκριμένης μαθηματικής περιγραφής, χρησιμοποιείται περισσότερο από τα άλλα δύο είδη η αναλυτική μοντελοποίηση. Έτσι

έχουμε ελάχιστα μοντέλα για εκπαιδευτικούς σκοπούς που να προσομοιώνουν φαινόμενα που δεν μπορούν να παρασταθούν με μαθηματική ανάλυση. Ως αποτέλεσμα αυτού για φαινόμενα και διεργασίες που δεν έχουν μοντελοποιηθεί μαθηματικά να μην υπάρχουν αρκετές αξιόπιστες προσομοιώσεις.

## Β. ΤΡΙΣΔΙΑΣΤΑΤΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ

Το ζητούμενο μιας προσομοίωσης σε Η/Υ εμφανίζεται υπό τη μορφή δεδομένων. Τα αποτελέσματα αυτά μπορεί να έχουν τη μορφή αριθμών, κειμένου, γραφικών σε δύο διαστάσεις ή σε τρεις. Η εισαγωγή γραφικών στις προσομοιώσεις για εκπαιδευτικούς σκοπούς βρίσκει πολλούς εκπαιδευτικούς ως υποστηρικτές. Πολλοί είναι αυτοί που υποστηρίζουν τη χρήση γραφικών όλων των ειδών, συμπεριλαμβανομένων των τρισδιάστατων και βασίζουν την άποψή τους αυτή θεωρώντας ότι είναι χρήσιμα στην κατανόηση των διδακτικών αντικειμένων και την εσωτερίκευση της γνώσης. (Sceife & Rogers, 1996, Tversky, 2001, Δενδρινός & Καλκάνης, 2007).

Τις περισσότερες φορές στη διδακτική πρακτική ζητάμε τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων να είναι μια γραφική απεικόνιση του προσομοιωμένου συστήματος, αυτό επιβάλλεται όχι μόνο από τη διδακτική πρακτική, τη γνωστική ψυχολογία αλλά και από παιδαγωγικές θεωρίες όπως η ανακαλυπτική μάθηση. Οι τρισδιάστατες προσομοιώσεις δίνουν τη δυνατότητα για παρουσίαση των φυσικών συστημάτων σχεδόν όπως είναι, προωθώντας έτσι εμπειρίες που βοηθούν τους μαθητές να κατανοήσουν τα διδακτικά αντικείμενα (van Joolingen & de Jong 1996). Με αυτό τον τρόπο η εκπαιδευτική διαδικασία γίνεται μια ζωντανή διαδικασία όταν λόγοι απόστασης, χρημάτων, χρόνου, μεγέθους ή ασφάλειας των μαθητών καθιστούν το ενδεχόμενο για εκπαίδευση υπο πραγματικές συνθήκες πολλές φορές αδύνατο.

Βασικές αρχές της μάθησης με πολυμέσα (Moreno & Mayer, 1999a, 1999b, 2000, Δενδρινός & Καλκάνης, 2007):

- Αρχή των πολυμέσων. Η μάθηση ευνοείται σε ένα εκπαιδευτικό περιβάλλον με σημαντικά γραφικά και με λεκτική ενίσχυση των εικόνων από τον εκπαιδευτικό.
- Αρχή της απόστασης. Τυχόν επεξηγηματικό κείμενο θα πρέπει να βρίσκεται όσο το δυνατόν εγγύτερα στα γραφικά αφού αποδείχθηκε ότι αυτό έχει καλύτερα διδακτικά αποτελέσματα.
- Αρχή του ταυτοχρονισμού. Τυχόν λεκτική περιγραφή της προσομοίωσης θα πρέπει να γίνεται ταυτόχρονα με την εξέλιξη των διαφόρων γεγονότων της προσομοίωσης και όχι με χρονική καθυστέρηση.
- Αρχή της συνάφειας. Κατά τη διάρκεια μιας οπτικοποιημένης προσομοίωσης καλό θα ήταν να αποφεύγονται λέξεις, εικόνες και ήχοι άσχετα με το αντικείμενο της προσομοίωσης αφού με αυτό τον τρόπο έχουμε καλύτερα αποτελέσματα από όταν περιλαμβάνονται.

- Αρχή του τρόπου επικοινωνίας. Επιτυγχάνονται καλύτερα αποτελέσματα από μια προσομοίωση που περιλαμβάνει γραφικά, όταν αυτή συνοδεύεται από αφήγηση, σε σχέση με τις περιπτώσεις που η προσομοίωση συνοδεύεται από κείμενο ή από κείμενο και αφήγηση.
- Αρχή της οικειότητας. Επίσης καλύτερα αποτελέσματα από μια οπτικοποιημένη προσομοίωση έχουμε όταν ο επεξηγηματικός λόγος αλλά και γενικότερα το ύφος της προσομοίωσης είναι απλό και ενταγμένο πλησιέστερα στο κοινωνικό επίπεδο των μαθητών.

Οι προσομοιώσεις που παρουσιάζουν τα αποτελέσματά τους με γραφικό τρόπο σε δύο ή τρεις διαστάσεις απαιτούν:

- Αρκετά πιο πολύπλοκους υπολογισμούς, για τη εξαγωγή των αποτελεσμάτων. Ο κώδικας που θα αναπτυχθεί από τον προγραμματιστή θα είναι πολλαπλάσιος σε μέγεθος από τον αντίστοιχο που παρουσιάζει τα αποτελέσματα ως κείμενο. Επίσης το μαθηματικό μοντέλο που θα δημιουργηθεί θα πρέπει να λάβει υπόψην και την τρίτη διάσταση στους υπολογισμούς.
- Αυξημένες δυνατότητες γραφικών απεικονίσεων από το λογισμικό, μιας και αν θέλουμε να έχουμε ποιοτικό περιβάλλον προβολής των αποτελεσμάτων θα πρέπει να εκμεταλλευτούμε τα ήδη υπάρχοντα λογισμικά και τις δυνατότητες γραφικών απεικονίσεων που προσφέρουν.
- Υπολογιστική ικανότητα από τον Η/Υ, μιας και όλες οι παραπάνω συνθήκες δημιουργούν μια κατάσταση αυξημένων απαιτήσεων από το υλικό επεξεργασίας των δεδομένων του Η/Υ.

Οι παράγοντες αυτοί είναι οι σημαντικότεροι που αποτρέπουν τη δημιουργία προσομοιώσεων σε τρεις διαστάσεις, παρότι προσθέτουν μια επιπλέον αξία στη παιδαγωγική χρήση των προσομοιώσεων.

Από τη άλλη, το οπτικό σύστημα παρατήρησης καταλαμβάνει στον άνθρωπο το μεγαλύτερο κομμάτι του εγκεφάλου του (Miller, 1992). Το γεγονός αυτό δεν μπορεί να αγνοηθεί από τους εκπαιδευτικούς και αποτελεί ουσιαστικά μια ώθηση για αυτούς να χρησιμοποιήσουν οπτικά τεχνολογικά ερεθίσματα κατά τη διδασκαλία σύνθετων αντικειμένων προκειμένου να πετύχουν καλύτερα αποτελέσματα κατά τη διδασκαλία (Mzoughi et al, 2007, Chittaro & Ranon, 2007). Έτσι η χρήση των Η/Υ δημιούργησε έναν μεγάλο αριθμό υποστηρικτών των οπτικοποιήσεων στην εκπαίδευση, αφού διευκόλυνε το σχεδιασμό οπτικοποιήσεων δημιουργώντας ένα μεγάλο εύρος εφαρμογών (Tversky & Morrison, 2002). Με αυτά τα δεδομένα υπάρχει η ανάγκη για όλο και περισσότερη ανάπτυξη των τρισδιάστατων οπτικοποιημένων προσομοιώσεων και ανάπτυξη τεχνολογικών μέσων και τεχνικών, ώστε να αντιμετωπισθούν οι παραπάνω δυσκολίες.

Οι τρισδιάστατες προσομοιώσεις είναι ένα πολύτιμο εργαλείο για την εκπαίδευση που γνωρίζει συνεχή ανάπτυξη (Miller, 1992), γενικά για διδακτικούς σκοπούς προσφέρουν τα παρακάτω πλεονεκτήματα:

- Αυξημένη δυνατότητα διάδρασης μαθητή – μοντέλου. Ο μαθητής αντιλαμβάνεται με τρόπο άμεσο την επίδραση που ασκεί σε ένα τρισδιάστατο αντικείμενο φτιαγμένο όπως αυτά που βλέπει στην καθημερινότητά του, παρά την παρουσίαση μερικών αριθμών ως αποτελέσματα ή ως δεδομένα που του ζητείται να εισάγει.
- Πιο ρεαλιστική διδασκαλία σε σχέση με άλλες προσομοιώσεις στον Η/Υ. Έχουμε έτσι άμεση σύνδεση στο μυαλό του μαθητή, της προσομοίωσης και του πραγματικού κόσμου. Η προσομοίωση δεν είναι απλώς ένα ακόμη μάθημα είναι μια εμπειρία πραγματικού κόσμου. Βέβαια το γεγονός αυτό ενέχει κάποιους κινδύνους σύγχυσης στο μυαλό του μαθητή, της πραγματικότητας και του κόσμου της προσομοίωσης (Βρατσάλης, 2002)
- Ευχάριστη διδασκαλία που πλησιάζει το περιβάλλον των παιχνιδιών σε Η/Υ. Οι προσομοιώσεις με τρισδιάστατα γραφικά ξεφεύγουν από το φορμαλισμό της παραδοσιακής διδασκαλίας και πλησιάζουν τα περιβάλλοντα διασκέδασης των μαθητών με ηλεκτρονικά παιχνίδια, έτσι οι μαθητές προσέρχονται στο μάθημα με ευχάριστη διάθεση.
- Βοηθούν την αντιληπτική ικανότητα των μαθητών κατά τη διάρκεια της διδασκαλίας φυσικών επιστημών αφού παρουσιάζουν τις φυσικές διεργασίες όπως είναι στη φύση. Πολλές φυσικές διεργασίες είναι δύσκολα αντιληπτές από τους μαθητές, ακόμα και με χρήση προσομοιώσεων, οι τρισδιάστατες προσομοιώσεις καταφέρνουν να μεταφέρουν με κατανοητό τρόπο, αν όχι όλες, πολλές από τις πλέον δύσκολα κατανοητές φυσικές διεργασίες.

### γ. ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΠΟΥ ΟΔΗΓΟΥΝΤΑΙ ΑΠΟ ΧΡΟΝΟ ΚΑΙ ΑΠΟ ΓΕΓΟΝΟΤΑ

Ανάλογα με τον τρόπο που εξελίσσονται τα γεγονότα σε ένα μοντέλο διακρίνουμε: α) Μοντέλα που οδηγούνται από τα γεγονότα της προσομοίωσης (event based) και β) Μοντέλα που οδηγούνται από την εξέλιξη του χρόνου προσομοίωσης (time based). Η διαφορά των δύο μοντέλων έγκειται στο ότι στη πρώτη περίπτωση ο χρόνος εξαρτάται από την πρόοδο των γεγονότων, ενώ στη δεύτερη τα γεγονότα προκαλούνται από την εξέλιξη του χρόνου.

Η προσομοίωση που βασίζεται σε γεγονότα χρησιμοποιεί τα προηγούμενα γεγονότα ως δεδομένα για τον υπολογισμό της επόμενης κατάστασης. Σημαντικό ρόλο παίζει εδώ ένα αρχικό γεγονός που δίνεται με την έναρξη της εκτέλεσης του προγράμματος ως αρχικές συνθήκες ή με εισαγωγή

δεδομένων από τον χρήστη. Αντίθετα στην εξέλιξη μιας προσομοίωσης που βασίζεται στο χρόνο όλες οι «επόμενες καταστάσεις» υπολογίζονται με βάση το χρόνο εξέλιξης της προσομοίωσης.

Στη πραγματικότητα το ζήτημα είναι περισσότερο φιλολογικό μιας και μπορεί κάποιος να υποστηρίξει με επιχειρήματα ότι ο χρόνος προκαλεί τα γεγονότα, ενώ εξίσου σημαντικά επιχειρήματα θα είχε και κάποιος που θα υποστήριζε ότι στον πραγματικό κόσμο έχουμε ουσιαστικά μια αλυσίδα γεγονότων, που χρησιμοποιούμε το χρόνο για προσδιορίσουμε τη σειρά με την οποία συνέβησαν (ποια να ήταν η άποψη του Αϊνστάιν επ αυτού;). Όσον αφορά όμως τις προσομοιώσεις φυσικών συστημάτων είναι γεγονός ότι μας ενδιαφέρει τις περισσότερες φορές η επίδραση των προηγούμενων γεγονότων πάνω στα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

### 1) *EVENT BASED*

Αν για παράδειγμα έχουμε την προσομοίωση της αναπήδησης μιας μπάλας στο έδαφος τότε κατά την τεχνική της προσομοίωσης από γεγονότα θα πρέπει:

- Να έχουμε την εφαρμογή μιας αρχικής δύναμης στην μπάλα που προκύπτει από τη βαρύτητα του χώρου (αρχικό γεγονός)
- Προκαλεί μια συγκεκριμένη σταθερή επιτάχυνση.
- Η μπάλα ταξιδεύει επιταχύνοντας σταθερά ανάλογα με το ύψος που είχε τοποθετηθεί στην αρχή και μέχρι να φτάσει στο σταθερό επίπεδο (επόμενο γεγονός) που έχουμε ορίσει.
- Στο σταθερό επίπεδο ασκείται δύναμη (επόμενο γεγονός) τέτοια ώστε να σταματήσει η κίνηση προς τα κάτω και να αρχίσει την αντίθετη κίνηση προς τα πάνω.
- Κατά τη διάρκεια της κίνησης προς τα πάνω εκτός από την ορμή προς τα πάνω της μπάλας, ασκείται πάνω της η δύναμη της βαρύτητας που την επιβραδύνει μέχρι να σταματήσει την προς τα πάνω κίνηση (επόμενο γεγονός) και να κινηθεί πάλι προς τα κάτω σύμφωνα με το πρώτο βήμα.

Από τα παραπάνω παρατηρούμε ότι ο χρόνος της προσομοίωσης δεν υπάρχει ως δομικό στοιχείο αυτής και υπολογίζεται από τα διαδοχικά γεγονότα τα οποία δεν καθορίζονται από την εξέλιξη του χρόνου.

### 2) *TIME BASED*

Αντίστοιχα σε μια προσομοίωση που οδηγείται από τον χρόνο έχουμε ξεχωριστό υπολογισμό της θέσης της μπάλας για κάθε χρονικό διάστημα  $\Delta t$ . Το λογισμικό προσομοίωσης για κάθε χρονικό διάστημα  $\Delta t$  εκτελεί υπολογισμούς για το ποια είναι η θέση της μπάλας και προσπαθεί να ικανοποιήσει τις δεσμεύσεις που αρχικά τέθηκαν. Προκειμένου να έχουμε μια όσο το δυνατόν πιστή προσομοίωση, θα πρέπει ο χρόνος  $\Delta t$  να είναι όσο το δυνατόν μικρότερος για να αποφύγουμε



σφάλματα. Ένα σφάλμα που μπορεί να γίνει στο παραπάνω παράδειγμα είναι όσον αφορά τη θέση όπου αντιστρέφεται η κίνηση της μπάλας. Η μπάλα θα πρέπει να ξεπεράσει τη θέση που έχουμε ορίσει ως επίπεδο αναπήδησης για να δοθεί αντίστροφη κίνηση. Η αντίστροφή της κίνησης όμως δίνεται με βάση τα χρονικά διαστήματα  $\Delta t$ , έτσι η μπάλα θα ξεπεράσει το επίπεδο αναπήδησης θα συνεχίσει να κινείται και θα αλλάξει τη διεύθυνση της μόνο όταν συμπληρωθεί το χρονικό διάστημα  $\Delta t$ . Έτσι θα έχουμε κάθε φορά που αναπηδά η μπάλα ένα σφάλμα θέσης το οποίο μάλιστα θα είναι αντιστρόφως ανάλογο του διαστήματος του χρόνου  $\Delta t$ .

#### D. ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΣ

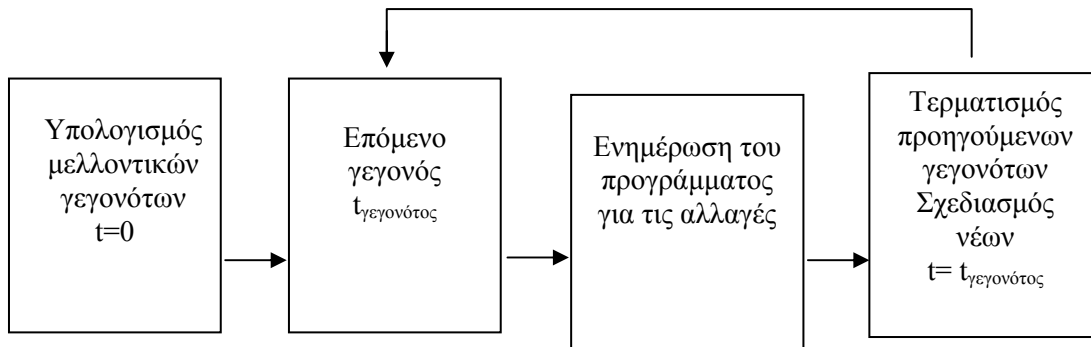
Η δημιουργία προσομοιώσεων που οδηγούνται από γεγονότα, προϋποθέτει ο προγραμματισμός του μοντέλου να γίνει με την ίδια τεχνική (event based programming). Σε αντίθεση με τον κλασικό δομημένο προγραμματισμό, που το πρόγραμμα εκτελείται με μια καθορισμένη από τον προγραμματιστή διαδικασία, στο προγραμματισμό που οδηγείται από τα γεγονότα το τμήμα του προγράμματος που θα εκτελείται κάθε φορά εξαρτάται από τα γεγονότα που συμβαίνουν από την εκτέλεση του αλλά και από την αλληλεπίδραση με το χρήστη. Δεν υπάρχει δηλαδή μια συγκεκριμένη ακολουθία διεργασιών αλλά ανάλογα με τα δεδομένα και τις αρχικές συνθήκες του μοντέλου ακολουθείται διαφορετικό τμήμα του προγράμματος. Μιας και η προσομοίωση είναι βασισμένη στα γεγονότα δεν θα μπορούσε ο προγραμματισμός της να είναι δομημένος με συγκεκριμένη ακολουθία. Στο παράδειγμα που είδαμε πιο πάνω της μπάλας που αναπηδά αν οι συνθήκες της προσομοίωσης (βαρύτητα, αντίσταση αέρα, ελαστικότητα αναπήδησης, μάζα κτλ) παραμένουν ίδιες κάθε φορά και δεν υπάρχει πουθενά κάποια επίδραση του χρήστη, τότε θα μπορούσε να προγραμματιστεί το μοντέλο με δομημένο προγραμματισμό και κάθε φορά που εκτελείται θα παρουσιάζει το ίδιο ακριβώς αποτέλεσμα, χωρίς καμία δυνατότητα διάδρασης με το χρήστη αλλά και δυνατότητα να παρουσιαστεί πλήρως η συγκεκριμένη φυσική διεργασία σε διάφορες καταστάσεις.

Κατά τον προγραμματισμό προσομοιώσεων time based, δεν αποκλείεται η τεχνική προγραμματισμού να είναι event based, μιας και η εξέλιξη του χρόνου μπορεί να θεωρηθεί ένα νέο γεγονός. Διακρίνουμε έτσι μια διαφορά στην έννοια event based όταν πρόκειται για προγραμματισμό και όταν πρόκειται για προσομοίωση, γιατί μεν στον προγραμματισμό, γεγονός (event) μπορεί να θεωρηθεί και ο χρόνος, ενώ στις προσομοιώσεις όταν έχουμε εξέλιξη των γεγονότων που βασίζονται στο χρόνο, έχουμε σημαντική διαφορά στην πρόοδο της προσομοίωσης.

Η διαφορά ανάμεσα στις δύο τεχνικές έγκειται στο ότι κατά την προσομοίωση με βάση το χρόνο, πρέπει να χρησιμοποιηθεί όσο το δυνατόν μικρότερο βήμα ( $\Delta t$ ) προκειμένου να υπάρξουν αξιόπιστα ως προς τα πραγματικά συστήματα αποτελέσματα, εισάγοντας εξ ορισμού ένα σφάλμα στη προσομοίωση. Επίσης όσο μικρότερο είναι το βήμα  $\Delta t$  τόσο μικρότερο σφάλμα θα έχουμε, αλλά καθυστερεί σημαντικά η εξέλιξη του προγράμματος. Από την άλλη πλευρά, στη οδηγούμενη από τα

γεγονότα προσομοίωση δεν έχουμε εισαγωγή σφάλματος και αποφεύγουμε περιττές καθυστερήσεις όταν δεν υπάρχουν γεγονότα από την εξέλιξη του χρόνου, βέβαια η πολυπλοκότητα του κώδικα μας κοστίζει σε κόπο προγραμματισμού και καθυστέρηση στην εξέλιξη λόγω πολλαπλών υπολογισμών (Sloot & Overeinder, 1999).

Κατά τον προγραμματισμό μιας προσομοίωσης που οδηγείται από τα γεγονότα ακολουθούμε την εξής διαδικασία (McNamara & Barrat, 1996):



**Εικόνα 1** Λογική προσομοίωσης που οδηγείται από γεγονότα

Τα στοχαστικά μοντέλα χρησιμοποιούν τη προσομοίωση που οδηγείται από τα γεγονότα. Δεν θα μπορούσε να γίνει αλλιώς μιας και στα στοχαστικά μοντέλα έχουμε επεξεργασία καταστάσεων που προκύπτουν από τυχαίες τιμές κάποιων μεταβλητών. Με αυτό τον τρόπο ο δημιουργός του στοχαστικού μοντέλου δεν γνωρίζει από πριν τη συμπεριφορά της προσομοίωσης, αλλά με την εκτέλεση του προγράμματος παρατηρεί τα αποτελέσματα, κατά τον προγραμματισμό έχει προβλέψει επιμέρους καταστάσεις που η τυχαία σύνδεσή τους ορίζει το τελικό αποτέλεσμα της προσομοίωσης. Η μέθοδος που χρησιμοποιείται ευρέως για την δημιουργία προσομοιώσεων σε στοχαστικά μοντέλα είναι η μέθοδος Monte Carlo.

Οι προσομοιώσεις που οδηγούνται από τα γεγονότα, αποτελούν ένα σημαντικό κομμάτι του προγραμματισμού που οδηγείται από τα γεγονότα. Ο τρόπος που εξελίσσεται μια προσομοίωση οδηγούμενη από γεγονότα, όπου μια ακολουθία χρονικών διαδικασιών εξαρτάται από αυτή την εξέλιξη, την καθιστούν ένα έγκυρο και αξιόπιστο εργαλείο για τη δημιουργία αξιόπιστων προσομοιώσεων. Μιας και πολλές φορές η εξέλιξη μιας φυσικής διεργασίας δεν στηρίζεται στο χρόνο αλλά στην εξέλιξη διαδοχικών γεγονότων. Η αξιοπιστία των αποτελεσμάτων βοηθά στην εγκυρότητα της προσομοίωσης που με τη σειρά της παίζει καθοριστικό ρόλο στην άποψη των μαθητών για την προσομοίωση και γενικότερα για την εκπαιδευτική διαδικασία.

## Ε. ΠΑΙΔΑΓΩΓΙΚΗ ΧΡΗΣΗ

Τα τελευταία χρόνια όλο και περισσότεροι εκπαιδευτικοί ασχολούνται με τις δυνατότητες των Η/Υ και το πώς αυτές μπορούν να αλλάξουν το σχολείο και τις εκπαιδευτικές διαδικασίες. Υπάρχουν πολλές περιπτώσεις όπου η επίδραση των Τ.Π.Ε στο σχολείο είναι απόλυτα επιτυχημένη και μας οδηγούν στο συμπέρασμα ότι η σύνδεση Τ.Π.Ε και σχολείου μπορεί να είναι επιτυχημένη και παραγωγική (Means et al, 1993, Wiske et al, 1988, 1991, Zorfass, 1991). Προκειμένου να χρησιμοποιήσουμε τις Τ. Π. Ε. για προσομοιώσεις διδακτικών αντικειμένων που θα εξυπηρετούν διδακτικούς σκοπούς θα πρέπει να υποστηρίζονται από τις πλέον αποδεκτές παιδαγωγικές θεωρίες ώστε να έχουμε βέλτιστα αποτελέσματα.

Η βασική ιδέα της κονστρουκτιβιστικής θεωρίας στη διδακτική είναι ότι ο μαθητής χτίζει μόνος του τη δική του γνώση και ότι αυτή (η γνώση) δεν μεταφέρεται απλώς από το δάσκαλο στο μαθητή. Με βάση την κονστρουκτιβιστική θεωρία ο μαθητής «μαθαίνει κάνοντας» (“learn by doing”) ώστε να προσαρμόσει τη νέα γνώση που αποκτά με βάση τις προηγούμενες του γνώσεις και να αφομοιώσει την προσφάτως αποκτηθείσα γνώση στο προηγούμενο νοητικό επίπεδο κατανόησης (Inhelder & Piaget, 1958). Ο μαθητής προσπαθώντας να προσαρτήσει τη νέα γνώση βασίζεται στην παλαιότερη αφομοιωμένη γνώση που κατέχει. Όταν «μαθαίνει κάνοντας» βρίσκεται σε μια κατάσταση όπου διαθέτει τις γνώσεις και τις δεξιότητες να πραγματοποιήσει έως ένα βαθμό κατασκευή (νοητική, πραγματική ή εικονική) και προκειμένου να ολοκληρώσει θα πρέπει να κατανοήσει και να αφομοιώσει την γνώση που του προσφέρεται και του χρειάζεται για την ολοκλήρωση της κατασκευής.

Από τα παραπάνω γίνεται αντιληπτό ότι οι προσομοιώσεις, εικονικές ή πραγματικές, είναι ένα σημαντικό εργαλείο για την κονστρουκτιβιστική θεωρία. Ειδικά οι προσομοιώσεις με χρήση Η/Υ μπορούν να επεκταθούν θεωρητικά σε όλα τα γνωστικά αντικείμενα και να χρησιμοποιηθούν για διδακτικούς σκοπούς. Σε αντίθεση με τα πειράματα, προσομοιώσεις υπό πραγματικές συνθήκες, που μόνο σε ένα μικρό αριθμό διδακτικών αντικειμένων μπορεί να έχουν εφαρμογή μιας και όπως έχουμε ήδη αναφέρει υπάρχουν λόγοι κλίμακας, οικονομικοί ασφάλειας που αποτρέπουν την χρήση τους.

Κατά τον «Κοινωνικό Κονστρουκτιβισμό» η διδασκαλία πραγματοποιείται σε ομάδες μαθητών όπου η γνώση διαμοιράζεται στα μέλη των ομάδων. Γενικά τα όμοια μέλη μιας ομάδας βοηθούνται μεταξύ τους πραγματοποιώντας εναλλακτικές δραστηριότητες βασισμένες σε λογικές αλληλοστήριξης, τα μέλη των ομάδων ωφελούνται από αυτή την αλληλεπίδραση και τη ανάπτυξη νέας γνώσης από τα άλλα μέλη αλλά και γενικότερα από περιβάλλον (Vygotsky, 1978). Αυτή η προσέγγιση δίνει έμφαση στο κοινωνικό και πολιτισμικό πλαίσιο στο οποίο οι μαθητές μαθαίνουν. Δίνουν σημασία στη επίδραση, τη συνεργασία και την αλληλεπίδραση με ενήλικους με περισσότερες γνώσεις ή με τους συμμαθητές τους (Bonk & Cunningham, 1998). Οι μαθητές εργάζονται μαζί με σκοπό να μεγιστοποιήσουν τη μάθηση σε προσωπικό και συλλογικό επίπεδο (Johnson et al, 1993).

Μερικά από τα πλεονεκτήματα της διδακτικής μεθόδου είναι (Kagan, 1994, Gokhale, 1995 Ψυχάρης κ.ά., 2006):

- η μεγαλύτερη κατανόηση του προς μάθηση υλικού
- η υψηλότερη εκτίμηση των μαθητών απέναντι στον εαυτό τους (αυτοεκτίμηση) και το περιβάλλον τους
- η θετική στάση απέναντι στο σχολείο και τη μάθηση
- η βελτίωση του γραπτού και προφορικού λόγου
- η ανάπτυξη αμοιβαίων ενδιαφερόντων και διαπροσωπικών σχέσεων εμπιστοσύνης
- η αποδοχή και αλληλοεκτίμηση μεταξύ των εμπλεκόμενων στη μαθησιακή διαδικασία
- η ανάπτυξη μεταγνωστικών ικανοτήτων των μαθητών
- και η ανάπτυξη της κριτικής σκέψης και των ιδεών των μαθητών μέσα σε ένα περιβάλλον που ευνοεί το διάλογο και τη συλλογική διαπραγμάτευση

Υπάρχει πλέον η σύμφωνη γνώμη εκπαιδευτικών και ψυχολόγων ότι δεξιότητες υψηλού επιπέδου όπως η κατανόηση, η επαγωγική σκέψη, η σύνθεση και ο πειραματισμός αποκτώνται όχι με απλή μετάδοση γεγονότων αλλά μέσω αλληλεπίδραση των μαθητών μεταξύ τους με τους εκπαιδευτικούς και με το διδακτικό αντικείμενο (Collins et al, 1989, Resnick 1987).

Η χρήση των Τ.Π.Ε. ως ένα εκπαιδευτικό εργαλείο δημιούργησε νέα δεδομένα και δυνατότητες στη συνεργατική μάθηση μέσα και έξω από τη τάξη (Ψυχάρης, κ.ά., 2006). Η συνεργατική μάθηση σε ομάδες όπως τη προσδιορίζει ο κοινωνικός κονστρουκτιβισμός, είναι σήμερα σε πολλές περιπτώσεις η καλύτερη μέθοδος διδασκαλίας και οδηγός για την ανάπτυξη εκπαιδευτικού λογισμικού. Η σύγχρονη τεχνολογία και το internet έχουν δώσει πολλές λύσεις για την εξάπλωση της μεθόδου της συνεργατικής μάθησης.

Σε επίπεδο τάξης οι μαθητές μπορούν να αλληλεπιδρούν στην ίδια προσομοίωση από διαφορετικές θέσεις στους προσωπικούς τους Η/Υ που είναι συνδεδεμένοι σε τοπικό δίκτυο. Για το λόγο αυτό χρησιμοποιούνται ειδικά προγράμματα συνεργατικής μάθησης για την εκτέλεση μιας προσομοίωσης ή την ανάπτυξη ενός εννοιολογικού χάρτη. Όλα όμως τα λογισμικά μπορούν να χρησιμοποιηθούν συνεργατικά δια μέσω λογισμικών επικοινωνίας και κοινής χρήσης όπως Skype, MSN Messenger, NetMeeting κλπ.

Μπορούμε όμως να επεκταθούμε μέσω internet σε παγκόσμιο επίπεδο και να δημιουργηθούν έτσι πολυσυλλεκτικά περιβάλλοντα μάθησης σε κοινωνικό και πολιτισμικό επίπεδο. Γεγονός πολύ σημαντικό για τον κοινωνικό κονστρουκτιβισμό. Αρκετά περιβάλλοντα μάθησης έχουν αναπτυχθεί για αυτό το σκοπό όπως το C-map (Concept map), το CSILE (Computer Supported Intentional

Learning Environments)κ.α., ενώ πολλά δικτυακά εργαλεία χρησιμοποιούνται και για εκπαιδευτικούς σκοπούς όπως κοινή συγγραφή κειμένου με Wiki.

Σύμφωνα με τα παραπάνω απαιτούνται πλέον από τους εκπαιδευτικούς δεξιότητες πολύ υψηλότερου επιπέδου από αυτές που θα απαιτούνταν σε μια παραδοσιακή διδασκαλία. Εκτός από αυτές τις δεξιότητες, οι εκπαιδευτικοί θα πρέπει να έχουν μεγαλύτερη υποστήριξη από τη διοικητική δομή της εκπαίδευσης σε μετεκπαίδευση, ενημέρωση και ανατροφοδότηση από εφαρμογή των νέων διδακτικών προσεγγίσεων (Knapp et al, 1991). Μελέτες για εκπαιδευτική χρήση των Τ.Π.Ε. αποδεικνύουν όχι μόνο εάν μια τεχνολογία μπορεί να διδάξει ή πώς συγκρίνεται με τη συμβατική διδασκαλία, αλλά τα αποτελέσματα που η τεχνολογία έχει στο γνωστικό αντικείμενο και το ρόλο της διδασκαλίας μέσα στην τάξη (Means et al, 1993).

Ποια είναι όμως τα βασικά χαρακτηριστικά και δυνατότητες των αναπτυσσόμενων εκπαιδευτικών λογισμικών προσομοίωσης ώστε να εντάσσονται αρμονικά στην εκπαιδευτική διαδικασία και να προωθούν τις πλέον αποδεκτές διδακτικές προσεγγίσεις που αναφέραμε πιο πάνω; Παρακάτω δίνονται τα βασικότερα από τα χαρακτηριστικά αυτά σε γενικές γραμμές μιας και περαιτέρω ανάλυση τους θα μας οδηγήσει να ξεφύγουμε από τους στόχους αυτής της εργασίας.

#### *Χτίσιμο της γνώσης*

Έτσι ο ρόλος των Τ.Π.Ε. δεν εμπλέκεται μόνο στη παρουσίαση ενός διδακτικού αντικειμένου αλλά αντίθετα πρέπει να είναι ένα εργαλείο υποστήριξης πειραματικών διεργασιών όπως οι προσομοιώσεις, ώστε να συμβάλουν στο χτίσιμο των γνώσεων (Moreno et al, 2005).

#### *Συνεργατικότητα*

Τα εκπαιδευτικά περιβάλλοντα σε Η/Υ με δυνατότητες γραφικής απεικόνισης και επικοινωνίας ενθαρρύνουν του μαθητές να εμπλακούν στη διαδικασία λύσης προβλημάτων, να μοιραστούν τις ιδέες τους με άλλους μαθητές και καθηγητές, να λάβουν ανατροφοδότηση των αποφάσεων που έλαβαν και γενικότερα να δημιουργηθεί περιβάλλον αλληλοδιδασκαλίας μεταξύ των μαθητών (Johnson, et al, 1998).

#### *Διαφορετικοί τρόποι προσέγγισης*

Τα εκπαιδευτικά περιβάλλοντα πρέπει να είναι ευέλικτα και να χαρακτηρίζονται από το γεγονός ότι η ίδια γνώση μπορεί να παρουσιαστεί με διαφορετικούς τρόπους. Έτσι οι μαθητές μαθαίνουν μέσα από διαφορετικές διδακτικές προτάσεις (Spiro et al, 1991). Έτσι όπως ήδη έχουμε αναφέρει οι μαθητές «χτίζουν» ο καθένας το δικό του διαφορετικό από τους άλλους οικοδόμημα της γνώσης. Οι εναλλακτικοί διδακτικοί τρόποι προσέγγισης της γνώσης είναι ιδανικό μέσο για να καλυφθούν οι ιδιομορφίες στο οικοδόμημα τη γνώσης κάθε μαθητή. Για παράδειγμα στην εργασία μας (Psycharis & Tatsis, 2007) προτείνουμε για τη διδασκαλία φυσικής που περιλαμβάνει σημαντικά μαθηματικά τα οποία εκφράζονται με συγκεκριμένο φορμαλιστικό τρόπο την χρησιμοποίηση λογισμικού γραφικής

απεικόνισης των μαθηματικών εξισώσεων. Με τη χρησιμοποίηση αυτού του λογισμικού τα μαθηματικά αποκτούν μορφή παρόμοια με αυτή των λογικών διαγραμμάτων.

#### *Διαδραστικότητα*

Μια προσομοίωση χωρίς δυνατότητες επίδρασης του χρήστη στην εξέλιξή της δεν προσφέρει πολλά στην εκπαιδευτική διαδικασία και ουσιαστικά παραπέμπει σε τεχνολογικά μέσα παλαιότερης τεχνολογίας όπως η τηλεόραση και το βίντεο. Το εκπαιδευτικό λογισμικό ως εργαλείο θα πρέπει να δίνει διαδραστικές δυνατότητες μεταξύ του χρήστη-μαθητή και του λογισμικού και έτσι να προωθεί την ανακαλυπτική μάθηση όταν χρησιμοποιείται σωστά από τον καθηγητή (Klahr και Dunbar, 1988). Δεν υπάρχει ουσιαστικά κανένας λόγος να δημιουργηθεί μια προσομοίωση σε Η/Υ αν δεν παρέχει στο μαθητή – χρήστη δυνατότητες αλλαγής των δεδομένων εκτέλεσής της. Η διαδραστικότητα αυτή των Τ.Π.Ε. είναι ίσως ο σημαντικότερος λόγος για το ότι αποτελούν σήμερα το σπουδαιότερο εκπαιδευτικό εργαλείο.

#### *Τεχνική αξιοπιστία*

Η τεχνική αξιοπιστία του λογισμικού προσομοίωσης κατά τη διδασκαλία θετικών επιστημών είναι πολύτιμη ώστε τα αποτελέσματα που δίνει να είναι αξιόπιστα. (van Joolingen & de Jong 1996). Εσφαλμένα αποτελέσματα μιας προσομοίωσης θα καταστρέψουν την εικόνα στα μάτια των μαθητών ακόμα και της πλέον καλοφτιαγμένης προσομοίωσης. Έτσι ενδεχομένως να πετύχουμε τα αντίθετα αποτελέσματα από αυτά που επιδιώκουμε από τη χρήση των Τ.Π.Ε..

#### *Προσέγγιση της πραγματικότητας*

Δυνατότητα για προσέγγιση πραγματικών καταστάσεων (Δημάκης και Συμειωνίδης, 2001), ώστε οι δημιουργημένες προσομοιώσεις να καθρεφτίζουν μια πραγματική κατάσταση και όχι να προσπαθούν να εξηγήσουν πραγματικές καταστάσεις μέσω εξωπραγματικών προσομοιώσεων.

#### *Τρόπος παρουσίασης*

Ο τρόπος παρουσίασης των αποτελεσμάτων και η γενικότερη εμφάνιση του λογισμικού προσομοίωσης είναι σημαντικοί παράγοντες όπως αναφέραμε σε προηγούμενη παράγραφο (βλ. γραφική απεικόνιση). Επίσης συνεργατικές προσεγγίσεις κατά τη διδασκαλία βοηθούνται από γραφικά περιβάλλοντα που σχηματοποιούν τις απόψεις των μαθητών με τη μορφή λογικών διαγραμμάτων (Suthers, 1997).

Οι προσομοιώσεις φυσικών συστημάτων είναι ένα σπουδαίο εργαλείο για τη διδασκαλία και χρησιμοποιούνται από το δημοτικό μέχρι και τη τριτοβάθμια εκπαίδευση. Η χρήση των προσομοιώσεων αλλά και γενικότερα των Τ.Π.Ε. δίνουν τη δυνατότητα να λυθούν παραδοσιακά προβλήματα κατά τη διδασκαλία (de Jong et al, 1999). Πολλές στρατηγικές, τεχνικές και μέθοδοι έχουν αναπτυχθεί για την δημιουργία προσομοιώσεων για εκπαιδευτικούς ή επιστημονικούς σκοπούς. Μπορούμε να χαρακτηρίσουμε τις μεθόδους αυτές ως εργαλεία προσομοιώσεων. Τα εργαλεία

προσομοιώσεων όπως η μέθοδος Monte Carlo είναι ιδανικά για την υποστήριξη της ανακαλυπτικής μάθησης (de Lara & Alfonseca, 2003).

Χρησιμοποιώντας τις αρχές της μεθόδου MC η προσομοίωση αλληλεπιδρά με το χρήστη. Λόγω της τυχειότητας που εισάγεται από τη μέθοδο η προσομοίωση εκτελείται κάθε φορά με διαφορετικό τρόπο προσεγγίζοντας έτσι τη συμπεριφορά των πραγματικών συστημάτων όπου η επίδραση τυχαίων παραγόντων δεν μπορεί να προσδιοριστεί αρχικά και έτσι δεν μπορεί να βρεθεί αναλυτική, ακριβής λύση για τα συστήματα, όπως για παράδειγμα της μοριακής δυναμικής. Έτσι μπορούμε να πούμε ότι με τη μέθοδο MC έχουμε περαιτέρω προσέγγιση των πραγματικών καταστάσεων, ήδη έχουμε αναφερθεί όσον αφορά τη σπουδαιότητα αυτού του χαρακτηριστικού στην εκπαιδευτική διαδικασία. Χρησιμοποιώντας τη παραπάνω τεχνική προσομοιώσεων η προσομοίωση μπορεί να δέχεται συνεχώς δεδομένα από τον χρήστη ώστε ουσιαστικά να αλληλεπιδρά με αυτόν. Επίσης η δυνατότητα αυτή για διάδραση γίνεται καλύτερη μιας και ο χρήστης μαθητής αντιλαμβάνεται τα αποτελέσματα της με τη φυσική τους έννοια και το κάνει αυτό αρκετά πιο γρήγορα και αντιδρά επίσης πιο γρήγορα (διάδραση) όταν η προσομοίωση εκτελείτε σε όσο το δυνατόν καλύτερο γραφικά περιβάλλον εί δυνατόν τρισδιάστατο (de Jong et al, 1999).

### III. ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ

#### A. ΓΕΝΙΚΑ

Ο όρος μοντέλο έλκει τη ρίζα του από τη λατινική λέξη *modus* που μεταφράζεται ως «μέτρο» με την έννοια της αναπαράστασης φυσικών φαινομένων (μέτρηση – αναλογία). Προκειμένου να γίνει μια αναπαράσταση κάποιου φυσικού συστήματος χρειάζεται να γίνει μια μαθηματική περιγραφή του βασικού μηχανισμού και των επιμέρους συστημάτων αυτού. Τα μαθηματικά αποτελούν το μέσο εκείνο με το οποίο το «διανοείσθαι» κατάλληλα προπονούμενο μπορεί να φτάσει στο «ειδέναι», τον πραγματικό κόσμο (Γκανάτσιου & Τζώρτζιος, 2005).

##### *Ορισμός*

Είναι η μίμηση της συμπεριφοράς ενός πολύπλοκου μοντέλου με πιθανοκεντρικό τρόπο και η χρήση στοχαστικών τεχνικών για τη μελέτη μη στοχαστικών μαθηματικών προβλημάτων (Δελαπόρτας, 1994). Τα στοχαστικά μοντέλα εξελίσσονται τυχαία ως προς το χρόνο ή οποιαδήποτε άλλη παράμετρο, περιγράφουν τη διαδοχική εξέλιξη ως προς την όποια παράμετρο και εκφράζονται από μια συλλογή τυχαίων καταστάσεων, σε κοινό χώρο πιθανοτήτων (Γκανάτσιου & Τζώρτζιος, 2005). Αυτή η συλλογή ονομάζεται στοχαστικό μοντέλο ή διαδικασία.

Η λέξη «στοχαστικό» εισάγει μια αβεβαιότητα στη δημιουργία του μοντέλου μιας και αυτό εξαρτάται από το «στοχασμό» του μελετητή. Ο μελετητής δημιουργεί με αφετηρία το βασικό μηχανισμό του φυσικού συστήματος και την κρίση του ως ένα βαθμό, στοχαστικά μοντέλα με αβέβαια αποτελέσματα σε αντίθεση με τα ντετερμινιστικά μοντέλα που ο υπολογισμός γίνεται αναλυτικά, με σύνθεση των εξισώσεων που περιγράφουν τη λειτουργία των επιμέρους συστημάτων.

Η ανάπτυξη της στατιστικής θεωρία στις αρχές του 20<sup>ου</sup> αιώνα, στα μαθηματικά και των ιδεών που πηγάζουν από αυτή, οδήγησε στην ανάπτυξη στοχαστικών μοντέλων στις φυσικές επιστήμες για φαινόμενα που δεν μπορούσαν να εκφραστούν μαθηματικά, με αναλυτικό τρόπο. Μια σημαντική θεωρία στην οποία εφαρμόζονται για πρώτη φορά στοχαστικές τεχνικές είναι η θεωρία των «Στοχαστικών – Μαρκοβιανών Ανεξίξεων» (Stochastic-Markov Process Theory) ή όπως έχει επικρατήσει «Αλυσίδες Μαρκοφ» (Markov Chains) (Γκανάτσιου & Τζώρτζιος, 2005, Haggstrom, 2002, Δελαπόρτας, 1994, Iosifescu & Tautu, 1973). Η θεωρία αυτή βρίσκει εφαρμογή, με πολύ καλά αποτελέσματα στη μελέτη φυσικών φαινομένων και είναι η θεωρητική βάση για τη μέθοδο Monte Carlo (Voulgarakis, 2002). Δημιουργήθηκε από το Ρώσο μαθηματικό Markov (1856-1922) με τις μελέτες του για τον τρόπο εναλλαγής σε ένα λογοτεχνικό κείμενο των φωνηέντων σε σχέση με τα σύμφωνα. Με τον τρόπο αυτό γίνεται προσπάθεια να προβλεφθεί η εξέλιξη ενός τυχαίου φαινομένου λαμβάνοντας υπόψιν το βασικό μηχανισμό του μελετώμενου συστήματος.



Αναλύοντας ένα φυσικό σύστημα μπορεί να καταλήξουμε ότι ο μαθηματικός προσδιορισμός του μπορεί να γίνει μόνο με τη χρήση στατιστικών τεχνικών, αν τα αποτελέσματα από αυτή την ανάλυση κρίνονται ικανοποιητικά τότε μπορούμε να μιλήσουμε για ένα στατιστικό μοντέλο. Αν όμως η στατιστική ανάλυση δεν καταλήγει σε αξιόπιστα μακροπρόθεσμα αποτελέσματα αλλά παρατηρείται η εμφάνιση πολλών, απροσδιόριστων αρχικά παραγόντων, που επιδρούν με τυχαίο τρόπο στο φυσικό σύστημα, τότε το μόνο μοντέλο που μπορεί να αναπτυχθεί είναι το στοχαστικό.

Για να προχωρήσουμε στη δημιουργία ενός στοχαστικού μοντέλου:

- Προσδιορίζουμε αρχικά και μετά από ανάλυση της συμπεριφοράς του φυσικού συστήματος, ποιοι είναι οι παράγοντες εκείνοι που δεν μπορεί να προσδιοριστεί αναλυτικά η συμπεριφορά τους.
- Αν αυτό δεν είναι δυνατόν τότε ο μελετητής τους υπολογίζει στοχαστικά, δηλαδή υποθέτει τους απροσδιόριστους παράγοντες.
- Στη συνέχεια ορίζουμε ποια είναι τα όρια των τιμών τυχαίας συμπεριφοράς, δηλαδή προσδιορίζουμε τις ακραίες τιμές που μπορεί να πάρει ο απροσδιόριστος παράγοντας. Και σε αυτή την περίπτωση αν δεν είναι δυνατός ο ορισμός των ακραίων τιμών αυτό γίνεται στοχαστικά.
- Εξάγουμε το μαθηματικό μοντέλο περιλαμβάνοντας και τους παράγοντες που είναι απροσδιόριστοι.
- Προσομοιώνουμε ανάλογα με τη τεχνική που ακολουθούμε τη συμπεριφορά των απροσδιόριστων παραγόντων χρησιμοποιώντας γεννήτριες τυχαίων αριθμών.
- Η στατιστική ανάλυση των αποτελεσμάτων θα μας δώσει τα αποτελέσματα της προσομοίωσης.
- Η σύγκριση των αποτελεσμάτων της στοχαστικής προσομοίωσης με τα αποτελέσματα του φυσικού συστήματος είναι απαραίτητη προκειμένου να ελεγχθεί η ακρίβεια των υποθέσεων του μελετητή σχετικά με τη συμπεριφορά του φυσικού συστήματος.

Μερικά παραδείγματα στοχαστικών μοντέλων που χρησιμοποιούνται για να γίνει πρόβλεψη μελλοντικής συμπεριφοράς των φυσικών συστημάτων είναι τα παρακάτω:

- Μοριακή δυναμική.
- Πληθυσμοί ζώων ή βακτηρίων.
- Εξάπλωση επιδημιών.
- Προβλήματα συντομότερης διαδρομής.

- Υπολογισμός δύσκολων ολοκληρωμάτων (αριθμητική ανάλυση).
- Προβλέψεις οικονομικής συμπεριφοράς.
- Μοντέλα πρόγνωσης καιρού.

Σε όλες τις βασικές έννοιες των θετικών επιστημών, η τύχη και η βεβαιότητα συνυπάρχουν, χωρίς να είναι δυνατόν πάντα να τις διαχωρίσουμε πλήρως (Bountis, 1995). Ο μελετητής καλείται να προσδιορίσει την τυχαιότητα και βεβαιότητα στη συμπεριφορά του μοντέλου, το κατά πόσο επηρεάζονται τα αποτελέσματα από τους δύο αυτούς παράγοντες και να αποφασίσει τεχνικές για τη βελτίωση της δυνατότητας πρόβλεψης του συγκεκριμένου φαινομένου.

## B. ΤΥΧΑΙΟΙ ΑΡΙΘΜΟΙ

Από τα παραπάνω γίνεται αντιληπτό ότι ένα σημαντικό ρόλο στη λειτουργία της στοχαστικής προσομοίωσης παίζει η παραγωγή τυχαίων αριθμών. Προκειμένου να λειτουργήσει μια στοχαστική προσομοίωση σε H/Y θα πρέπει κάποιες μεταβλητές του γενικού μαθηματικού μοντέλου που περιγράφει το φυσικό σύστημα, να μην έχουν τιμές που προκύπτουν από μια συγκεκριμένη συνάρτηση αλλά να πάρουν τυχαίες τιμές. Οι τυχαίες αυτές τιμές προκύπτουν από ειδικούς τυποποιημένους κώδικες σε γλώσσα μηχανής H/Y και ονομάζονται γεννήτριες τυχαίων αριθμών.

Όταν καλούμαστε να δημιουργήσουμε ένα στοχαστικό μοντέλο θα πρέπει να απαντήσουμε στα παρακάτω ερωτήματα για το πώς προσδιορίζεται η τυχαιότητα:

- Υπάρχει σχέση των προηγούμενων τυχαίων τιμών με τις μελλοντικές;
- Ποια τα όρια των ακραίων τυχαίων τιμών που επιθυμούμε ή θέλουμε τιμές από  $-\infty$  έως  $+\infty$ ;
- Ποια η ακρίβεια των τιμών που θα πάρουμε σε πλήθος δεκαδικών ψηφίων;
- Θα πρέπει μήπως να ακολουθείται κάποια συγκεκριμένη κατανομή (π.χ. Gaussian);
- Μετά από πόσο χρονικό διάστημα  $\Delta t$  θα πρέπει να παράγεται ένας νέος τυχαίος αριθμός;
- Θα πρέπει να κάνουμε έλεγχο στις τυχαίες τιμές ώστε να γνωρίζουμε ότι είναι πράγματι αυτές που επιθυμούμε;

### 1) ΑΝΑΓΩΓΙΚΕΣ ΓΕΝΝΗΤΡΙΕΣ ΨΕΥΔΟ-ΤΥΧΑΙΩΝ ΑΡΙΘΜΩΝ

Οι τυχαίοι αριθμοί θα πρέπει να ακολουθούν ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα  $[0,1]$ . Την κατανομή αυτή, συμβολίζουμε  $U(0,1)$ . Μια γεννήτρια τυχαίων αριθμών θα πρέπει να ικανοποιεί τις παρακάτω προϋποθέσεις ώστε να έχει βέλτιστη προσαρμογή στη λειτουργία και κατανομή τιμών των μεταβλητών του μοντέλου (Γαροφαλάκης, 1999):

- Ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα  $[0,1]$ .
- Οι τιμές δεν θα πρέπει να εμφανίζουν καμιά συσχέτιση μεταξύ τους.
- Ο αλγόριθμος της γεννήτριας θα πρέπει εκτελείται εύκολα από τον Η/Υ.
- Η γεννήτρια θα πρέπει να μπορεί να δημιουργεί διαφορετικές ακολουθίες τυχαίων αριθμών κάθε φορά που εκτελείται μια στοχαστική προσομοίωση

Οι γεννήτριες που χρησιμοποιούνται από τις γλώσσες προγραμματισμού και τα προγράμματα προσομοίωσης ονομάζονται «Αναγωγικές γεννήτριες ψευδο-τυχαίων αριθμών» ή «Γραμμικές Αναλογικές Γεννήτριες - Linear Congruential Generators (LCG)» με το χαρακτηρισμό ψευδο-τυχαίο να προκύπτει από το γεγονός ότι δεν είναι πραγματικά τυχαίοι αριθμοί αλλά κάθε επόμενος αριθμός προκύπτει από αναγωγή προηγούμενων.

Μια γενική αναγωγή περιγράφεται από τη παρακάτω σχέση (Εξ. 1) (Landau & Paez, 1997):

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \bmod m, n = 0,1,2,3... \quad (1)$$

Όπου

- $x_n$ : τυχαίος αριθμός με  $x_0$  την αρχική τιμή «σπόρο»
- $a$ : πολλαπλασιαστής
- $b$ : βήμα αύξησης
- $m$ : μέτρο (modulus).

Από τη παραπάνω σχέση μπορούμε να συμπεράνουμε ότι υπάρχουν δύο ειδών αναγωγικές γεννήτριες, οι πολλαπλασιαστικές όπου ο παράγοντας  $b=0$ , και οι μικτές με  $b \neq 0$ . Γενικά προτιμώνται οι πολλαπλασιαστικές γεννήτριες από τις μικτές λόγω της απλούστερης και πιο κατανοητής λειτουργίας ενώ συμπεριφέρονται το ίδιο καλά με μια μικτή (Γαροφαλάκης, 1999). Επίσης παρατηρούμε ότι:

- Κάθε νέος αριθμός προκύπτει ως αποτέλεσμα μαθηματικών πράξεων παραγόντων με σταθερές τιμές και του προηγούμενου τυχαίου αριθμού.
- Οι τυχαίοι αριθμοί που προκύπτουν δεν είναι διακριτοί.
- Υπάρχουν κάποιοι αριθμοί  $i, k$  τέτοιοι ώστε  $x_i = x_{i+k}$ .
- Οι τυχαίοι αριθμοί  $x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}$  επαναλαμβάνονται δημιουργώντας έτσι μια περιοδική εμφάνιση όπου το  $x_i$  παίρνει μια τιμή που είχε πάρει και προηγουμένως, δημιουργείται στη συνέχεια η ίδια ακριβώς ακολουθία τιμών.
- Η μέγιστη τιμή της περιόδου είναι  $m$ .

- Για να έχουμε μεγάλη περίοδο και υψηλή πυκνότητα των  $U_i$  στο  $[0,1]$ , το  $m$  πρέπει να είναι μεγάλο.
- Ο διαιρέτης  $m$  πρέπει να έχει τέτοιες τιμές ώστε να διευκολύνει τη διαίρεση για να απασχολεί λιγότερο τον υπολογιστή.

Για να προχωρήσουμε στη στοχαστική προσομοίωση θα πρέπει να δούμε το κατά πόσον οι τυχαίοι αριθμοί που παράχθηκαν ικανοποιούν τις απαιτήσεις μας. Για να το διαπιστώσουμε αυτό μπορούμε να προχωρήσουμε σε μια σειρά ελέγχων των στατιστικών χαρακτηριστικών που παρουσιάζουν οι ψευρο-τυχαίοι αριθμοί (Δελαπόρτας, 1994):

- $\chi^2$  έλεγχος καλής προσαρμογής επανάληψης. Προσδιορίζει το κατά πόσο μια συγκεκριμένη ακολουθία τυχαίων αριθμών περιέχει επαναλήψεις. Αν οι αριθμοί που παράγει μια γεννήτρια είναι οι  $K_1, K_2, \dots, K_N$  ενώ βάση του μοντέλου παραγωγής τυχαίων αριθμών περιμένουμε να εμφανιστούν οι  $\Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_N$ . Τότε υπάρχει μια στατιστική συνάρτηση ελέγχου

$$x = \sum_{i=1}^N \frac{(K_i - \Lambda_i)^2}{\Lambda_i} \quad (2)$$

- Έλεγχος συχνότητας, επιθυμούμε όσο το δυνατόν μεγαλύτερη περίοδο επανάληψης άρα και μικρή συχνότητα.
- Σειριακός έλεγχος, έλεγχος χάσματος, και έλεγχος «poker».

## 2) ΚΑΤΑΝΟΜΕΣ

Η παραπάνω διαδικασία μας οδηγεί στην παραγωγή τυχαίων αριθμών με ομοιόμορφη κατανομή  $U(0,1)$ . Στα στοχαστικά μοντέλα όμως ο μελετητής τις περισσότερες φορές χρειάζεται να χρησιμοποιήσει μια συγκεκριμένη κατανομή τιμών στις μεταβλητές του μοντέλου. Η κατανομές αυτές μπορεί να προέρχονται:

- από εμπειρική μελέτη των δεδομένων που έχουμε από την πραγματική απόδοση τιμών του φυσικού συστήματος αν αυτό είναι δυνατό,
- προσαρμογή της κατανομής των τιμών που δίνει από την λειτουργία του το φυσικό σύστημα σε μια θεωρητική καμπύλη κατανομών,
- εφαρμογή μιας θεωρητικής καμπύλης κατανομών επιλογής του μελετητή όταν δεν είναι δυνατή η λήψη δεδομένων από το φυσικό σύστημα.

Κατά την πρώτη περίπτωση γίνεται δειγματοληψία των δεδομένων και μετά από στατιστική μελέτη των δεδομένων καταλήγουμε στη σχέση που προσδιορίζει τη κατανομή των τιμών, στη

συνέχεια χρησιμοποιούμε τη σχέση αυτή για να κατανεύουμε με τον ίδιο τρόπο τις τυχαίες τιμές από τη γεννήτρια τυχαίων αριθμών. Όσον αφορά τη συλλογή δεδομένων διακρίνουμε δύο τύπους α) όλες τις τιμές που δίνει το φυσικό σύστημα υπό μορφή δεδομένων, β) ομαδοποιημένα δεδομένα ανά ομάδες τιμών.

Αξίζει να παρατηρηθεί εδώ ότι με αυτή τη μέθοδο τα αποτελέσματα που θα πάρουμε από τη εκτέλεση του μοντέλου θα είναι ενταγμένα στο πλαίσιο των δεδομένων που παράγει το φυσικό σύστημα, έστω μερικές φορές όπου μπορέσαμε να κάνουμε μέτρηση. Με αυτό τον τρόπο δεν μπορούμε να προβλέψουμε μια διαφορετική εξέλιξη με τη χρήση του μοντέλου πέρα από τη τυχειότητα συνδυασμού των διαδοχικών τιμών. Για παράδειγμα θα αναφέρουμε ένα μοντέλο πρόγνωσης καιρικών φαινομένων όπου μπορούμε να έχουμε δεδομένα μόνο από μερικά χρόνια και για τα οποία δεν γνωρίζουμε αν είναι αντιπροσωπευτικά όλων των δυνατών εξελίξεων. Έτσι η καμπύλη κατανομής των πιθανών τιμών ίσως να «πλαστή» εκφράζοντας ένα μόνο κομμάτι της πραγματικής κατανομής. Με αυτό τον τρόπο το μοντέλο μας μπορεί να προβλέψει μόνο τη συμπεριφορά από τη κατανομή που έχουμε. Ουσιαστικά αναπαράγει την ίδια συμπεριφορά με αυτή που έχουμε μελετήσει.

Αν όμως εντάξουμε τα παρατηρούμενα δεδομένα σε μια θεωρητική καμπύλη κατανομής (κανονική, εκθετική, δυνωμική κ.τ.λ.) που έχει αποδειχθεί ότι τα φυσικά συστήματα τις ακολουθούν, ίσως να έχουμε ένα μοντέλο που προβλέπει γενικότερα τη συμπεριφορά του φυσικού συστήματος. Έτσι στη δεύτερη περίπτωση όπου έχουμε προσαρμογή της κατανομής των τιμών που δίνει από την λειτουργία του το φυσικό σύστημα σε μια θεωρητική καμπύλη κατανομών, διακρίνουμε τις ακόλουθες κατανομές που μπορεί να χρησιμοποιηθούν σε στοχαστικά μοντέλα:

- Ομοιόμορφη κατανομή με τη μεταβλητή  $x$  να είναι ομοιόμορφα κατανεμημένη στο διάστημα  $a \leq x \leq b$  με συνάρτηση πυκνότητας:

$$f(x) = \begin{cases} 1/(b-a) \rightarrow a \leq x \leq b \\ 0 \rightarrow \text{αλλιώς} \end{cases} \quad (3)$$

και συνάρτηση κατανομής:

$$F(x) = P(X \leq x) = \begin{cases} 0 \rightarrow x < a \\ (x-a)/(b-a) \rightarrow a \leq x \leq b \\ 1 \rightarrow x \geq b \end{cases} \quad (4)$$

- Κανονική κατανομή όπου η μεταβλητή τιμή  $x$  είναι κανονικά κατανεμημένη με μέση τιμή  $\mu$  και διασπορά  $\sigma^2$  με συνάρτηση πυκνότητας:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \rightarrow -\infty < x < \infty \quad (5)$$

και συνάρτηση κατανομής

$$f(x) = P(X \leq x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{(u-\mu)^2}{2\sigma^2}} du \quad (6)$$

Χρησιμοποιείται για τη μοντελοποίηση φυσικών συστημάτων που ακολουθούν κανονική κατανομή ή σε περιπτώσεις του αθροιστικού φαινομένου διαφόρων ανεξαρτήτων πηγών διαμόρφωσης μιας μεταβλητής (Γαροφαλάκης, 1999). Η κανονική κατανομή εμφανίζεται στα περισσότερα φυσικά συστήματα και για αυτό χρησιμοποιείται συχνά στη στοχαστική μοντελοποίηση.

- Εκθετική κατανομή όπου η μεταβλητή  $x$  κατανέμεται εκθετικά με μέση τιμή  $\beta$  και συνάρτηση πυκνότητας:

$$f(x) = \begin{cases} 1 - e^{-x/\beta} & \rightarrow x \geq 0 \\ 0 & \rightarrow \text{αλλιώς} \end{cases} \quad (7)$$

Χρησιμοποιείται για τη μοντελοποίηση εντελώς “τυχαίων” γεγονότων, πολλές φορές είναι η πλέον ενδεδειγμένη λύση όταν δεν υπάρχουν ενδείξεις για την κατανομή που πρέπει να χρησιμοποιηθεί (Γαροφαλάκης, 1999).

- Κατανομή Poisson με συνάρτηση πιθανότητας:

$$f(x) = P(X = x) = \frac{\lambda^x e^{-\lambda}}{x!} \rightarrow x = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

Με  $\lambda$  μια δεδομένη σταθερή τιμή, χρησιμοποιείται για την παραγωγή μοντέλων για τον προσδιορισμό του αριθμού εμφανίσεων γεγονότων κατά τη διάρκεια μιας συγκεκριμένης περιόδου όπως ο ποιοτικός έλεγχος στη βιομηχανία.

- Γεωμετρική κατανομή με  $p$  την πιθανότητα να πραγματοποιηθεί ένα γεγονός σε μια δοκιμή Bernoulli και  $q$  τη πιθανότητα να μην πραγματοποιηθεί το γεγονός. Η συνάρτηση πιθανότητας δίνει τη πιθανότητα να πραγματοποιηθεί το γεγονός αυτό ακριβώς  $x$  φορές:

$$f(x) = P(X = x) = pq^{x-1} \quad (9)$$

Χρησιμοποιείται όταν χρειάζεται η μοντελοποίηση των ενδιάμεσων γεγονότων μεταξύ δύο σημαντικών γεγονότων, π.χ. ο αριθμός των σωστών bits μεταξύ δύο λανθασμένων bits σε ένα πακέτο δεδομένων (Γαροφαλάκης, 1999).

- Διωνυμική κατανομή με συνάρτηση πιθανότητας που προσδιορίζει τον αριθμό των επιτυχημένων δοκιμών Bernoulli για μια σειρά δοκιμών  $n$ .

$$f(x) = P(X = x) = \binom{n}{x} p^x q^{n-x} = \frac{n!}{x!(n-x)!} p^x q^{n-x} \quad (10)$$

- Κατανομή Βήτα

$$f(x) = \begin{cases} \frac{x^{a-1}(1-x)^{b-1}}{B(a,b)} \rightarrow 0 < x < 1 \\ 0 \rightarrow \text{αλλιώς} \end{cases} \dots(a, b > 0) \quad (11)$$

Χρησιμοποιείται για τη δημιουργία μοντέλων αναλογιών (Γαροφαλάκης, 1999) όπως όταν έχουμε ποσοστό εμπλοκής των συνολικών μορίων μιας χημικής αντίδρασης σε ένα νέο γεγονός όπως η αύξηση της θερμοκρασίας κατά την εξέλιξη του μοντέλου.

### C. ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΙ

Εφαρμόζοντας ένα μετασχηματισμό στους τυχαίους αριθμούς της ομοιόμορφης κατανομής τη μετατρέπουμε στην επιθυμητή κατανομή. Υπάρχουν διάφοροι μέθοδοι μετασχηματισμού και το ποιον θα χρησιμοποιήσουμε εξαρτάται από την κατανομή ή τη διαδικασία από την οποία θέλουμε να πάρουμε τυχαίες τιμές.

- Μέθοδος Αντίστροφου μετασχηματισμού.

Χρησιμοποιείται όταν έχοντας μια ομοιόμορφα κατανομημένη τυχαία μεταβλητή  $x$  θέλουμε να τη μετατρέψουμε σε συνάρτηση κατανομής  $F(x)$  συνεχή και αύξουσα,  $F(x_1) \leq F(x_2)$  όταν  $x_1 \leq x_2$ . Για παράδειγμα αν θέλουμε να μετατρέψουμε μια ομοιόμορφη κατανομή  $U(0,1)$  σε εκθετική κατανομή θέτουμε  $u = F(x)$  και βρίσκουμε ότι:

$$F^{-1}(u) = -\beta \ln(1-u) \quad (12)$$

Μιας και η κατανομή  $1-U$  είναι ίδια με τη κατανομή  $U$  παίρνουμε:

$$X = -\beta \ln U \quad (13)$$

- Τεχνική της Σύνθεσης.

Μπορούμε να τροποποιήσουμε την κατανομή  $F$  της ποσότητας  $X$  να προκύπτει από τη σύνθεση των κατανομών  $F_j$  τις οποίες εύκολα να μπορούμε να δημιουργήσουμε από τυχαίες τιμές. Έτσι αν γράψουμε την  $F(x)$  ως:

$$F(x) = \sum_{j=1}^{\infty} p_j F_j(x) \quad (14)$$

όπου  $p_j \geq 0$ ,  $\sum_{j=1}^{\infty} p_j = 1$  κάθε  $F_j$  έχει μια κατανομή.

- Μέθοδος συνέλιξης

Αν η κατανομή της ποσότητας  $X$  προκύπτει ως άθροισμα άλλων ανεξάρτητων και όμοια κατανομημένων μεταβλητών  $M_i$  που εύκολα μπορούμε να δημιουργήσουμε από τυχαίες τιμές, τότε α) δημιουργούμε τις τυχαίες τιμές για τις μεταβλητές  $M$  και β) η τιμές της  $X$  προκύπτουν από το άθροισμα των  $M_i$ .

- Μέθοδος αποδοχής – απόρριψης

Όταν όλες οι παραπάνω μέθοδοι δεν μπορούν να μας δώσουν τυχαίες τιμές για μια συγκεκριμένη κατανομή τότε χρησιμοποιούμε τη συγκεκριμένη μέθοδο μιας και είναι σχετικά αργή αφού ορισμένες τιμές που θα παραχθούν από τη γεννήτρια τυχαίων αριθμών θα απορριφθούν. Η ιδέα της μεθόδου βασίζεται στη λογική της σύγκρισης κάθε νέου τυχαίου αριθμού με την επιθυμητή κατανομή, αν η τιμή αυτή δεν εντάσσεται στη κατανομή απορρίπτεται ή αν εντάσσεται γίνεται αποδεκτή.



## IV. ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΥΝΑΜΙΚΗ

### A. ΦΥΣΙΚΗ

Πολλές θεωρίες έχουν αναπτυχθεί για την κατανόηση της συμπεριφοράς των μορίων σε διάφορα υλικά περιγράφοντας τη συμπεριφορά της μοριακής δομής στοχαστικά. Ονομάζονται Μοριακή Δυναμική (Molecular Dynamics) και είναι κύριο εργαλείο της Υπολογιστικής Φυσικής (Computational Physics) (Berne, 1997) που έχει ως αντικείμενο την εξήγηση και προσομοίωση των φυσικών φαινομένων σε μοριακό επίπεδο, χρησιμοποιώντας υπολογιστικές τεχνικές.

Οι πρώτες προσπάθειες προσομοίωσης της μοριακής δυναμικής ξεκίνησαν από τα μέσα του 20<sup>ου</sup> αιώνα. Το 1957 οι Alder και Wainwright δημιούργησαν ένα από τα πρώτα μοντέλα μοριακής δυναμικής υγρού που αποτελούνταν από σφαίρες που αλληλεπιδρούσαν ελαστικά μεταξύ τους (Alder & Wainwright, 1957). Το 1964 ο Rahman που θεωρείτε ο πατέρας της μοριακής δυναμικής ανέπτυξε ένα μοντέλο προσομοίωσης των μορίων υγρού που αλληλεπιδρούσαν με διαφορετικό βαθμό ελαστικότητας (Rahman, 1964). Το 1971 οι Rahman και Stillinger αναπτύσσουν για πρώτη φορά σύνθετο σύστημα προσομοίωσης της μοριακής δυναμικής (Rahman & Stillinger, 1971), ενώ η πρώτη προσομοίωση της μοριακής δυναμικής, των βιολογικών μακρομορίων μιας πρωτεΐνης έγινε από τον McCammon το 1976 (Berendsen, 1997).

Τα τελευταία χρόνια με τη συνεχιζόμενη έρευνα στη μοριακή δυναμική κατάφερε να γίνει δυνατή η δημιουργία προσομοιώσεων υπολογισμού θερμοδυναμικών ιδιοτήτων των υλικών, όπως μέση ενέργεια, κρίσιμη θερμοκρασία, εντροπία κτλ. (Hjorth-Jensen, 2006, Pang, 2006, Landau & Paez, 1997, Hyde et al, 1996). Κύριο εργαλείο για την ανάπτυξη των παραπάνω μοντέλων υπήρξε η μέθοδος Monte Carlo. Ένα άλλο θέμα που ανακύπτει συνεχώς και έχει αυξανόμενο ενδιαφέρον είναι η εισαγωγή μεθόδων Κβαντικής Μηχανικής (Quantum Mechanics) για προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής. Η εισαγωγή κβαντικών ιδιοτήτων για τουλάχιστον εκατοντάδες μόρια απαιτεί υπολογιστές με τεράστια, πέρα από κάθε σημερινή πρόβλεψη, υπολογιστική δύναμη και μόνο προσεγγίσεις είναι δυνατόν να επιτευχθούν (Berendsen, 1997).

Η ανάπτυξη των στοχαστικών μοντέλων στον τομέα της μοριακής δυναμικής, οφείλεται στο ότι ουσιαστικά, δεν υπάρχει ενδιαφέρον φυσικό σύστημα που η μελέτη της συμπεριφοράς του να μπορεί να γίνει αναλυτικά (Pathria, 1972). Γενικότερα ισχύει ότι δεν υπάρχει αναλυτική λύση για σύστημα με δύο και περισσότερα αντικείμενα που αλληλεπιδρούν (Berne, 1997). Στη περίπτωση βέβαια της μοριακής δυναμικής αλληλεπιδρούν εκατομμύρια σωματίδια σε πολύ μικρό χρονικό διάστημα. Για παράδειγμα μια σταγόνα νερού περιέχει  $10^{21}$  μόρια νερού που αλληλεπιδρούν και από την αλληλεπίδραση αυτή προκύπτουν οι φυσικές ιδιότητες της σταγόνας αυτής.

Για το λόγο αυτό οι ερευνητές αυτών των φαινομένων αναπτύσσουν στοχαστικά μοντέλα για να περιγράψουν τις διαδικασίες και τα φαινόμενα και να συγκρίνουν τα αποτελέσματα που προκύπτουν

με τα μακροσκοπικά αποτελέσματα των πραγματικών συστημάτων. Τις περισσότερες φορές γίνεται δειγματοληψία με τη χρήση υπολογιστών μερικών καταστάσεων, που μπορούν να περιγραφούν από τις εξισώσεις του συστήματος, μιας και δεν είναι δυνατόν όπως αναφέραμε και πιο πάνω να αναλυθούν όλες οι περιπτώσεις. Μια ευρέως χρησιμοποιούμενη τεχνική, λόγω της αποτελεσματικότητάς της αλλά και της γενικής της χρήσης, είναι η μέθοδος Monte Carlo με τη τεχνική της ανομοιόμορφης δειγματοληψίας (importance sampling) (Hjorth-Jensen, 2006, Voulgarakis, 2002, Hyde et al, 1996).

## **B. ΠΑΙΔΑΓΩΓΙΚΗ ΧΡΗΣΗ**

Αντιλήψεις που άπτονται της σωματιδιακής δομής της ύλης δίνουν στο μαθητή τη δυνατότητα να προσεγγίζει τις ίδιες τις δομές των ουσιών αρχικά, αλλά και τις μεταβολές τους στη συνέχεια κατά τη διάρκεια των φαινομένων. Οι προσεγγίσεις του μικρόκοσμου γίνονται συνήθως με τη χρήση κατάλληλων στοχαστικών μοντέλων (Παπαγεωργίου, 2007). Ο σχεδιασμός των αναλυτικών προγραμμάτων εμφανίζει μια περιορισμένη χρήση των διδακτικών προσεγγίσεων από τη σκοπιά της σωματιδιακής δομής της ύλης. Αυτό οφείλεται κυρίως στη μη ολοκλήρωση της ικανότητας των μαθητών για αφαιρετικές σκέψεις σε μικρές ηλικίες κάτι που ενδεχομένως είναι ανυπέρβλητο εμπόδιο για την κατανόηση μιας μικροσκοπικής ανάλυσης της δομής της ύλης (Fensham 1994).

Διεθνώς στα αναλυτικά προγράμματα ενσωματώνονται διαρκώς σωματιδιακές ιδέες μοριακής δυναμικής, από τις χαμηλές ακόμη βαθμίδες της εκπαίδευσης, όπως για παράδειγμα στην Αγγλία στο πρόγραμμα DfES (2003) (Παπαγεωργίου κ. ά., 2007). Στην Ελλάδα ήδη πολλά φυσικά φαινόμενα ερμηνεύονται με βάση τη σωματιδιακή θεώρηση στη πρωτοβάθμια και δευτεροβάθμια εκπαίδευση. Οι Ιμβριώτη και Καλκάνης (2007) προτείνουν εκπαιδευτικές προσεγγίσεις και πρακτικές της σωματιδιακής δομής της ύλης με σκοπό να εξυπηρετηθεί η περιγραφή και ερμηνεία ενός συνόλου φυσικών φαινομένων που εντάσσονται στο αναλυτικό πρόγραμμα της πρωτοβάθμιας εκπαίδευσης και συγκεκριμένα στα Φυσικά της Ε' και Στ' τάξης (Ιμβριώτη & Καλκάνης, 2007).

Γενικά από την αξιοποίηση προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής για διδακτικούς σκοπούς προκύπτουν τα παρακάτω συμπεράσματα:

- Η μοριακή δυναμική αποδείχθηκε ουσιαστική στην εκμάθηση των κύριων ιδιοτήτων της ύλης, αλλαγών που συνδέονται με τη θέρμανση ή την ψύξη μιας ουσίας, των αλλαγών φυσικής κατάστασης και εννοιών χημείας (Johnson, 1989).
- Η έρευνα των Νταλαούτη & Τσαπαρλή (2007) έδειξε ότι οι μαθητές χρησιμοποιούν το σωματιδιακό μοντέλο της μοριακής δυναμικής με άνεση όταν αυτό εξηγεί γνωστά τους και καθημερινά φαινόμενα.

- Από την ίδια έρευνα προκύπτει ότι οι επιδόσεις στο μικροσκοπικό πλαίσιο ήταν σαφώς πιο υψηλές απ' ό,τι στο μακροσκοπικό πλαίσιο ερμηνείας των φαινομένων (Νταλαούτη & Τσαπαρλής, 2007).
- Το μοντέλο της μοριακής δυναμικής μπορεί να ενοποιεί ποικίλα φαινόμενα, να τα αναπαριστά, να τα προβλέπει και να τα εξηγεί (Lee et al, 1993). Δεν χρειάζεται έτσι η δημιουργία διαφορετικών μοντέλων για την προσομοίωση διαφορετικών φυσικών φαινομένων. Με την ανάπτυξη μοντέλων μοριακής δυναμικής μπορούμε να προσομοιώνουμε το επιθυμητό κάθε φορά φυσικό φαινόμενο.
- Τα μοντέλα μοριακής δυναμικής χαρακτηρίζονται από απλότητα και οικονομία ως προς τον τρόπο λειτουργίας κατά την εφαρμογή τους σε H/Y (Lee et al. 1993), κάτι που τα καθιστά ευέλικτα για εκπαιδευτική χρήση.
- Βελτιώνει επίσης τις επιδόσεις των κοριτσιών και στο μοριακό επίπεδο κατανόησης των φαινομένων αλλά και γενικότερα στο συμβολικό επίπεδο (Νταλαούτη & Τσαπαρλής, 2007, Bunce & Gabel 2002).

Η προσεκτικά σχεδιασμένη διδασκαλία με σύνδεση μακροσκοπικών εννοιών με τις σωματιδιακές όψεις και χρήση πειραμάτων, επιδείξεων, αναλογιών και προσομοιώσεων σε H/Y, μπορεί να βοηθήσει μαθητές να αναπτύξουν κατανόηση της φύσης των μορίων. Αυτή η κατανόηση της πρωταρχικής έννοιας θα βοηθήσει αργότερα την περαιτέρω εμπάθυνση που έπεται στις επόμενες τάξεις. Οι μαθητές μαθαίνοντας να σκέπτονται και να ερμηνεύουν τα φαινόμενα χρησιμοποιώντας την αλήθεια της μοριακής δυναμικής δεν χρειάζεται κάθε φορά να αντιμετωπίζουν τη καινούργια γνώση ως ένα νέο βελτιωμένο πρότυπο του κόσμου αλλά την εντάσσουν στην πρωταρχική θεώρηση της μοριακής δυναμικής.

Η μοριακή δυναμική εξηγεί τα φυσικά φαινόμενα από την πιο απλή θεώρηση τους στην πρώτη δημοτικού μέχρι τη κβαντική θεωρία ερμηνείας των φαινομένων. Η γνώση παρέχεται ως ένα ενιαίο οικοδόμημα χωρίς ανατροπές και διορθώσεις δίνοντας έτσι πεδίο εφαρμογής της κονστрукτιβιστικής θεωρίας για την εκπαίδευση. Η γνώση παρέχεται επαγωγικά, εργαζόμενοι πάντα στο ίδιο μοντέλο σε δημοτικό, γυμνάσιο και λύκειο και χωρίς να αναθεωρούμε ή να εφαρμόζουμε άλλα μοντέλα τη μια φορά και άλλα την άλλη. Η γνώση παρουσιάζεται ως μία και αδιαίρετη από διάφορες ερμηνείες, μιας και η ερμηνεία είναι μία, αυτή της μοριακής δυναμικής, χωρίς ασυνέχειες. Με βάση αυτό οι μαθητές οικοδομούν το δικό τους ενιαίο οικοδόμημα γνώσεων σχετικά με το μηχανισμό λειτουργίας της φύσης. Ως παράδειγμα μπορούμε να αναφέρουμε την εξάτμιση του νερού, που στο δημοτικό αναφέρεται απλά ως μια φυσική ιδιότητα του νερού, κάτι το οποίο ανατρέπεται όταν αργότερα γίνεται αναφορά σε έννοιες θερμοδυναμικής σε γυμνάσιο και λύκειο.

Δεν μπορούμε βέβαια να ανακηρύξουμε τη μοριακή δυναμική ως τη λύση όλων των προβλημάτων κατανόησης των φυσικών εννοιών. Αδυναμίες στην κατανόηση των μαθητών μπορούν να παραμείνουν και μετά την προσέγγιση αυτή. Όπως όμως συμπεραίνουμε από τα παραπάνω και με βάση τις ισχύουσες παιδαγωγικές θεωρίες είναι η πλέον σωστή μέθοδος προσέγγισης των φαινομένων. Έτσι η δημιουργία προσομοιώσεων στον τομέα αυτό είναι ιδιαίτερης σημασίας για την ένταξη των μαθητών στο περιβάλλον μάθησης με χρήση της μοριακής δυναμικής.

Στο δεύτερο κεφάλαιο του παρόντος έχουμε ήδη αναφέρει τη σπουδαιότητα του τρόπου εμφάνισης μιας προσομοίωσης και της εγκυρότητας και αξιοπιστίας των αποτελεσμάτων της. Τα μοντέλα μοριακής δυναμικής δεν είναι δυνατόν να έχουν σαφή αναλυτική λύση, αυτό από μόνο του δείχνει το πόσο δύσκολη είναι η ανάπτυξη των προσομοιώσεων. Οι προσομοιώσεις βασίζονται σε στοχαστικά μοντέλα όπου υπεισέρχεται η υποκειμενικότητα της κρίσης του μελετητή. Εδώ υπάρχει ο κίνδυνος να αναιρεθεί το πλεονέκτημα της συνέχειας και της ενιαίας εξήγησης των φαινομένων με την μοριακή δυναμική μιας και το μοντέλο του Α μελετητή μπορεί να οδηγεί εν μέρει σε διαφορετικά συμπεράσματα από αυτό του Β μελετητή. Λόγοι προσεγγίσεων και «στοχασμού» οδηγούν σε αυτό το αποτέλεσμα κάτι που πολύ εύκολα μπορεί να αντιληφθεί ένας επιστήμονας και να θεωρήσει και τα δύο μοντέλα έγκυρα αλλά δεν είναι καθόλου βέβαιο ότι μπορεί να κάνει το ίδιο και ο μαθητής.

Χρειάζεται λοιπόν ιδιαίτερη προσοχή κατά την ανάπτυξη προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής για εκπαιδευτική χρήση ώστε να μην δημιουργείται σύγχυση στους μαθητές από το βαθμό στοχαστικής προσέγγισης των φαινομένων. Το καλύτερο είναι μιας και η μοριακή δυναμική χρησιμοποιείται για την ερμηνεία πολλών και διαφορετικών φαινομένων να χρησιμοποιείται αντίστοιχα το ίδιο μοντέλο, η ίδια προσομοίωση για την ερμηνεία διαφορετικών φαινομένων.

### C. ΚΙΝΗΣΕΙΣ ΜΟΡΙΩΝ

Προκειμένου να προχωρήσουμε στην ανάπτυξη μοντέλων μοριακής δυναμικής θα πρέπει να αποσαφηνίσουμε κάποια βασικά χαρακτηριστικά της συμπεριφοράς των μορίων της ύλης (Serway, 2003).

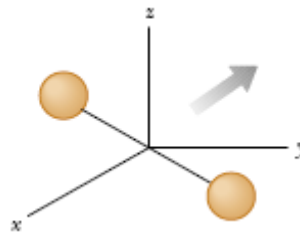
Οι δυνάμεις που ασκούνται σε ένα μόριο κάποιου υλικού είναι:

- Βαρυτικές δυνάμεις, που προκαλούνται από το βαρυτικό πεδίο των υλικών και τη βαρύτητα της γης.
- Δυνάμεις ηλεκτρικού πεδίου, από το πεδίο που δημιουργούν τα φορτισμένα γύρω του σωματίδια ή η κάποιο εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο.
- Δυνάμεις μαγνητικού πεδίου, από το μαγνητικό πεδίο που δημιουργούν τα διπλανά του σωματίδια ή κάποιο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

- Δυνάμεις που δημιουργούνται από τη εσωτερική ενέργεια του υλικού (θερμοκρασία).
- Δυνάμεις από συγκρούσεις με γειτονικά μόρια.

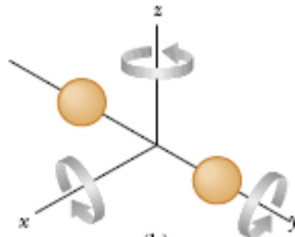
Οι κινήσεις που εκτελεί ένα μόριο και προκαλούνται από τις παραπάνω δυνάμεις που εφαρμόζονται πάνω του, είναι:

- Ευθύγραμμη κίνηση κατά τους τρεις άξονες (X,Y,Z). Από την κίνηση αυτή συμπεραίνουμε ότι το μόριο διαθέτει 6 βαθμούς ελευθερίας (X+, X-, Y+, Y-, Z+, Z-). Η κίνηση αυτή δεν εμφανίζεται σε υλικά που βρίσκονται σε στερεά κατάσταση.



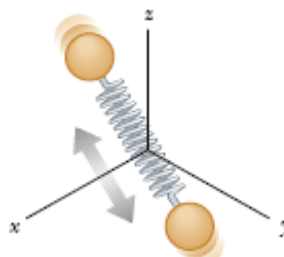
**Εικόνα 2.** Ευθύγραμμη κίνηση (Serway, 2003)

- Περιστροφική κίνηση κατά οποιαδήποτε κατεύθυνση.



**Εικόνα 3.** Περιστροφική κίνηση (Serway, 2003)

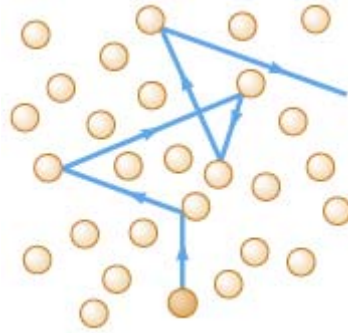
- Ταλάντωση. Οι ταλαντώσεις εμφανίζονται σε πολυατομικά μόρια όπου έχουμε την ταυτόχρονη εμφάνιση συνεκτικών και απωστικών δυνάμεων ανάμεσα στα άτομα του μορίου, αυτό σε γενικές γραμμές προκαλεί και την ταλάντωση του μορίου.



**Εικόνα 4.** Ταλαντώσεις μορίων (Serway, 2003)

Ανάλογα με το υλικό που εξετάζουμε αλλά και την κατάσταση στην οποία βρίσκεται (στερεά, υγρή, αέρια), παρουσιάζεται μια διαφορετική συμπεριφορά των μορίων του. Ένα παράδειγμα που αφορά τη συμπεριφορά των ατόμων ενός αερίου παρουσιάζεται στην παρακάτω εικόνα (Εικ. 5). αν

θέλουμε να μελετήσουμε τη συμπεριφορά ενός μορίου (μπλε διαδρομή) παρατηρούμε ότι αυτό κινείται μέσα από συνεχείς συγκρούσεις – αλληλεπιδράσεις με άλλα μόρια. Ουσιαστικά σε ένα αέριο συμβαίνουν εκατομμύρια συγκρούσεις ανά δευτερόλεπτο οπότε το πλέον ασφαλές συμπέρασμα όσον αφορά την πορεία, την ταχύτητα και την τελική θέση του μορίου μετά από χρονικό διάστημα  $t$ , είναι ότι αυτά τα χαρακτηριστικά του μορίου εξελίσσονται ουσιαστικά τυχαία. Τυχαία, αλλά σε κάποια πλαίσια που καθορίζουν οι ξεχωριστές ιδιότητες κάθε ύλης.



Εικόνα 5. Μοριακή δομή αερίου (Serway, 2003)

#### D. ΑΠΟΜΑΚΡΥΣΜΕΝΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ

Με τον όρο απομακρυσμένες αλληλεπιδράσεις εννοούμε τις δυνάμεις που ασκούνται ανάμεσα στα μόρια ή στα μόρια από το περιβάλλον και οφείλονται σε βαρυτικό, μαγνητικό ή ηλεκτρικό πεδίο. Είναι οι δυνάμεις εκείνες που προσδίδουν δυναμική ενέργεια στα μόρια. Κύριος παράγοντας της άσκησης τέτοιων δυνάμεων είναι η θέση του μορίου κάθε χρονική στιγμή. Οι ηλεκτροστατικές δυνάμεις είναι η αιτία των περισσότερων φαινομένων στη μοριακή δυναμική και στη μελέτη των αλληλεπιδράσεων ηλεκτρικού πεδίου υπάρχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον. Λόγω των πολύπλοκων υπολογισμών δεν υπάρχει ακόμη κάποιος ικανοποιητικός τρόπος υπολογισμού των δυναμικών ενεργειών και μόνο προσεγγίσεις προσπαθούν να δώσουν λύση οι οποίες είναι όμως περιορισμένων δυνατοτήτων (Beredsen, 1997). Οι κυριότερες από τις μεθόδους που αναπτύσσονται είναι:

- Μέθοδοι Διακοπών (Cut-off methods). Η χρήση μιας απότομης διακοπής της ακτίνας  $R$  του ηλεκτρικού πεδίου δίνει μια δυνατότητα για αξιολόγηση και υπολογισμό του. Η μέθοδος αυτή χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με τη μέθοδο Monte Carlo.
- Πεδίου αντιδράσεων (Interaction Fields)

$$E(r_i) = (4\pi\epsilon_0)^{-1} \sum_{\xi} q_j r_{ij} (r_{ij}^{-3} - r_c^{-3}) \quad (15)$$

- Συνεχών διορθώσεων (Continuum Corrections). Σε περιπτώσεις όπου το προσομοιωμένο σύστημα δεν είναι πολύπλοκο μπορούμε να κάνουμε συνεχείς διορθώσεις στον αλγόριθμο ώστε να έχουμε καλύτερη αντίδραση του μοντέλου.

- Ιεραρχικές μέθοδοι (Hierarchical Methods). Με τη μέθοδο αυτή δημιουργούμε ιεραρχικά ομάδες μορίων που αντιδρούν το ίδιο στην επίδραση δυνάμεων από άλλες ομάδες. Βελτιώνοντας ουσιαστικά την πολυπλοκότητα του μοντέλου.

## E. ΑΕΡΙΑ

Στα αέρια, οι αποστάσεις μεταξύ των μορίων είναι μεγάλες σε σχέση με το μέγεθος των μορίων και οι δυνάμεις μεταξύ τους πολύ μικρές. Γι αυτό το λόγο και δεν υπάρχει συγκεκριμένο σχήμα και όγκος για τα αέρια μιας και παίρνουν το σχήμα και τον όγκο του δοχείου που τα περιλαμβάνει. Τα μόρια των αερίων κινούνται συνεχώς και συγκρούονται με άλλα μόρια και με τα τοιχώματα του δοχείου, αν θεωρήσουμε ότι δεν επενεργούν πάνω τους δυνάμεις πεδίου. Αυτό που πραγματικά συμβαίνει είναι ότι όταν δύο μόρια βρεθούν πολύ κοντά αναπτύσσονται πάνω τους απωστικές δυνάμεις λόγω των μαγνητικών ή ηλεκτρικών φορτίων τους, έτσι μοιάζει σαν να έχουμε σύγκρουση ανάμεσα στα δυο μόρια. Η κίνηση των μορίων του αερίου, μεταξύ δύο συγκρούσεων, είναι ευθύγραμμη ομαλή, οι ταχύτητες με τις οποίες κινούνται είναι της τάξης των 450 m/sec ή 1600 χιλιομέτρων την ώρα για αέριο με σχετικά ελαφρά μόρια με μάζα  $m \approx 10^{-23}$  gr.

### 1) ΙΔΑΝΙΚΑ ΑΕΡΙΑ

Ο αριθμός των μορίων κάποιου αερίου είναι μεγάλος και η απόσταση που τα χωρίζει υπό ατμοσφαιρική πίεση είναι μεγάλη συγκρινόμενη με το μέγεθος των μορίων. Αυτό σημαίνει ότι τα μόρια καταλαμβάνουν έναν αμελητέο όγκο στο δοχείο που βρίσκονται, ο περισσότερος χώρος είναι κενός ανάμεσα στα μόρια. Μια βασική επιστημονική υπόθεση που έχει γίνει προκειμένου να μελετηθεί η συμπεριφορά των αερίων είναι η υπόθεση του ιδανικού αερίου. Ιδανικά αέρια ονομάζονται αυτά που παρουσιάζουν την ακόλουθη συμπεριφορά:

- Τα μόρια ακολουθούν Νευτώνια κίνηση συγκρουόμενα με άλλα μόρια και με τα τοιχώματα του δοχείου.
- Δεν εμφανίζουν κυματική συμπεριφορά όπως περιγράφει η Κβαντική Μηχανική.
- Τα μόρια κινούνται τυχαία προς οποιαδήποτε κατεύθυνση.
- Η κατανομή των διαφορετικών ταχυτήτων που αναπτύσσουν είναι ομοιόμορφη. Με τα μόρια να κινούνται τότε με μεγάλη ταχύτητα και τότε με πολύ μικρή.
- Δεν ασκούνται στα μόρια πεδιακές δυνάμεις.
- Αντιδρούν απόλυτα ελαστικά όταν συγκρούονται με άλλα μόρια.
- Αντιδρούν απόλυτα ελαστικά όταν συγκρούονται με τα τοιχώματα του δοχείου.

- Τα μόρια του αερίου είναι όλα ίδια, το αέριο δηλαδή που μελετάμε είναι καθαρό και δεν περιέχει άλλες ουσίες.

Είναι γνωστό από τη Θερμοδυναμική (Serway, 2003) ότι ένα ιδανικό αέριο μπορεί να περιγράφει μακροσκοπικά από τρεις ιδιότητες, τη πίεση ( $p$ ), τη θερμοκρασία ( $T$ ) και τον όγκο ( $V$ ) του αερίου. Η «Καταστατική Εξίσωση των Αερίων» μας δίνει ότι:

$$pV = nRT = \text{σταθ.} \quad (16)$$

$$pV = NkT = \text{σταθ.} \quad (17)$$

- $R$ : η σταθερά των ιδανικών αερίων,
- $n$ : ο αριθμός των mole,
- $N$ : ο συνολικός αριθμός των μορίων,
- $k$ : η σταθερά Boltzmann.

Ισχύει ότι ο αριθμός των mole προκύπτει από τις σχέσεις:

$$n = \frac{m}{M} \quad (18)$$

$$n = \frac{N}{N_A} \quad (19)$$

- $m$ : η μάζα του αερίου
- $M$ : γραμμομοριακή μάζα
- $N_A$ : ο αριθμός των μορίων ανά mol (σταθερά Avogadro)

Η σταθερά Boltzmann ορίζεται ως το πηλίκο δύο άλλων σταθερών

$$k = \frac{R}{N_A} \quad (20)$$

Η πίεση ( $p$ ) που ασκούν τα μόρια συγκρουόμενα με τα τοιχώματα του δοχείου είναι:

$$p = \frac{1}{3} \rho \overline{v^2} \quad (21)$$

$$p = \frac{N m \overline{u^2}}{3V} \quad (22)$$

- $\rho$ : η πυκνότητα του αερίου



- $u$ : η ταχύτητα κίνησης των μορίων
- $V$ : ο όγκος του δοχείου που περιέχεται το αέριο.

Η ποσότητα  $\overline{u^2}$  ονομάζεται μέσο τετράγωνο της ταχύτητας και ορίζεται:

$$\overline{u^2} = \frac{\sum u_i^2}{N} \quad (23)$$

$$\overline{u^2} = \frac{3kT}{m} \quad (24)$$

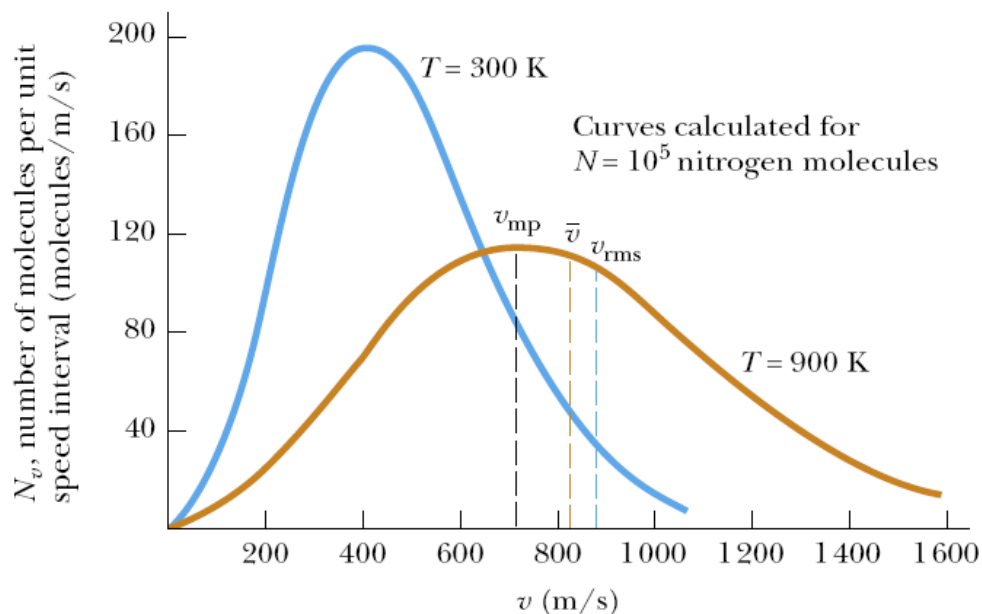
Μια πολύ χρήσιμη ποσότητα για τη μοριακή δυναμική των αερίων είναι η ενεργός ταχύτητα των μορίων ( $u_{\text{rms}}$ ), ορίζεται ως η τετραγωνική ρίζα της ποσότητας  $\overline{u^2}$  και προκύπτει από τη σχέση:

$$u_{\text{rms}} = \sqrt{\overline{u^2}} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \quad (25)$$

## 2) ΚΑΤΑΝΟΜΗ Maxwell – Boltzmann

Με δεδομένο ότι τα μόρια του αερίου συγκρούονται συνεχώς οπότε και αλλάζουν την ταχύτητα κινήσεώς τους μπορούμε να πούμε ότι οι ταχύτητες των μορίων ενός αερίου είναι ίδιες αλλά κατανέμονται σε μια περιοχή τιμών. Οι Maxwell – Boltzmann προσδιόρισαν την κατανομή των τιμών των ταχυτήτων θεωρητικά πριν ακόμα υπάρξει η δυνατότητα για πειραματικές μετρήσεις.

Στο παρακάτω διάγραμμα (Serway, 2003) παρουσιάζεται η κατανομή των ταχυτήτων του αζώτου για θερμοκρασία 300 °K και 900 °K.



Εικόνα 6. Η κατανομή των ταχυτήτων του αζώτου (Serway, 2003)

Μερικά συμπεράσματα που μπορούμε να εξαγωγήμε παρατηρώντας τις παραπάνω κατανομές είναι:

- η παραπάνω κατανομή προσομοιάζει της κανονικής αλλά έχει διαφορά στο ότι από τη δεξιά της πλευρά δεν τείνει ασυμπτωτικά στον άξονα των ταχυτήτων αλλά έχει σημείο εκκίνησης τη μηδενική ταχύτητα (0 μόρια με 0 ταχύτητα). Από την αριστερή πλευρά όμως παρουσιάζει μια ασυμπτωτική προσέγγιση. Αυτό σημαίνει ότι έστω και ελάχιστα μόρια υπάρχουν στο αέριο που κινούνται με πολύ μεγάλες ταχύτητες.
- η ταχύτητα  $u_{mp}$  έχει τη μεγαλύτερη πιθανότητα να εμφανιστεί

$$u_{mp} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \quad (26)$$

- η μέση ταχύτητα  $\bar{u}$  είναι σταθερά μεγαλύτερη από τη  $u_{mp}$  γιατί όπως ήδη αναφέραμε υπάρχουν έστω και ελάχιστα μόρια που κινούνται με πολύ μεγάλες ταχύτητες.
- μαθηματικά αποδεικνύεται ότι η ενεργός τιμή των ταχυτήτων  $u_{rms}$  είναι πάντα υψηλότερη από τη μέση  $\bar{u}$ . Έτσι προκύπτει ότι:

$$u_{mp} < \bar{u} < u_{rms} \quad (27)$$

- όταν η θερμοκρασία του αερίου αυξάνεται, η καμπύλη μετατοπίζεται προς τα δεξιά και η κορυφή της χαμηλώνει, μιας και πλέον έχουμε περισσότερα μόρια να κινούνται με μεγαλύτερες ταχύτητες ενώ πάλι οι χαμηλότερες ταχύτητες προσεγγίζουν το μηδέν.
- αποδεικνύεται ότι το εμβαδόν που περικλείεται από την καμπύλη και τον άξονα των  $v$  δίνει το συνολικό αριθμό των μορίων του αερίου.

Μια σημαντική παράμετρος που πρέπει να λαμβάνεται υπόψιν κατά το σχεδιασμό μοντέλων μοριακής δυναμικής αερίων και υγρών είναι το πώς αντιδρούν τα μόρια κατά την επαφή τους με τα τοιχώματα του δοχείου όπου βρίσκονται. Η παρακάτω σχέση περιγράφει τη δύναμη που αναπτύσσεται σε ένα μόριο όταν αυτό αντιδρά ελαστικά με τα τοιχώματα του δοχείου.

$$\bar{F} = \sum_{i=1}^N \frac{m u_{xi}^2}{d} \quad (28)$$

Όπου  $d$  η οριζόντια απόσταση μεταξύ των τοιχωμάτων του δοχείου.

3) *ΕΣΩΤΕΡΙΚΗ ΕΝΕΡΓΕΙΑ*

Η ενέργεια του κάθε μορίου μπορεί να είναι κινητική και δυναμική. Η κινητική ενέργεια ανάλογα με τη προσέγγιση της προσομοίωσης διακρίνεται σε μεταφορική, περιστροφική και ενέργεια από τη δόνηση του μορίου. Η μεταφορική ενέργεια προκύπτει από τη μετακίνηση των μορίων. Η περιστροφική από τη περιστροφή τους ή αλλιώς από το σπιν (spin). Από το σπιν των μορίων προέρχονται οι μαγνητικές και θερμικές ιδιότητες των στερεών υλικών. Η προσομοίωση των καταστάσεων που δημιουργούν τα σπιν των μορίων σε ένα πλέγμα μορίων γίνεται με το πρότυπο Ising το οποίο θα εξετάσουμε σε επόμενη παράγραφο. Η δόνηση των μορίων προκύπτει από εσωτερικές δυνάμεις στο κάθε μόριο, από τη δυναμική ανάμεσα στα άτομα του μορίου. Επίσης αν υπάρχουν πεδιακές δυνάμεις που ασκούνται στα μόρια του αερίου η ενέργεια αυτή ονομάζεται δυναμική (potential energy) και εξαρτάται από τη θέση του μορίου. Η συνολική εσωτερική ενέργεια του αερίου δίνεται από τη Χαμιλτονιανή (Hamiltonian) του συστήματος και είναι το άθροισμα των κινητικών και δυναμικών ενεργειών των μορίων (Pang, 2006):

$$H = E_k + E_p = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{i>j=1}^N V(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N U_{ext}(r_i) \quad (29)$$

$E_k$ : κινητική ενέργεια

$E_p$ : δυναμική ενέργεια

$p_i$ : ορμή κάθε μορίου

$m_i$ : μάζα κάθε μορίου

$r_i$ : τελεστής θέσης κάθε μορίου

$V(r_{ij})$ : ενέργεια αλληλεπίδρασης των μορίων

$U(r_i)$ : δυναμική ενέργεια κάθε μορίου

Σύμφωνα με τις αρχές που διατύπωσε ο Χάμιλτον για την παραπάνω εξίσωση ισχύει ότι το διάνυσμα θέσης και η ορμή ικανοποιεί τις παρακάτω εξισώσεις:

$$\dot{r}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m_i} \quad (30)$$

$$p_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (31)$$

$F_i$ : ασκούμενη σε κάθε μόριο δύναμη.

Η ασκούμενη δύναμη σε κάθε μόριο αποδεικνύεται ότι προκύπτει από:

$$f_i = \nabla_i U_{ext}(r_i) - \sum_{i \neq j} \nabla_i V(r_{ij}) \quad (32)$$

Η μεταφορική κινητική ενέργεια κάθε μορίου χωρίς αυτό να δονείται ή να περιστρέφεται δίνεται από:

$$E = E_m = \frac{1}{2} m u^2 \quad (33)$$

$$U = \frac{3}{2} n R T \quad (34)$$

Η κινητική ενέργεια μορίου μάζας  $m$ , που κινείται με ταχύτητα  $u_x$  και δονείται με συντελεστή ελαστικότητας  $k$  και πλάτος δόνησης  $x$ , δίνεται από τη παρακάτω σχέση:

$$E = \frac{1}{2} m u_x^2 + \frac{1}{2} k x^2 \quad (35)$$

Ως μοντέλο που περιγράφει τη ταλάντωση του μορίου θεωρούμε δύο τουλάχιστον άτομα συνδεδεμένα μεταξύ τους με ένα φανταστικό ελατήριο. Ας σημειώσουμε ότι η δόνηση γίνεται χωρίς περιορισμούς προς οποιαδήποτε κατεύθυνση  $X, Y, Z$  χωρίς να επηρεάζεται η παραπάνω σχέση.

Η περιστροφική ενέργεια (Rotational Energy) μορίου που περιστρέφεται χωρίς περιορισμούς ως προς τον άξονα περιστροφής  $X, Y, Z$  είναι:

$$E_R = \frac{1}{2} I \omega^2 \quad (36)$$

$I$ : η αδράνεια του μορίου

$\omega$ : η γωνιακή του ταχύτητα.

Σημειώνουμε ότι το μόριο θα πρέπει να έχει ομοιόμορφη κατανομή της μάζας του, σφαιροειδές σχήμα και κέντρο βάρους ίδιο με το κέντρο της σφαίρας.

Από τα παραπάνω προκύπτει ότι η συνολική κινητική ενέργεια ενός αερίου  $N$  μορίων εκφράζεται από:

$$U = \sum_i^N E_{mi} + E_{ri} + E_{vi} = \sum_i^N \frac{1}{2} m_i u_i^2 + \frac{1}{2} k_i x_i^2 + \frac{1}{2} I_i \omega_i^2 \quad (37)$$

Όπως παρατηρούμε η συμπεριφορά των μορίων, που περιγράφεται από τη Νευτώνεια προσέγγιση της παραπάνω σχέσης (Εξ. 34) εκφράζεται από τη μάζα, την ταχύτητα, την ελαστικότητα της δόνησης, την αδράνεια και τη γωνιακή ταχύτητα της περιστροφής. Δεδομένα που μπορούν εύκολα να υπολογιστούν κατά τη προσομοίωση και να χρησιμοποιηθούν για περαιτέρω επεξεργασία.

Εκφραζόμενη με θερμοδυναμικά δεδομένα για το ίδιο αέριο η συνολική εσωτερική ενέργεια προκύπτει από:

$$E_{\text{int}} = 3N\left(\frac{1}{2}kT\right) + 2N\left(\frac{1}{2}kT\right) + 2N\left(\frac{1}{2}kT\right) = \frac{7}{2}NkT = \frac{7}{2}nRT \quad (38)$$

#### 4) ΚΒΑΝΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ

Σύμφωνα με τη Κβαντική μηχανική όμως, η συμπεριφορά των ατόμων και των μορίων μπορεί να περιγραφεί από τη κυματική, μιας και τα σωματίδια αυτά παρουσιάζουν εκτός από σωματιδιακή και κυματική συμπεριφορά. Τα κύματα αυτά παρουσιάζουν κβαντωμένα χαρακτηριστικά όπως η συχνότητά τους, η οποία μπορεί να πάρει μόνο διακριτές τιμές. Με την κβαντική θεωρία η εσωτερική ενέργεια ενός συστήματος, όπως και αυτά που μελετάμε εδώ είναι ανάλογη της κβαντωμένης συχνότητας. Έτσι η ενέργεια των ατόμων και των μορίων είναι κβαντωμένη, δηλαδή να πάρουν μόνο διακριτές τιμές. Για τα μόρια η κβαντική φυσική μας λέει ότι η περιστροφική ενέργεια και η ενέργεια από τις δονήσεις είναι κβαντωμένες (Serway, 2003).

Σύμφωνα με τη κβαντική μηχανική η τιμή της Χαμιλτονιανής για ένα σύστημα με  $N$  μόρια είναι (Hjorth-Jensen, 2004):

$$\langle H \rangle = \frac{\int dR_1 dR_2 \dots dR_N \psi(R_1, R_2, \dots, R_N) H(R_1, R_2, \dots, R_N) \psi(R_1, R_2, \dots, R_N)}{\int dR_1 dR_2 \dots dR_N \psi(R_1, R_2, \dots, R_N) \psi(R_1, R_2, \dots, R_N)} \quad (39)$$

$\psi$ : η κυματοσυνάρτηση που ορίζει την πιθανότητα να βρεθεί σε μια θέση το μόριο.

Για τη δημιουργία μοντέλων μοριακής δυναμικής με βάση την κβαντική θεωρία έχουν αναπτυχθεί αρκετοί αλγόριθμοι με ισχυρότερους τον αλγόριθμο Verlet και τις παραλλαγές του όπως velocity-Verlet και leap-frog (Beradsen, 1997). Οι παρακάτω σχέσεις περιγράφουν τον αλγόριθμο velocity-Verlet:

$$r(t + \delta t) = r(t) + v(t)\delta t + \frac{1}{2}a(t)\delta t^2 \quad (40)$$

$$v(t + \delta t) = v(t) + \frac{1}{2}[a(t) + a(t + \delta t)](\delta t) \quad (41)$$

όπου  $r(t)$ : η θέση του μορίου

$v(t)$ : η ταχύτητα του μορίου

$a(t)$ : η επιτάχυνση του μορίου.

#### 5) ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΧΡΗΣΗ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΑΕΡΙΩΝ

«Δεν υπάρχει κάποια διαδικασία του φυσικού κόσμου, που να μην μπορεί να κατανοηθεί στο πλαίσιο ότι αυτός συγκροτείται από άτομα που συμπεριφέρονται με βάση τους φυσικούς νόμους» (Feynman et al, 1977, Ιμβριώτη & Καλκάνης, 2007). Όπως έχουμε ήδη αναφέρει τα μοντέλα της

μοριακής δυναμικής βρίσκουν εφαρμογή στην εκπαίδευση και μάλιστα με καλά αποτελέσματα. Η μοριακή δυναμική των αερίων μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση φαινομένων και διδακτικών αντικειμένων της φυσικής στο σχολείο και στο πανεπιστήμιο. Ενδεικτικά αναφέρουμε μερικά από τα αντικείμενα που μπορεί να χρησιμοποιηθεί:

- Έννοια της Πίεσης και της ατμοσφαιρικής πίεσης.
- Συμπιεστότητα αερίων.
- Νόμος του Μπερνούλι για αέρια.
- Συστολή διαστολή αερίων.
- Περιβαλλοντικά φαινόμενα όπως θερμοκρασιακές αναστροφές, κύκλος του οξυγόνου κτλ.
- Και κυρίως όλα τα αξιώματα της θερμοδυναμικής.

## F. ΥΓΡΑ

Τα μόρια του υγρού παρουσιάζουν την ίδια συμπεριφορά με αυτά του αερίου με τη διαφορά όμως ότι εδώ τα μόρια βρίσκονται πολύ πιο κοντά το ένα με το άλλο και κινούνται με μικρότερες ταχύτητες. Έτσι προκειμένου να δημιουργήσουμε μοντέλα μοριακής δυναμικής για υγρά ακολουθούμε την ίδια λογική με αυτή των αερίων.

- Τα μόρια είναι ελεύθερα να κινηθούν σε όλο το χώρο που καταλαμβάνει το υγρό.
- Αν κάποιο μόριο βρεθεί στη διαχωριστική επιφάνεια του υγρού με τον αέρα, με ταχύτητα μεγαλύτερη από μια κρίσιμη τιμή, τότε ξεφεύγει από τη μάζα των μορίων του υγρού στο περιβάλλον του αέρα, φαινόμενο της εξάτμισης.
- Τα μόρια έχουν κινητική ενέργεια υπό τη μορφή μεταφορικής, περιστροφικής ενέργειας και ενέργειας δόνησης και άρα κινούνται ανάλογα.
- Τα μόρια είναι υπό την επίδραση βαρυτικών, ηλεκτρικών και μαγνητικών πεδίων άρα υπάρχει μια δυναμική ενέργεια των μορίων λόγω της θέσης τους.
- Ο υπολογισμός της εσωτερικής ενέργειας γίνεται από την Χαμιλτονιανή του συστήματος (Εξ.29).
- Οι δυνάμεις που ασκούνται στα μόρια από τα άλλα μόρια είναι στην περίπτωση των υγρών μεγαλύτερες από αυτές στα αέρια.

1) ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΧΡΗΣΗ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΥΓΡΩΝ

Τα διδακτικά αντικείμενα όπου μπορούν μοντέλα μοριακής δυναμικής υγρών να χρησιμοποιηθούν προέρχονται κυρίως από το χώρο της φυσικής για το σχολείο και στα διδακτικά αντικείμενα πανεπιστημιακού επιπέδου που εμπλέκονται με τη φυσική ρευστών.

- Εξάτμιση
- Κύκλος του νερού
- Διάλυση, Δύλιση, Διήθηση
- Άνωση
- Υδραυλική
- Θερμικές ιδιότητες υγρών
- Χημικά φαινόμενα
- Ηλεκτρολύτες

## Γ. ΣΤΕΡΕΑ

Στα στερεά υπάρχει σημαντική διαφορά σε σχέση με τα μοντέλα μοριακής δυναμικής που εξετάσαμε μέχρι τώρα. Τα μόρια βρίσκονται σε συγκεκριμένη θέση ή μάλλον περιοχή που κινούνται, ξεχωριστή για κάθε μόριο. Τα βασικά χαρακτηριστικά μοντέλων μοριακής δυναμικής στερεών είναι τα παρακάτω:

- Ταλαντώνονται γύρω από τη θέση ισορροπίας τους κατά τους τρεις άξονες X, Y, Z και περιστρέφονται κατά τον άξονά τους.
- Δεν μπορούν να κινηθούν από τη θέση τους και σε αυτό οφείλεται ότι έχουν συγκεκριμένο σχήμα, κάτι που δεν ισχύει για τα αέρια και τα υγρά.
- Η περιστροφή των μορίων (σπιν) προσδίδει μαγνητικές ιδιότητες στα υλικά.
- Οι δυνάμεις, απωστικές και ελκτικές, που ασκούνται ανάμεσα στα μόρια είναι πολύ μεγαλύτερες από ότι στα υγρά και τα αέρια και προκαλούν τη συνοχή των μορίων.
- Η συνοχή των μορίων είναι η αιτία που προκαλεί τις ξεχωριστές μηχανικές ιδιότητες κάθε υλικού.

1) ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΧΡΗΣΗ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΣΤΕΡΕΩΝ

Τα μοντέλα μοριακής δυναμικής για στερεά μπορεί να χρησιμοποιηθούν κατά τη διδασκαλία των ακόλουθων διδακτικών αντικειμένων:

- Συστολή, διαστολή
- Μαγνητικές ιδιότητες
- Ηλεκτρικές ιδιότητες μονωτές, αγωγοί, ημιαγωγοί
- Θερμικές ιδιότητες
- Χημικές αντιδράσεις



## ν. MONTE CARLO

### Α. ΓΕΝΙΚΑ

Η μέθοδος Monte Carlo (M.C.) χρησιμοποιείται σε πλήθος περιπτώσεων όπου η αναλυτική λύση είναι δύσκολη ή αδύνατη, από τον υπολογισμό ολοκληρωμάτων στην επίλυση προβλημάτων σε φυσική, χημεία, βιολογία, πρόβλεψη οικονομικών συμπεριφορών, μακροχρόνια πρόβλεψη καιρικών φαινομένων ενώ τη τελευταία εικοσαετία χρησιμοποιείται και για την επίδραση κοινωνικών μελετών καθώς και τη περιγραφή διαδικασιών μάθησης (Ψυχάρης κ.ά, 2006). Η μέθοδος MC χρησιμοποιείται από την εμφάνιση των υπολογιστών για την στοχαστική προσομοίωση φυσικών συστημάτων. Η μέθοδος περιγράφεται ως αριθμητική ή στατιστική μέθοδος προσομοίωσης, όπου ως στατιστική μέθοδος προσομοίωσης ορίζεται γενικά κάθε μέθοδος προσομοίωσης που στηρίζεται σε κάποιο αλγόριθμο και χρησιμοποιεί ακολουθίες από τυχαίους αριθμούς, (Hjorth-Jensen, 2006).

Η μέθοδος έλκει την καταγωγή της από την δεκαετία του 1950 όταν οι πρώτοι υπολογιστές έκαναν την εμφάνισή τους. Αναπτύχθηκε από τους von Neumann, Ulam και Metropolis (Neuman & Ulam, 1945, Metropolis & Ulam, 1949) εργαζόμενοι στο πρόγραμμα Manhattan για το σχεδιασμό Ατομικής Βόμβας, κατά το τέλος του δεύτερου παγκοσμίου πολέμου. Στην εργασία (Metropolis et al, 1953) «Equation of state calculations by fast computing machines» των Metropolis, Rosenbluth A., Rosenbluth M. και Teller, αναφέρεται για πρώτη φορά η επινόηση της μεθόδου προσομοιώσεων στατιστικής φυσικής, Monte Carlo, για σύνθετα συστήματα, όπου δεν μπορεί να υπάρξει αναλυτική λύση.

Σημαντικό τμήμα της μεθόδου είναι ο αλγόριθμος Metropolis που χρησιμοποιείται ακόμα και έχει αναγορευθεί ως ένας από τους δέκα σημαντικότερους αλγόριθμους του 20<sup>ου</sup> αιώνα από το περιοδικό Computing in Science and Engineering (Dongarra et al, 2000). Ο αλγόριθμος Metropolis ανήκει στην τεχνική της Σημαντικής ή Ανομοιόμορφης Δειγματοληψίας (Importance Sampling), η οποία έδωσε περαιτέρω αξία και πρακτική χρησιμότητα στη μέθοδο Monte Carlo.

Ένα φυσικό σύστημα δεν μπορεί να εκφραστεί ικανοποιητικά με μαθηματική ανάλυση της συμπεριφοράς του. Τα φυσικά συστήματα είναι τόσο πολύπλοκα που δεν μπορεί να γίνει αναλυτική περιγραφή τους ώστε να προσομοιωθούν με κλασικές υπολογιστικές μεθόδους. Για παράδειγμα στις περιπτώσεις που αυτό είναι δυνατό απαιτούνται πάρα πολλές πηγές δεδομένων που θα χρησιμοποιηθούν για τις υπολογιστικές εφαρμογές, ενώ και πληροφορίες που προέρχονται από στατιστική ανάλυση μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον προσδιορισμό του προβλήματος. Αυτό ισχύει ειδικότερα όταν τα αποτελέσματα των μετρήσεων δεν επαρκούν για τη διατύπωση και λύση του προβλήματος της προσομοίωσης (Barnet, 2005). Έτσι πέρα από τις πολλές πηγές πληροφοριών που καλούμαστε να επεξεργαστούμε δεν είναι σίγουρο ότι το αποτέλεσμα θα είναι αξιόπιστο.

Για παράδειγμα δοχείο χωρητικότητας ενός λίτρου που περιέχει ένα τυπικό αέριο, περιέχει κατά προσέγγιση  $10^{22}$  μόρια. Με ένα τυπικό ρυθμό συγκρούσεων  $10^9$  ανά δευτερόλεπτο, έχουμε  $10^{31}$  αλλαγές καταστάσεων ανά δευτερόλεπτο (Αναγνωστόπουλος, 2006). Με αυτά τα δεδομένα θα πρέπει ο H/Y, που θα επεξεργαστεί μια τέτοια προσομοίωση ενός δευτερολέπτου, έχοντας ταχύτητα επεξεργαστή 10 GHz! να εργαστεί για  $10^{21}$ sec, δηλαδή για  $31,7 \times 10^{12}$  χρόνια, περίπου 32 τρισεκατομμύρια χρόνια όταν η ηλικία του σύμπαντος σύμφωνα με εκτιμήσεις είναι 12,5 δισεκατομμύρια χρόνια.

Η βασική ιδέα της μεθόδου είναι ότι «προσδίδει» τυχαίους αριθμούς στο σύστημα των διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν το προσομοιωμένο φυσικό σύστημα, απ' όπου παράγονται με τη σειρά τους τυχαίες καταστάσεις και «οδηγούν» την προσομοίωση. Η συλλογή των τιμών που προκύπτουν ως αποτέλεσμα από τις τυχαίες καταστάσεις που δημιουργεί η μέθοδος και η στατιστική ανάλυσή τους, παράγει τα δεδομένα της προσομοιωμένης συμπεριφοράς του φυσικού συστήματος (Pang, 2006).

Ο τρόπος που δομείται μια προσομοίωση με χρήση της MC καθώς και η παραγωγή των αποτελεσμάτων, την έχουν διεθνώς καταστήσει ως μια από τις βέλτιστες μεθόδους για τη λειτουργία μιας προσομοίωσης, που οδηγείται από τα γεγονότα ή από το χρόνο. Σε κάθε περίπτωση ο τρόπος προγραμματισμού δεν μπορεί να είναι άλλος από τον προγραμματισμό που βασίζεται σε γεγονότα.

Τουλάχιστον τέσσερα είναι τα βασικά συστατικά της μεθόδου τα οποία και είναι κρίσιμα για την κατανόηση και σωστή χρήση της μεθόδου (Hjorth-Jensen, 2006):

- Δημιουργία τυχαίων μεταβλητών.
- Δημιουργία Στατιστικής Κατανομής των τιμών των τυχαίων μεταβλητών (probability distribution functions PDF)
- Εφαρμογή των τυχαίων μεταβλητών στο μαθηματικό μοντέλο.
- Λήψη δεδομένων

Πιο αναλυτικά τα βήματα που ακολουθούμε περιγράφονται παρακάτω:

- Ουσιαστικά έχουμε τη δημιουργία αριθμητικών πειραμάτων με τη χρήση τυχαίων αριθμών σε μία ή περισσότερες μεταβλητές. Η αρχή κάθε υπολογισμού για την προσομοίωση είναι η παραγωγή τυχαίων αριθμών που βασίζονται σε ομοιόμορφη κατανομή.
- Στη γενική περίπτωση οι τυχαίοι αριθμοί ακολουθούν ομοιόμορφη κατανομή, κατά περίπτωση χρησιμοποιείται διαφορετική κατανομή τυχαίων αριθμών (PDF). Στη συνέχεια γίνεται τροποποίηση της ομοιόμορφης κατανομής στην κατανομή που προσδιορίζει καλύτερα τις μεταβλητές του συστήματος.

- Αυτό ουσιαστικά γίνεται με τη δημιουργία κανόνων για την αποδοχή ή όχι του κάθε τυχαίου αποτελέσματος που παράγεται. Ο αλγόριθμος Metropolis περιγράφει αυτή ακριβώς τη διαδικασία.
- Στατιστική ανάλυση των αποτελεσμάτων για την εξαγωγή σημαντικών δεδομένων.
- Δημιουργία τεχνικών για αναγνώριση και βελτίωση ενδεχομένων λαθών της προσομοίωσης.

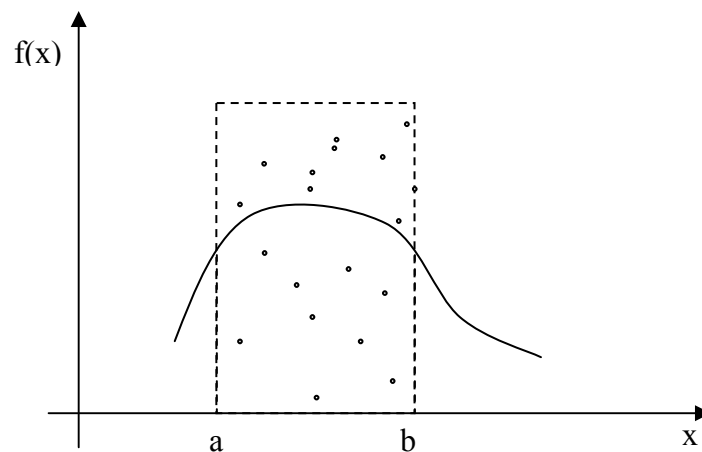
## B. ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ ΜΕ MONTE CARLO

Η μέθοδος μπορεί να χρησιμοποιηθεί πρώτιστα για τον αριθμητικό υπολογισμό ολοκληρωμάτων (Hjorth-Jensen, 2006, Pang, 2006, Barnett, 2005, Tzoumanekas, 2003, Voulgarakis, 2002, Landau & Paez, 1997). Ενδείκνυται ιδιαίτερα για τον υπολογισμό ολοκληρωμάτων που απαιτούν αρκετά δύσκολους χειρισμούς στην επίλυσή τους.

Έστω ότι θέλουμε να υπολογίσουμε την τιμή του ολοκληρώματος:

$$S = \int_0^1 f(x)dx \quad (42)$$

Με γραφική παράσταση:



**Εικόνα 7.** Γραφική παράσταση της  $f(x)$

Ορίζουμε ένα παραλληλόγραμμο, που η πλευρά του αντιστοιχεί στα όρια ολοκλήρωσης  $a, b$ . Δίνοντας τυχαία σημεία με ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα  $[a, b]$  προκύπτει ότι από το πλήθος  $N$  συνολικών σημείων, τα  $N_s$  βρίσκονται στη περιοχή που ορίζει το εμβαδόν  $S$  του ορισμένου ολοκληρώματος.

Αν  $S_{sum}$  το εμβαδόν του παραλληλόγραμμου τότε αποδεικνύεται ότι:

$$S = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) S_{sum} \quad (43)$$

Το αποτέλεσμα από την παραπάνω σχέση περιέχει ένα σφάλμα σε σχέση με την πραγματική τιμή. Το πλήθος των τυχαίων σημείων είναι καθοριστικό για την ακρίβεια των αποτελεσμάτων καθώς και η ομοιόμορφη κατανομή των τυχαίων αριθμών. Γενικά ισχύει ότι όσα περισσότερα σημεία τόσο μεγαλύτερη ακρίβεια κατά τον υπολογισμό. Το τετράγωνο του σφάλματος δίνεται από την παρακάτω σχέση (Tzoumanekas, 2003):

$$\sigma_{I_N}^2 \approx \frac{1}{N} \sigma_f^2 = \frac{1}{N} \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i^2 - \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right)^2 \right] = \frac{1}{N} (\overline{f^2} - \bar{f}^2) \quad (44)$$

όπου  $\sigma_f^2$ : τυπική απόκλιση

και  $\bar{f}$ : η μέση τιμή.

### γ. ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ $\pi$

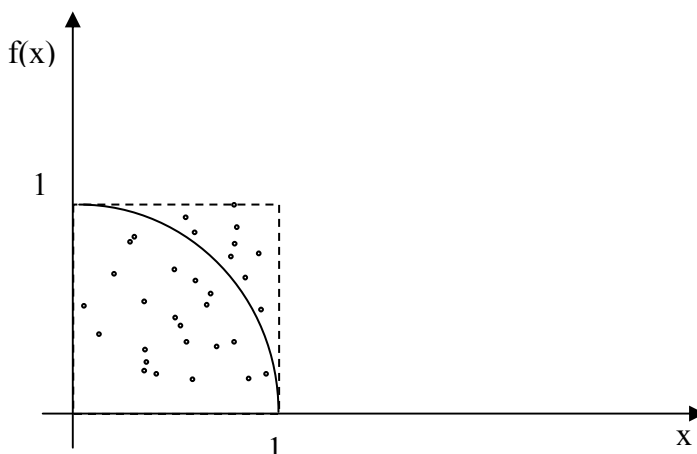
Με δεδομένο ότι με τη μέθοδο μπορούμε να υπολογίσουμε το εμβαδό μιας περιοχής που περικλείεται από μια συνάρτηση μπορούμε να υπολογίσουμε πειραματικά τον αριθμό  $\pi$ . Για να γίνει αυτό θεωρούμε μια περιοχή που περικλείεται από το ένα τέταρτο ενός κύκλου με μοναδιαία ακτίνα. Το εμβαδό του τμήματος αυτού είναι:

$$E = \frac{1}{4} \pi^2 \quad (45)$$

Επειδή η ακτίνα του κύκλου είναι μονάδα έχουμε:

$$\pi = 4E \quad (46)$$

Το μόνο που μένει είναι να υπολογίσουμε με τη μέθοδο Monte Carlo το εμβαδό του κυκλικού τμήματος διασπείροντας τυχαία σημεία με ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα  $[0,1]$ .



Μιας και το εμβαδόν του τετραγώνου είναι 1 το εμβαδόν του κυκλικού τμήματος:

$$E = \frac{N_K}{N} \quad (47)$$

με  $N$  το πλήθος των σημείων και  $N_K$  τα σημεία που βρίσκονται μέσα στο κυκλικό τμήμα.

#### D. ΑΝΟΜΟΙΟΜΟΡΦΗ ΔΕΙΓΜΑΤΟΛΗΨΙΑ (IMPORTANCE SAMPLING)

Όπως ήδη έχουμε δει, η ακρίβεια των προσδιορισμών με τη μέθοδο Monte Carlo εξαρτάται από το πλήθος των τυχαίων σημείων που προέρχονται από ομοιόμορφη κατανομή και χρησιμοποιούνται για να γίνει η μέτρηση. Όσα περισσότερα τυχαία σημεία έχουμε τόσο μεγαλύτερη είναι η ακρίβεια των μετρήσεων σύμφωνα με τη σχέση (Εξ. 44).

Όσο το δυνατόν όμως περισσότερα τυχαία σημεία χρησιμοποιούμε τόσο καθυστερεί και η εξέλιξη της μέτρησης ή προσομοίωσης. Ειδικά για προσομοιώσεις που χρησιμοποιούν αλγόριθμους με σύνθετους υπολογισμούς δεν μπορούμε να έχουμε την εξέταση παρά μόνο συγκεκριμένου πεπερασμένου αριθμού τυχαίων καταστάσεων προκειμένου να προχωρήσει η εκτέλεση του προγράμματος στο συγκεκριμένο χρονικό πλαίσιο που έχουμε ορίσει. Όπως καταλαβαίνουμε η υπολογιστική δύναμη του Η/Υ που έχουμε στη διάθεσή μας είναι κεντρικό ζήτημα για την προσομοίωση.

Πέρα από την υπολογιστική δύναμη η οποία είναι συγκεκριμένη και δεν μπορούμε να κάνουμε πολλά για την βελτίωσή της, κεντρικό ζήτημα της προσομοίωσης είναι η κατανομή των τυχαίων αριθμών. Κατά τη διάρκεια μιας προσομοίωσης Monte Carlo με τυχαίους αριθμούς που παράγονται από ομοιόμορφη κατανομή θα έχουμε αρκετά σημεία – αποτελέσματα, που η συνεισφορά τους στο τελικό αποτέλεσμα θα είναι μηδαμινή και άλλα με σημαντική συνεισφορά. Στη προσπάθεια υπολογισμού ολοκληρωμάτων είναι προφανές ότι τα σημεία που είναι κοντά στην καμπύλη της συνάρτησης έχουν πολύ μεγαλύτερη συνεισφορά στο τελικό αποτέλεσμα, ιδίως αν η συνάρτηση έχει έντονες αιχμές τα σημεία που είναι κοντά στις αιχμές παρουσιάζουν αυξημένη σημαντικότητα μιας και αποτυπώνουν το σχήμα της γραφικής παράστασης και έτσι μειώνουν σημαντικά το σφάλμα από τη μέτρηση.

Έτσι έχουμε πολύ καλύτερα αποτελέσματα και πολύ λιγότερους τυχαίους αριθμούς αν αντί για ομοιόμορφη κατανομή προσαρμόσουμε την κατανομή των τυχαίων αριθμών σε μια κατανομή που μας βολεύει ή περιορίσουμε τους υπολογισμούς που θα εκτελεί το πρόγραμμα μόνο σε αυτούς που συνεισφέρουν. Η μέθοδος αυτή ονομάζεται «Ανομοιόμορφη Δειγματοληψία – Importance Sampling» (Hjorth-Jensen, 2006, Pang, 2006, Barnett, 2005, Tzoumanekas, 2003, Voulgarakis, 2002, Landau & Paez, 1997).

Σε προηγούμενο Κεφ. έχουμε αναφερθεί εκτενώς στις βασικές κατανομές που μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε και πώς να παράγουμε απ' αυτές τυχαίους αριθμούς. Μέθοδοι Importance Sampling που χρησιμοποιούνται στις προσομοιώσεις Monte Carlo είναι διαδικασίες Markov ή αλυσίδες Markov. Ως Μαρκοβιανή διαδικασία λογίζεται και ο αλγόριθμος Metropolis (Tzoumanekas, 2003, Landau & Paez, 1997).

## Ε. ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ MARKOV (Markov Chain)

Σύμφωνα με τις αρχές του Importance Sampling προκειμένου να κάνουμε μια προσομοίωση να «τρέχει» πιο γρήγορα αλλά και να είναι πιο αξιόπιστη χρειαζόμαστε μια προσαρμοσμένη κατανομή στο δείγμα των τυχαίων αριθμών ή ο αλγόριθμος που θα κάνει τους υπολογισμούς για την προσομοίωσή μας να επιλέγει μόνο τους «χρήσιμους» αριθμούς από τους τυχαίους και να απορρίπτει τους άλλους.

Ο δεύτερος τρόπος έχει αρκετά μειονεκτήματα σε σχέση με τον χρόνο εκτέλεσης του προγράμματος μιας και πρέπει να περιμένουμε να βρεθούν οι σωστοί αριθμοί για να προχωρήσει η προσομοίωση. Ιδιαίτερα αν η χρήσιμη κατανομή είναι ιδιόμορφη σε σχέση με την ομοιόμορφη, τότε η πιθανότητα να βρούμε χρήσιμο αριθμό λιγοστεύει και θα έχουμε ελάχιστη πιθανότητα η κατάσταση να γίνει δεκτή από τον αλγόριθμο.

Προκειμένου να δημιουργήσουμε το επιθυμητό δείγμα αριθμών, χρησιμοποιούμε μια διαδικασία Markov. Η διαδικασία αυτή εκμεταλλεύεται την τελευταία τιμή του συστήματος για να δημιουργήσει την επόμενη. Έτσι αν το σύστημα επεξεργάζεται την τιμή  $\kappa$  με τη διαδικασία Markov θα δημιουργηθεί στοχαστικά, η επόμενη τιμή  $\lambda$  και ακολούθως από αυτή η επόμενη τιμή.

$$\kappa_0 \rightarrow \kappa_1 \rightarrow \kappa_2 \rightarrow \dots \rightarrow \kappa_\mu \quad (48)$$

Με αυτό τον τρόπο δημιουργείται το ζητούμενο δείγμα  $\{\kappa_0, \kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_\mu\}$ .

Η πιθανότητα μετάβασης από την αρχική τιμή  $\kappa$  στην επόμενη τιμή θα πρέπει να ικανοποιεί τις παρακάτω καταστάσεις:

- Να μην επηρεάζεται από το χρόνο προσομοίωσης.
- Να εξαρτάται μόνο από τη προηγούμενη κατάσταση  $\kappa$  και την επόμενη  $\lambda$  και όχι από τη διαδρομή που ακολουθήθηκε μέχρι το  $\kappa$ .
- Να ικανοποιείται η σχέση (Εξ. 48) με το άθροισμα των πιθανοτήτων μετάβασης να είναι ίσο με τη μονάδα:

$$\sum_v P(\mu \rightarrow v) = 1 \quad (49)$$

- Για  $t \rightarrow \infty$  το δείγμα πρέπει να ακολουθεί την ζητούμενη κατανομή  $P_{\kappa}$ .

Προκειμένου να χρησιμοποιήσουμε μια διαδικασία Markov σε μια προσομοίωση Monte Carlo θα είναι σημαντικό να λάβουμε υπόψιν τις παρακάτω προϋποθέσεις (Αναγνωστόπουλος, 2005):

- Σημαντικό κομμάτι της προσομοίωσης είναι η αρχική κατάσταση  $\kappa_0$ , η οποία θα πρέπει να ληφθεί με τέτοιο τρόπο ώστε να βρεθεί το σύστημα άμεσα στο χώρο δειγματοληψίας της διαδικασίας Markov και να μην περάσει πολύτιμος χρόνος μέχρι να γίνει αυτό.
- Επίσης ο αλγόριθμος δημιουργίας της Markovιανής διαδικασίας θα πρέπει να επιλεγεί με τέτοιο τρόπο ώστε να παρέχει πιθανότητα μετάβασης  $P(\kappa \rightarrow \lambda)$  τέτοια, που να έχουμε το συντομότερο δυνατό σύγκλιση του δείγματος στην κατανομή  $P_{\kappa}$ , που μας δίνει και τη μόνιμη κατάσταση της προσομοίωσης.
- Μια ιδιότητα της Markovιανής διαδικασίας είναι η «Εργοδικότητα» της διαδικασίας. Με την έννοια Εργοδικότητα ορίζεται η ιδιότητα του αλγόριθμου μιας Markovιανής διαδικασίας, να προσδιορίζει κάθε επόμενη κατάσταση από μια προηγούμενη μέσα από μια συγκεκριμένη διαδικασία, πεπερασμένου αριθμού βημάτων (Tzoumanekas, 2003, Dongarra, 2000, Γκανάτσιου & Τζώρτζιος, 2005). Αν δεν ικανοποιείται η αρχή της Εργοδικότητας και έχουμε σημαντικές περιοχές του χώρου των καταστάσεων για τις οποίες δεν μπορούμε να πάρουμε τιμές, τότε η προσομοίωση είναι καταδικασμένη σε αποτυχία.
- Επίσης κριτήριο για την επιτυχία της διαδικασίας Markov είναι η «Συνθήκη Ισορροπίας». Με αυτή τη συνθήκη εξασφαλίζεται ότι όταν σταθεροποιηθεί η διαδικασία και φτάσει στην επιθυμητή κατανομή το δείγμα, η κατανομή αυτή δε επηρεάζεται από το χρόνο.

## F. ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ METROPOLIS

Ο αλγόριθμος Metropolis (Metropolis et al, 1953), όπως και μια διαδικασία Markov δημιουργεί μια ακολουθία τυχαίων τιμών που ακολουθούν την επιθυμητή κατανομή, αν είναι δυνατόν να γίνει δειγματοληψία από το συγκεκριμένο χώρο των καταστάσεων που εργαζόμαστε.

Η μαθηματική περιγραφή του αλγόριθμου Metropolis είναι:

$$P(\kappa \rightarrow \lambda) = \begin{cases} 1, & \alpha\nu \quad \lambda \geq \kappa \\ \frac{\lambda}{\kappa} & \alpha\nu \quad \lambda < \kappa \end{cases} \quad (50)$$

Ο αλγόριθμος εργάζεται σε δύο επίπεδα προκειμένου να δημιουργήσει μια αλυσίδα τιμών.

- Στο πρώτο επίπεδο ξεκινώντας από μια αρχική τιμή  $\kappa_0$  δημιουργείται μια νέα τιμή  $\lambda$ .

- Η πιθανότητα επιλογής (Selection Probability) για τη δημιουργία της τιμής  $\lambda$  από την τιμή  $\kappa$  είναι η  $G(\kappa \rightarrow \lambda)$ .
- Η νέα τιμή που δημιουργήθηκε είναι μια «δοκιμαστική» (trial) τιμή και δεν έχει γίνει ακόμα μέρος της αλυσίδας Markov.
- Στο επόμενο επίπεδο, αν η δοκιμαστική τιμή γίνει αποδεκτή γίνεται και μέρος της αλυσίδας Markov.
- Η πιθανότητα αποδοχής (Acceptance Probability) είναι η  $P_{acc}(\kappa \rightarrow \lambda)$  για τη τιμή  $\lambda$  που θα γίνει αποδεκτή.
- Αν απορριφθεί η  $\lambda$ , τότε η επόμενη τιμή στην αλυσίδα Markov θα είναι η προηγούμενη τιμή  $\kappa$ .
- Η διαδικασία επαναλαμβάνεται κάθε φορά από την τελευταία τιμή της ακολουθίας.

Η πιθανότητα μετάβασης  $P(\kappa \rightarrow \lambda)$  στον αλγόριθμο Metropolis εκφράζεται ως το γινόμενο της πιθανότητας αποδοχής και της πιθανότητας επιλογής:

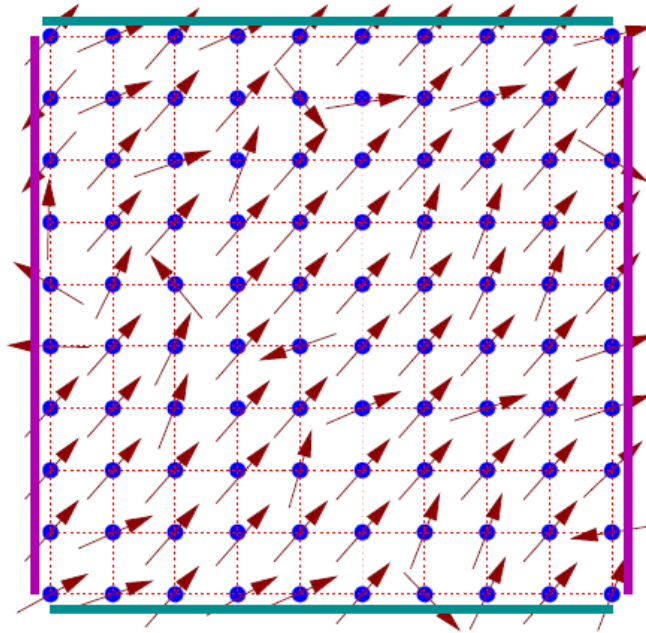
$$P(\kappa \rightarrow \lambda) = G(\kappa \rightarrow \lambda)P_{acc}(\kappa \rightarrow \lambda) \quad (51)$$

## G. MONTELO ISING

Προκειμένου να γίνει κατανοητός ο τρόπος λειτουργίας του αλγόριθμου Metropolis θα δώσουμε σε αυτό το σημείο τη μέθοδο επίλυσης του μοντέλου Ising με τη μέθοδο Importance Sampling Monte Carlo για την εφαρμογή της οποίας χρησιμοποιήθηκε ο αλγόριθμος Metropolis.

Το μοντέλο Ising (Ising, 1925) είναι ένα μοντέλο που χρησιμοποιείται από τη Στατιστική Φυσική για τη μελέτη ιδιοτήτων των υλικών. Είναι ένα πλεγματομοτέλο της δομής της ύλης ενός μαγνητικού υλικού και μέσα από αυτό μπορεί να μελετηθεί η συμπεριφορά της και να υπολογιστούν μεγέθη όπως η θερμοχωρητικότητα, η κρίσιμη θερμοκρασία, η επιδεκτικότητα και να μελετηθεί το φαινόμενο της μετάβασης φάσης. Το μοντέλο Ising διακρίνεται σε μονοδιάστατο και διδιάστατο. Το μονοδιάστατο πλεγματομοτέλο έχει επιλυθεί αναλυτικά (Ising, 1925) και δεν έχει δείξει μετατροπές φάσης. Το διδιάστατο μοντέλο έχει λυθεί αναλυτικά από τον Onsager (Onsager, 1944) για περιοδικές συνοριακές συνθήκες και χωρίς την επίδραση μαγνητικού πεδίου με μετατροπή φάσης δεύτερης τάξης (Αναγνωστόπουλος, 2006).





**Εικόνα 8.** Διδιάστατο μοντέλο Ising με τυχαίο προσανατολισμό μαγνήτισης (Αναγνωστόπουλος, 2006)

Οι προϋποθέσεις λειτουργίας του μοντέλου είναι:

- Θεωρούμε ότι τα μόρια του υλικού είναι τοποθετημένα σε πλέγμα με συντεταγμένες  $(i, j)$ .
- Κάθε μόριο διαθέτει σπιν που του προσδίδει μαγνητικές ιδιότητες. Σε υψηλές θερμοκρασίες δεν παρατηρείται συγκεκριμένος προσανατολισμός των μαγνητικών ιδιοτήτων χωρίς την επίδραση εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Σε αρκετά χαμηλές όμως, έχουμε αλληλεπίδραση των γειτονικών μορίων και παρατηρείται κάποιος προσανατολισμός.
- Χάρην απλοποίησης για σιδηρομαγνητικό υλικό θεωρείται ότι δύο είναι οι πιθανές τιμές των σπιν, προς τα πάνω και προς τα κάτω, με τιμές +1 και -1 αντίστοιχα.
- Επίσης πάλι για λόγους απλοποίησης των υπολογισμών λαμβάνουμε ως πιθανές αλληλεπιδράσεις μόνο αυτές των γειτονικών μορίων.

Η εσωτερική ενέργεια του μοντέλου δίνεται από τη Χαμιλτονιανή του συστήματος:

$$\langle H \rangle = -\mathcal{J}_{mn} \sum_{mn} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i \quad (52)$$

Με  $\mathcal{J}$  συμβολίζουμε τη σταθερά αλληλεπίδρασης που τείνει να ευθυγραμμίσει τα σπιν.

$\sigma_i, \sigma_j$ : τα σπιν στις πλεγματικές θέσεις με τιμές +1, -1.

$H$ : η ένταση του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.

nn: ο όρος αναφέρεται στην αλληλεπίδραση που συμμετέχουν μόνο οι εγγύτατες πλεγματικές θέσεις.

Στη περίπτωση που μελετάμε το μοντέλο Ising για μηδενικό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο ο δεύτερος όρος στην παραπάνω σχέση (Εξ. 52) απαλείφεται. Ο υπολογισμός της εσωτερικής ενέργειας του μοντέλου είναι πρωταρχικός προκειμένου να προχωρήσουμε σε συμπεράσματα σχετικά με τη συμπεριφορά του.

Σε μια προσομοίωση Monte Carlo θα πρέπει να δίνουμε συνεχώς τυχαίες τιμές στα σπιν των πλεγματικών θέσεων. Οι τυχαίες όμως τιμές των σπιν που θα προέρχονταν από ομοιόμορφη κατανομή θα καθυστερούσε σημαντικά την εξέλιξη της προσομοίωσης. Η καθυστέρηση αυτή γίνεται μεγαλύτερη όσο μεγαλώνουν οι διατάσεις του πλέγματος. Οι υπολογισμοί από τις τυχαίες πλεγματικές διαμορφώσεις θα είναι:

$$\langle A \rangle = \sum_n P_n A_n = \frac{\sum_n A_n e^{-E_n / kT}}{\sum_n e^{-E_n / kT}} \quad (53)$$

Η μέση τιμή του μεγέθους A καθορίζει τη συνεισφορά κάθε πλεγματικής διαμόρφωσης.

Εφαρμόζοντας τώρα τον αλγόριθμο του Metropolis οι τυχαίοι αριθμοί που εφαρμόζονται στο μοντέλο συσχετίζονται με την υπάρχουσα κατάσταση του μοντέλου και ανάλογα απορρίπτεται ή όχι η συνεισφορά τους. Τα βήματα που ακολουθούνται για την εφαρμογή του αλγόριθμου είναι (Hjorth-Jensen, 2006, Pang, 2006, Αναγνωστόπουλος, 2006, Barnet, 2005, Tzoumanekas, 2003, Voulgarakis, 2002):

- Δημιουργείται μια αρχική τυχαία πλεγματική διαμόρφωση με αρχική ενέργεια  $E_A$ .
- Επιλέγεται ένα σημείο του πλέγματος.
- Πραγματοποιώντας μια μεταβολή στην τιμή του σπιν αυτής της θέσης υπολογίζεται η  $E_T$
- Υπολογισμός της  $\Delta E = E_T - E_A$ .
- Αν  $\Delta E \leq 0$  διατηρείται η αλλαγή του σπιν.
- Αν  $\Delta E > 0$  γίνεται υπολογισμός της ποσότητας  $\omega = e^{-(\beta \Delta E)}$ .
- Παραγωγή ενός τυχαίου αριθμού  $r$ .
- Αν  $r \leq \omega$  διατηρείται η αλλαγή του σπιν, αλλιώς επιστρέφουμε στην πρώτη κατάσταση χωρίς να γίνει η αλλαγή.
- Υπολογισμός των θερμοδυναμικών μεγεθών για την μικροκατάσταση που έχει δημιουργηθεί.

ΒΑΣΙΛΗΣ Ι. ΤΑΤΣΗΣ

Εφαρμογές της Μεθόδου Monte Carlo και των Τεχνολογιών της Πληροφορίας και Επικοινωνίας στην  
Εκπαίδευση: Προσομοιώσεις στη Μοριακή Φυσική.

---

- Επανάληψη της διαδικασίας για επόμενο πλεγματο σημείο.
- Δημιουργία αρκετών μικροκαταστάσεων ώστε να μπορούν να εξαχθούν αποτελέσματα.

## VI. MATLAB – SIMULINK

### A. MATLAB

Το λογισμικό Matlab είναι ένα πακέτο εφαρμογών με κοινό χαρακτηριστικό τη μαθηματική διερεύνηση τεχνικών προβλημάτων. Αντλεί το όνομά του από τα αρχικά των λέξεων «MATrix – LABoratory», δεικνύοντας έτσι τη λειτουργία του με βάση την μαθηματική επεξεργασία δεδομένων σε πίνακες κατά τη γραμμική άλγεβρα και το τεχνικό προφίλ του λογισμικού όπου λειτουργεί σαν εικονικό εργαστήριο. Μερικές τυπικές εφαρμογές του λογισμικού είναι (Yuan-Bi Lai, 2002):

- Μοντελοποιήσεις και προσομοιώσεις. Το Matlab αποτελεί τεχνικό βοήθημα σε τεχνικές κατασκευές και χρησιμοποιείται κύρια για προσομοιώσεις από μηχανικούς όλων των κλάδων.
- Γραφικές παραστάσεις. Οι δυνατότητες γραφικής απεικόνισης είναι σπουδαίες και περιλαμβάνουν, απλές γραφικές παραστάσεις 2 αξόνων, 3 αξόνων, πολικών ή σφαιρικών συντεταγμένων.
- Το Matlab παρέχει γραφική απεικόνιση σε τρεις διαστάσεις και προσφέρεται για χρήση στην εκπαίδευση, ενώ υποστηρίζει προγραμματισμό αντικειμένων Εικονικής Πραγματικότητας (Virtual Reality Modelling Language, VRML) με το εργαλείο Virtual Reality Toolbox (Danielsen et al, 2004).
- Δημιουργία προγραμματιστικών εφαρμογών. Με βάση την ισχυρή «μηχανή» του λογισμικού για μαθηματικές εφαρμογές δίνει επιπλέον τη δυνατότητα αυτόνομου περιβάλλοντος για δημιουργία λογισμικού με GUI (Graphic User Interface).
- Δημιουργία αλγορίθμων. Σύνθετοι υπολογισμοί που δεν μπορούν να λυθούν με τις έτοιμες συναρτήσεις του, βρίσκουν λύση με ανάπτυξη αλγορίθμων από το χρήστη όπως και σε μια οποιαδήποτε γλώσσα, με τη διαφορά ότι το Matlab παρέχει πολλά μαθηματικά εργαλεία.
- Μαθηματικοί υπολογισμοί. Κύρια μαθηματικό εργαλείο δίνει λύσεις σε δύσκολα μαθηματικά προβλήματα.

Η φήμη του ως τεχνικό εργαλείο προέρχεται από τις μαθηματικές δυνατότητες τη γλώσσας προγραμματισμού Matlab. Μια γλώσσα χτισμένη στα πρότυπα των Fortran και C, αλλά με περισσότερα έτοιμα εργαλεία μαθηματικών. Ουσιαστικά το λογισμικό αυτό έχει πεδίο εφαρμογής όλη τη σύγχρονη τεχνική γνώση. Για το λόγο αυτό και η «γλώσσα» επικοινωνίας με το χρήστη είναι σε τεχνικό επίπεδο και απαιτεί ιδιαίτερες γνώσεις.

- Οι τελευταίες εκδόσεις του όμως παρουσιάζονται με ένα πολύ πιο ευχάριστο και εύχρηστο περιβάλλον.
- Λόγω της μεγάλης χρησιμότητάς του έχει διαδοθεί ευρέως και αποτελεί το πιο γνωστό τεχνολογικά λογισμικό. Είναι ένα γνωστό πρόγραμμα, εύκολο να βρεθεί, με συνεχή ανανέωση και υποστήριξη από την εκδότρια εταιρία.
- Δεν έχει ιδιαίτερες απαιτήσεις κατά την εγκατάστασή του παρά μόνο από μια απλή εγκατάσταση από το CD του και την άδεια χρήσης του προϊόντος.
- Περιέχει πάρα πολλές έτοιμες συναρτήσεις και εξειδικευμένες διαδικασίες που απαιτούνται σε προσομοιώσεις και μοντελοποιήσεις (Hanselman, 2001). Ακόμη περισσότερα έτοιμα πακέτα προσομοιώσεων υπάρχουν στο διαδίκτυο και στη ιστοσελίδα της εταιρίας MathWorks.
- Παρέχει τεράστιες δυνατότητες γραφικής απεικόνισης και έτοιμες συναρτήσεις που επιτρέπουν την απεικόνιση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων στη οθόνη του υπολογιστή (Hanselman, 2001).
- Υπάρχει πλήθος βιβλιογραφικών αναφορών και εφαρμογών αλλά και τεχνικής τεκμηρίωσης, που το καθιστά προσβάσιμο σε κάθε ενδιαφερόμενο.

Η γλώσσα Matlab αναφέρεται ως πανίσχυρη μηχανή επίλυσης μαθηματικών (Danielsen et al, 2004, Yuan-Bi Lai, 2002, Hanselman, 2001, The MathWorks, 1997). Προκειμένου να καλύψουν το μεγάλο αυτό πεδίο της τεχνολογίας, οι δημιουργοί του λογισμικού το χώρισαν σε 3 μέρη:

- τις τυπικές εφαρμογές όπου είναι ο «πυρήνας» του λογισμικού και που λειτουργεί ως γλώσσα προγραμματισμού. Όλες οι λειτουργίες του προγράμματος μπορούν να πραγματοποιηθούν με τη γλώσσα Matlab. Επίσης όλα τα βοηθητικά προγράμματα προκειμένου να εκτελέσουν τις λειτουργίες τους δημιουργούν κώδικα σε γλώσσα Matlab.
- τα βοηθητικά υποπρογράμματα που τα ονόμασαν «tools». Κάθε τέτοιο εργαλείο αναφέρετε σε ξεχωριστό τεχνολογικό πεδίο π.χ. «Control Systems», «Signal processing», κ.α..
- το λογισμικό Simulink, μια εφαρμογή γραφικού προγραμματισμού που διαθέτει όλες τις δυνατότητες του πυρήνα του Matlab, αλλά προσφέρεται σε γραφικό περιβάλλον δημιουργίας λογικών διαγραμμάτων.

Τα βοηθητικά εργαλεία έχουν δημιουργηθεί για να επιλύσουν τα ίδια τεχνικά προβλήματα με τη γλώσσα Matlab αλλά σε ένα πλέον εύχρηστο περιβάλλον:

- Απλό περιβάλλον χρήσης σε “windows”, φιλικό στο χρήστη.
- Βηματική εργασία για την κατασκευή των συστημάτων και εξαγωγή των αποτελεσμάτων.

- Αποτελέσματα αξιόπιστα ως προς τα φυσικά συστήματα. Αφού έχουν δημιουργηθεί για την επίλυση πραγματικών συστημάτων και όχι μόνο για εκπαιδευτικούς σκοπούς, είναι πάνω απ' όλα τεχνικά εργαλεία.
- Λόγω της μεταβλητότητας της συμπεριφοράς των φυσικών συστημάτων υπήρξε η ανάγκη για διαρκή έλεγχο των αποτελεσμάτων σε κάθε αλλαγή που προκαλεί ο χρήστης. Έτσι οι κατασκευαστές του λογισμικού ανέπτυξαν ένα εξαιρετικά διαδραστικό περιβάλλον με έμμεση παρουσίαση των αποτελεσμάτων. Δυνατότητα καθοριστική για τη δημιουργία αλληλεπιδραστικού μαθησιακού περιβάλλοντος στο σχολείο (Ράπτης και Ράπτη, 2002).
- Ο χρήστης έχει την ευκαιρία να κατασκευάσει πολλαπλές διαφοροποιημένες αναπαραστάσεις του ίδιου γνωστικού αντικειμένου, παράγοντας καθοριστικής σημασίας, διότι δίνει δυνατότητες έκφρασης των ιδιαιτεροτήτων των μαθητών (Dettori και Lemut, 1995).
- Παρά το ότι το αντικείμενα που πραγματεύονται αναλύονται από πολύπλοκα μαθηματικά, δεν απαιτούνται ιδιαίτερες γνώσεις μαθηματικών από το χρήστη παρά μόνο τις βασικές τεχνικές γνώσεις του αντικειμένου που πραγματεύονται

Το Matlab μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την υλοποίηση ασκήσεων σε μαθήματα ειδικότητας των ΤΕΕ και για το μάθημα της φυσικής (Ζιούβα και Φούζα, 2003) των μαθηματικών της βιολογίας, της γεωλογίας. Επίσης τα περισσότερα από τα εργαλεία του Matlab άπτονται εφαρμογών που διδάσκονται στα σχολεία και είναι εν δυνάμει εκπαιδευτικά εργαλεία.

## **B. ΤΟ ΕΡΓΑΛΕΙΟ MATLAB ΣΤΟ ΣΧΟΛΕΙΟ**

Ως τεχνικό εργαλείο το Matlab εφαρμόζεται στο μεγαλύτερο μέρος των φυσικών συστημάτων. Κατ' επέκταση μπορεί να χρησιμοποιηθεί και στο μεγαλύτερο μέρος των αντίστοιχων μαθημάτων. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί είτε για την επίλυση προβλημάτων Φυσικής, μηχανικής, ρευστομηχανικής, θερμοδυναμικής κτλ. είτε για προσομοιώσεις οπτικής, βιολογίας, χημικών αντιδράσεων, μοριακής δυναμικής υλικών, προβλημάτων τεχνικής μηχανικής (κάμψη, εφελκυσμός, θλίψη) και πολλά άλλα σύνθετα φυσικά φαινόμενα (Chen et al, 2001).

Λόγω της ευρείας χρήσης του σε πλήθος φυσικών διεργασιών μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε όλο το εύρος της εκπαίδευσης, από τη πρωτοβάθμια μέχρι και τη τριτοβάθμια εκπαίδευση. Είναι γεγονός ότι στη τριτοβάθμια εκπαίδευση το Matlab χρησιμοποιείται εκτενώς σε σχολές θετικών επιστημών ενώ η χρήση του σε χαμηλότερες βαθμίδες είναι ακόμη υπό ανάπτυξη. Η καθυστέρηση αυτή, της χρήσης του λογισμικού στη χώρα μας οφείλεται και στο γεγονός ότι δεν υπάρχει μεταφρασμένη στα ελληνικά έκδοση του, μιας και τα παιδιά μικρής ηλικίας στο σύνολό τους δεν έχουν ευχέρεια σε αγγλικό περιβάλλον εργασίας. Παρόλα αυτά τα παιδαγωγικά πλεονεκτήματα του Matlab είναι αρκετά και ως εκ τούτου είναι μεγάλη η προστιθέμενη παιδαγωγική του αξία. Έχουμε ένα άριστο τεχνικά και

μαθηματικά λογισμικό με σημαντική παιδαγωγική αξία αφού μπορεί να προσαρμοστεί και να γίνει χρήση των πλέον σύγχρονων διδακτικών μεθόδων. Τα γενικά παιδαγωγικά χαρακτηριστικά είναι:

- Το Matlab είναι ιδανικό για διδακτική χρήση σε συνεργατικά περιβάλλοντα (Yousuf et al, 2004). Εκτός από τα ισχυρά μαθηματικά εργαλεία που διαθέτει εύκολα μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την συλλογική και διαδραστική επίλυση προβλημάτων, προσφέροντας (Rodriguez et al, 2007):
  - έτοιμες συναρτήσεις ή μπλοκ (Simulink) με τα οποία μπορεί να γίνει η επίλυση των προβλημάτων εύκολα και με διαφορετικούς τρόπους.
  - γραφική κίνηση των προσομοιώσεων,
  - εισαγωγή δεδομένων και χειρισμό με το ποντίκι,
  - προσομοιώσεις μπορούν να εκτελούνται σε πραγματικό χρόνο
  - το περιβάλλον περιέχει επίσης καλά τεκμηριωμένες έτοιμες και εύκολα τροποποιήσιμες προσομοιώσεις.
- Με τη γραφική απεικόνιση του προβλήματος, ο χρήστης μπορεί να εκμεταλλευτεί την εκτενή παρουσίαση και τα τρισδιάστατα χαρακτηριστικά γνωρίσματα που παρέχονται. Αυτή η ικανότητα καθιστά το περιβάλλον εργασίας ιδανικό όσον αφορά τα μαθηματικά μοντέλα και τις προσομοιώσεις φυσικών διεργασιών (Rodriguez et al, 2007).
- Γενικά το Matlab παρέχει εναλλακτικές μεθόδους μοντελοποίησης και προσομοίωσης με τα διάφορα εργαλεία (tools), τις διάφορες έτοιμες συναρτήσεις και το γραφικό περιβάλλον δημιουργίας μοντέλων του Simulink. Έτσι ο εκπαιδευτικός διαθέτει ένα πλούσιο οπλοστάσιο διαφορετικών εργαλείων (Chen et al, 2001).
- Μια διάκριση που μπορεί να γίνει στα μαθηματικά λογισμικά είναι α) προγράμματα που εκτελούν κυρίως τους συμβολικούς χειρισμούς και β) τα προγράμματα που χρησιμοποιούνται για μεγάλους αριθμητικούς υπολογισμούς. Το Matlab παρέχει κορυφαίες συμβολικές (με γραφικά ή σύμβολα) και αριθμητικές ικανότητες (Motznik, 1996).
- Συστήματα προσομοίωσης πραγματικού χρόνου (real time), για τα οποία δεν συνηθίζεται η διδακτική χρήση μιας και έχουν μεγάλες απαιτήσεις, αλλά είναι ιδανικά για τη μελέτη μοντέλων που βασίζονται στη μελέτη αποτελεσμάτων και όχι του πραγματικού συστήματος που παράγει τα αποτελέσματα (Chen et al, 2001).
- Αρκετά σημαντικές είναι οι δυνατότητες αξιολόγησης που προσφέρει το λογισμικό:

- Εκτενή έλεγχο και παρακολούθηση των ενεργειών των μαθητών απ' όπου μπορούν εξαχθούν συμπεράσματα που αφορούν τη μαθησιακή ικανότητα και συμπεριφορά των μαθητών.
- Αξιολόγηση της απόδοσης των σπουδαστών σε κάθε βήμα επίλυσης προβλήματος, δίνοντας έτσι στιγμιαία ανατροφοδότηση και δίκαιη αξιολόγηση (Yousuf et al, 2004)
- Εκτενή στοιχεία μπορούν να συλλεχθούν για την απόδοση των σπουδαστών που οδηγεί στον καλύτερο προσδιορισμό των αδύνατων σημείων κάθε σπουδαστή και βοηθούν στην απόφαση του μελλοντικού προσδιορισμού των μαθημάτων.
- Τα μοντέλα που δημιουργούνται με το Simulink δίνουν τη δυνατότητα μετά από ανάλυση για την εξαγωγή συμπερασμάτων σχετικά με γνωσιακό επίπεδο, της μεταγνωστικές δεξιότητες ακόμα και για ψυχολογικά χαρακτηριστικά των μαθητών. Το περιβάλλον εργασίας είναι ένα πολύτιμο εργαλείο για την εξαγωγή συμπερασμάτων σχετικά με την εκπαίδευση και αξιολόγηση των μαθητών και ως εκ τούτου για την έρευνα της επίδρασης του λογισμικού στη μαθητική συμπεριφορά (Rodriguez et al, 2007).

Ο εκπαιδευτικός προκειμένου να κάνει χρήση του προγράμματος μπορεί να ακολουθήσει την παρακάτω διαδικασία:

- Αποσαφήνιση του αντικειμένου που θα διερευνηθεί με τη χρήση του λογισμικού, προκειμένου να πετύχει τους στόχους της συγκεκριμένης διδασκαλίας.
- Η εύρεση των απαραίτητων πληροφοριών σχετικά με τη εφαρμογή μπορεί να γίνει από τη βιβλιογραφία και από το διαδίκτυο στις ιστοσελίδες υποστήριξης του προγράμματος, σύμφωνα με το αναλυτικό πρόγραμμα σπουδών. Επίσης μετά από σχετική εμπειρία ο εκπαιδευτικός μπορεί να αναπτύσσει δικές του εφαρμογές.
- Καθορισμός των βημάτων εργασίας για την διερεύνηση του συγκεκριμένου θέματος. Δεν χρειάζεται ανάπτυξη κώδικα προγραμματισμού για την εφαρμογή από τον εκπαιδευτικό αν γίνει χρήση των βοηθητικών προγραμμάτων από το «toolbox».
- Έλεγχος καλής λειτουργίας του εργαστηριακού εξοπλισμού αλλά και της εφαρμογής που πρόκειται να εξετασθεί από τους μαθητές.
- Δημιουργία Φύλλου Πράξης που θα διανεμηθεί στους μαθητές που θα περιλαμβάνει Τίτλο, Σκοπούς του μαθήματος, Εισαγωγικές πληροφορίες, Βοηθήματα, Εργαλεία – Μηχανήματα, Πορεία εργασίας (Πλαγιαννάκος, 1995). Η πορεία εργασίας πρέπει να είναι συνοπτική και σαφής για να αποφευχθούν διαδικαστικά προβλήματα.



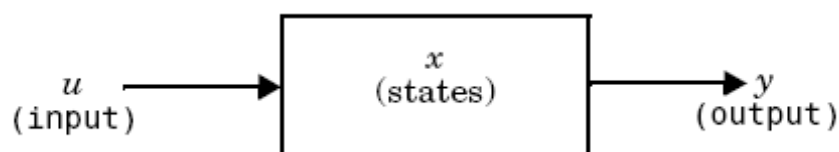
- Δημιουργία Φύλλου Ανάθεσης Εργασίας με ερωτήσεις ή συμπλήρωση πινάκων για την αξιολόγηση του μαθήματος. Επιπρόσθετα μπορούν να χρησιμοποιηθούν ανατροφοδοτικά για την βελτίωση της εκπαιδευτικής διαδικασίας.

Ένα από τα εργαλεία του Matlab που χρίζει ιδιαίτερης αναφοράς με άμεση εφαρμογή στο σχολείο είναι το «Simulink», που παρέχει δυνατότητες αναπαραστάσεων και προσομοιώσεων τεχνολογικών αντικειμένων και εννοιών. Στο επόμενο κεφάλαιο ασχολούμαστε και αναλύουμε τις δυνατότητες του Simulink όσον αφορά τις προσομοιώσεις μιας και αυτό το εργαλείο θα χρησιμοποιήσουμε για την κατασκευή των μοντέλων μοριακής δυναμικής, αλλά και για την πιθανότητα εκπαιδευτική χρήσης του από μαθητές.

### C. SIMULINK

Το Simulink είναι μια γλώσσα προγραμματισμού, όπου ο προγραμματισμός γίνεται με γραφικό τρόπο. Είναι χτισμένο και λειτουργεί «πάνω» στο Matlab (The MathWorks, 2005). Χρησιμοποιείται όπως και το Matlab στα περισσότερα Τεχνικά Πανεπιστήμια (Πολυτεχνεία) λόγω των δυνατοτήτων που προσφέρει στη δημιουργία μοντέλων φυσικών συστημάτων και προβλημάτων μηχανικής. Επίσης επιλύει διάφορα προβλήματα που αναφέρονται στους επιστημονικούς κλάδους της φυσικής, των μαθηματικών, της χημείας και γενικότερα θετικών επιστημών, λόγω της μαθηματικής επάρκειάς του. Στη μεγάλη του χρηστικότητα ως γλώσσα προγραμματισμού συμβάλει το ότι δεν απαιτεί υψηλού επιπέδου ικανότητες προγραμματισμού χρησιμοποιώντας λογικά διαγράμματα με γραφικά.

Κάθε μπλοκ μέσα σε ένα μοντέλο Simulink έχει τα γενικά χαρακτηριστικά: ένα συντελεστή εισαγωγής «u» (input), ένα συντελεστή των αποτελεσμάτων «y» (output) και τελεστή της λειτουργίας που επιτελεί «x» (state).



Εικόνα 9. Τυπικό μπλοκ Simulink (The MathWorks, 1999)

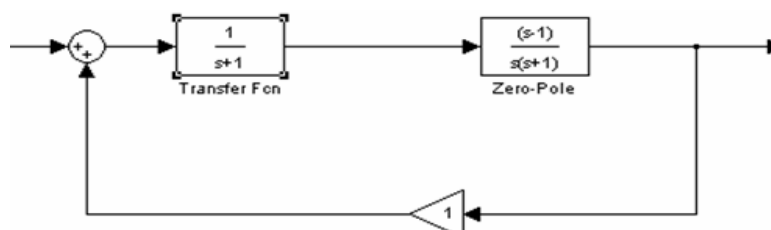
Η εκτέλεση του προγράμματος αποτελείται από δύο φάσεις: έναρξη και προσομοίωση. Κατά τη διάρκεια της φάσης έναρξης επιτελούνται γενικά οι παρακάτω λειτουργίες: Οι παράμετροι των μπλοκ περνούν στο MATLAB για έλεγχο και ρύθμιση. Οι προκύπτουσες αριθμητικές τιμές χρησιμοποιούνται ως πραγματικές παράμετροι. Κάθε υποσύστημα που δεν είναι εκτελέσιμο υποσύστημα αντικαθίσταται από τα μπλοκ που περιέχει. Τα μπλοκ ταξινομούνται κατά τη σειρά που θα εκτελεστούν και θα ενημερωθούν για αλλαγές. Οι συνδέσεις μεταξύ των μπλοκ ελέγχονται για να εξασφαλιστεί ότι δεν υπάρχουν προβλήματα διαφορετικών τύπων δεδομένων.

Ο υπολογισμός των δεδομένων προσομοίωσης (εκτέλεση του προγράμματος) γίνεται σε δύο στάδια. Κατ' αρχάς το αποτέλεσμα κάθε μπλοκ υπολογίζεται κατά τη σειρά που καθορίζεται στη διάρκεια της ταξινόμησης. Κατόπιν, σε ένα δεύτερο πέρασμα, κάθε μπλοκ υπολογίζει τα αποτελέσματά του βασισμένα στον τρέχοντα χρόνο (time based), τα δεδομένα εισαγωγής και τον τελεστή του. Το προκύπτον αποτέλεσμα επιστρέφεται και χρησιμοποιείται για να υπολογιστεί ένα νέο αποτέλεσμα την επόμενη φορά (loop). Μόλις υπολογιστεί ένα νέο αποτέλεσμα τα μπλοκ που συμμετέχουν –καθορίζεται από τις συνδέσεις- ενημερώνονται και ακολουθεί το επόμενο αποτέλεσμα.

Το Simulink είναι ιδανικό για μοντελοποίηση, προσομοίωση και ανάλυση δυναμικών φυσικών συστημάτων σε ένα ευέλικτο, πολυσυνθετικό και εύχρηστο περιβάλλον εργασίας (Kalagasidis, et al, 2006). Λειτουργεί με γραφικά που τα συνθέτει ο χρήστης με το ποντίκι επιτρέποντας έτσι τη δημιουργία μοντέλων, σχεδιάζοντας λογικά διαγράμματα στην οθόνη. Ενώ επιτρέπει την ανα πάσα στιγμή δυναμική επέμβαση του χρήστη στο διάγραμμα. Μπορεί να δημιουργήσει συστήματα με γραμμική ή μη γραμμική συμπεριφορά, συνεχή ή διακριτή χρονική απόκριση.

Τα εργαλεία του λογισμικού είναι τα Blocks και προσφέρονται σε βιβλιοθήκες όπως τα σύμβολα σχεδίασης σε λογισμικά CAD. Οι βιβλιοθήκες χωρίζονται θεματικά ανάλογα με τον τύπο μοντέλου που δημιουργούν και το γνωστικό αντικείμενο που διαπραγματεύονται. Στην έκδοση R2006a υπάρχουν 39 διαφορετικές βιβλιοθήκες εργαλείων, που κάθε μια αντιστοιχεί σε κάποιο επιστημονικό πεδίο, όπως τηλεπικοινωνίες, ηλεκτρικές εγκαταστάσεις ισχύος, συστήματα αυτομάτου ελέγχου, ανάλυση εικόνας, μηχανολογικά συστήματα, κτλ. Επιτρέπει επίσης τη δημιουργία κώδικα σε γλώσσα C από το διάγραμμα των μπλοκ και να εκτελεστεί ως αυτόνομος κώδικας (The MathWorks, 1999).

Δημιουργήθηκε και χρησιμοποιήθηκε για την αναπαράσταση και επίλυση προβλημάτων αυτομάτου ελέγχου τα οποία απαιτούν πολύπλοκη μαθηματική περιγραφή και παρουσιάζονται σχηματικά με τη μορφή διαγραμμάτων. Στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζεται το τυπικό διάγραμμα ενός συστήματος αυτομάτου ελέγχου όπου και διακρίνονται, η Συνάρτηση Μεταφοράς (Transfer Function) του φυσικού συστήματος, ο ελεγκτής (controller) και η ανάδραση του συστήματος (feedback). Η μαθηματική περιγραφή γίνεται με μετασχηματισμούς Laplace.

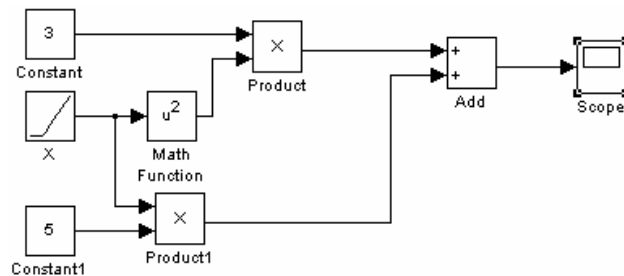


Εικόνα 10. Τυπικό Σύστημα Αυτομάτου Ελέγχου

Περιέχει πλήθος εφαρμογών στα μαθηματικά που αντιπροσωπεύουν τις εξισώσεις υπό μορφή διαγραμμάτων ροής. Επομένως περιλαμβάνει έναν μεγάλο αριθμό έτοιμων λειτουργιών ή

εξειδικευμένων διαδικασιών που απαιτούνται στις προσομοιώσεις. Ενώ συγχρόνως παρέχει τεράστιες δυνατότητες γραφικής απεικόνισης που επιτρέπουν την απεικόνιση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων στον υπολογιστή (Hanselman, 2001).

Πέρα από τις έτοιμες συναρτήσεις προσφέρει όλα τα μαθηματικά εργαλεία έτσι ώστε ο χρήστης να μπορεί να δημιουργήσει συναρτήσεις. Έτσι, παραδείγματος χάριν, η συνάρτηση  $f(x) = 3x^2 + 5x$  απεικονίζεται από το Simulink ως εξής:



**Εικόνα 11** Η εξίσωση  $f(x) = 3x^2 + 5x$

Η μεταβλητή (x) αντιπροσωπεύεται με τη συνάρτηση ράμπας (ramp function) ενώ τα αποτελέσματα δίνονται στο μπλοκ «scope» και εμφανίζονται με διπλό κλικ. Όλα τα μπλοκ είναι στη βιβλιοθήκη του λογισμικού και μπορούν να μεταφερθούν με το ποντίκι με τη διαδικασία «drag-and-drop» στην επιφάνεια εργασίας του μοντέλου. Έτσι με τις κατάλληλες οδηγίες ακόμη και μαθητές μπορούν να κατασκευάσουν τις εξισώσεις στα διαγράμματα ροής.

Υπάρχει μια δυνατότητα για την ανάπτυξη μιας διαφορετικής δομής της διαδικασίας σκέψης των σπουδαστών πέρα από τη γνωστή διαμόρφωση των μαθηματικών. Κάθε εξίσωση ανάλογα με το σπουδαστή που την διαμορφώνει, μπορεί να πάρει διαφορετικές μορφές μιας και η δημιουργία των μοντέλων δεν είναι μοναδική αλλά παρουσιάζεται με διάφορους τρόπους. Ο χρήστης έχει την ευκαιρία να κατασκευάσει πολλαπλές διαφοροποιημένες αντιπροσωπεύσεις του ίδιου γνωστικού αντικειμένου, και έτσι να παρουσιάσει το δικό του τρόπο σκέψης (Dettori & Lemut, 1995). Αυτό συμβαίνει επειδή υπάρχει μια “bottom-up” ανάπτυξη του μαθηματικού μοντέλου, από τα δομικά στοιχεία της εξίσωσης στη σύνθεσή τους. Η εξίσωση αναλύεται κατά τη διάρκεια του σχηματισμού του προτύπου και ο δάσκαλος μπορεί να αντιληφθεί το βαθμό κατανόησης του σπουδαστή από την άποψη της δυνατότητάς του να την λύσει. Με άλλα λόγια αυτή η μέθοδος σχεδίασης από το σπουδαστή παρουσιάζει το βαθμό στον οποίο κατανόησε την έννοια της εξίσωσης δεδομένου ότι το διάγραμμα ακολουθεί τη διαδικασία επίλυσης.

Ο σχεδιασμός των μοντέλων μπορεί να γίνει σε συνεργασία ή χωριστά. Το διάγραμμα που προκύπτει ως προϊόν συνεργασίας, είναι σημαντικό για τον κοινωνικό κονστрукτιβισμό, μπορεί να επιτευχθεί μέσω του δικτύου ή σε τοπικό επίπεδο με τις ομάδες εργασίας στον ίδιο υπολογιστή. Στο Διαδίκτυο η ανάπτυξη των μοντέλων μπορεί να γίνει μέσω ενός λογισμικού «share application»,

όπως (Skype, Netmeeting, κτλ) τα οποία επιτρέπουν το απομακρυσμένο χειρισμό του επιλεγμένου λογισμικού από το χρήστη, Με μόνη προϋπόθεση ότι το λογισμικό χρησιμοποιείται σε όλους τους υπολογιστές στους οποίους το συνεργατικό μοντέλο θα πραγματοποιηθεί.

Επιπλέον το Simulink μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε πολλά μαθήματα στο σχολείο και όχι μόνο στη φυσική και τα μαθηματικά. Μπορεί να εφαρμοστεί σε όλες τις γνωστικές περιοχές που χρησιμοποιούν τα μαθηματικά, αλλά και σε οποιαδήποτε γνωστική περιοχή για τη δημιουργία λογικών διαγραμμάτων «inquiry diagrams» ή ακόμα και για τη δημιουργία τρισδιάστατων προσομοιώσεων και αντιπροσωπεύσεων της εικονικής πραγματικότητας.

Το Simulink παρέχει δυνατότητα για αλλαγή όλων των παραμέτρων μιας προσομοίωσης. Υπάρχει επίσης η δυνατότητα τα δεδομένα από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης να υποθηκευθούν σε αρχείο και το μοντέλο από γλώσσα Simulink μπορεί να μετατραπεί αυτόματα σε C (The MathWorks, 1999). Τα βασικά χαρακτηριστικά του Simulink είναι:

- Είναι ένα γραφικό, mouse-driven λογισμικό που επιτρέπει τη δημιουργία μοντέλων με τη μορφή ενός διαγράμματος στην οθόνη του υπολογιστή και με δυνατότητες δυναμικού χειρισμού.
- Γραφικό τρόπο προγραμματισμού, που δημιουργεί με το ποντίκι λογικά διαγράμματα από έτοιμα μπλοκ, που το κάθε ένα επιτελεί μια μαθηματική και όχι μονό λειτουργία.
- Χρησιμοποιείται κυρίως για μοντελοποίηση, προσομοίωση, τη διαμόρφωση, τη μίμηση και την ανάλυση δυναμικών συστημάτων σε ένα ευέλικτο, συνθετικό (modular) και εύχρηστο περιβάλλον (Schlotter, 2003).
- Υπάρχει βιβλιοθήκη από έτοιμα μπλοκ, που μπορούν να χρησιμοποιηθούν κατά περίπτωση. Τα Blocksets είναι πρόσθετα (add-ons) στο Simulink και παρέχονται πρόσθετες βιβλιοθήκες από μπλοκ για εξειδικευμένες εφαρμογές, όπως τις επικοινωνίες, την επεξεργασία σήματος, και τα ηλεκτρικά συστήματα μεταφοράς ενέργειας.

Το Simulink δίνει την επιλογή για αλλαγή και ρύθμιση σε πολλές παράμετροι της προσομοίωσης, τα βασικά εργαλεία ρυθμίσεων είναι (The MathWorks, 1999):

- Οι παράμετροι επίλυσης «Solver parameters», επιτρέπουν τη ρύθμιση της έναρξης και τερματισμού της προσομοίωσης, την επιλογή του τύπου επίλυσης και παραμέτρων αυτού, επιλογή των παραμέτρων του τρόπου εμφάνισης των αποτελεσμάτων.
- Οι παράμετροι διαγνωστικού «The Diagnostic parameters» επιτρέπουν τη ρύθμιση και επιλογή του επιπέδου ελέγχου του προγράμματος για σφάλματα και παρέχουν μηνύματα προειδοποίησης κατά τη διάρκεια μιας προσομοίωσης.
- Οι παράμετροι επικοινωνίας του Simulink με το Matlab «The parameters Workspace I/O».

Αν και είναι κυρίως μια γλώσσα προγραμματισμού, δεν απαιτεί τις δυνατότητες προγραμματισμού υψηλού επιπέδου, δεδομένου ότι μπορεί να εκτελεστεί με τη σύνθεση των έτοιμων μπλοκ από τις βιβλιοθήκες - Lego Programming.

#### D. SIMMECHANICS

Αποτελεί κομμάτι της βιβλιοθήκης του Simulink και θα το χρησιμοποιήσουμε για την κατασκευή των μοντέλων, λόγω της δυνατότητας που παρέχει να παρουσιάζει μηχανικά σώματα (bodies) που κινούνται σε τρεις διαστάσεις με το εργαλείο «Machine for Model». Τα μπλοκ του χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση μηχανικών συστημάτων και είναι έτοιμες εφαρμογές βασικών μηχανικών συστημάτων και όχι μαθηματικών συναρτήσεων. Υπάρχουν δηλαδή μπλοκ που προσομοιώνουν τη λειτουργία αξόνων, σωμάτων, ενεργοποιητών, αισθητήρων και στοιχεία εφαρμογής δυνάμεων. Οι τιμές των παραμέτρων μπορούν να τροποποιούνται εύκολα και σε απεριόριστο εύρος, παρέχοντας έτσι απόλυτο έλεγχο στα δεδομένα της προσομοίωσης αλλά και δυνατότητες διάδρασης με το χρήστη. Ανάλογα με τον τρόπο υπολογισμού τα μοντέλα που δημιουργούνται με το SimMechanics διακρίνονται (Schlotter, 2003):

- «Forward Dynamics» υπολογίζει τη κίνηση των μηχανισμών ως αποτέλεσμα των ασκούμενων δυνάμεων.
- «Inverse Dynamics» βρίσκει τις απαραίτητες δυνάμεις για να δημιουργηθεί συγκεκριμένη κίνηση σε σύστημα ανοιχτού βρόχου .
- «Kinematics» κάνει το ίδιο αλλά για μοντέλα κλειστού βρόχου.

Γίνεται κατανοητό ότι σύμφωνα με τον τρόπο λειτουργίας των μπλοκ του SimMechanics, οι προσομοιώσεις που δημιουργούνται βασίζονται στα γεγονότα (δύναμη, κίνηση, κτλ). Για το λόγο αυτό το Simulink χρησιμοποιεί την τεχνική «zero crossing», για να είναι σίγουρο ότι ο χρόνος αντιστοιχεί πλήρως στα γεγονότα της προσομοίωσης. Αυτό παίζει σημαντικό ρόλο στη διαχείριση των γεγονότων και στην ακρίβεια των αποτελεσμάτων, κυρίως για μη συνεχείς καταστάσεις (The MathWorks, 1999).


##### 1) ΣΗΜΑΝΤΙΚΟΤΕΡΕΣ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΕΣ




Το «Body block» αντιπροσωπεύει ένα άκαμπτο σώμα, του οποίου οι ιδιότητες προσαρμόζονται ανάλογα με τη χρήση, με κύρια χαρακτηριστικά είναι:


- Η μάζα, η θέση του σώματος και η αδράνειά του.
- Οι συντεταγμένες για το κέντρο βάρους του σώματος.

- Το σύστημα συντεταγμένων που θα κινείται.

Το «Ground block»  Ground αντιπροσωπεύει ένα ακίνητο επίπεδο. Συνδέεται με το μπλοκ αξόνων (Joint block) και περιβάλλοντος μηχανών (Environment block).


Το «Machine Environment block»  Machine Environment καθορίζει τις ακόλουθες παραμέτρους για τη μηχανή με την οποία συνδέεται:

- Παράμετροι που ελέγχουν το πώς κινείται η μηχανή.
- Περιορίζει το χώρο κίνησης.
- Ελέγχει την τρισδιάστατη απεικόνιση.


Το «Custom Joint block»  Custom Joint είναι μια σύνθετη ένωση που δίνει τη δυνατότητα προσαρμογής με έναν συγκεκριμένο συνδυασμό βαθμών ελευθερίας της κίνησης (μεταφοράς, περιστροφής) σε τρεις διαστάσεις:

- Τρεις μεταφορικοί βαθμοί ελευθερίας.
- Τρεις περιστροφικοί βαθμοί ελευθερίας:
  - (1) Με τη ρύθμιση μιας σφαιρικής παραμέτρου.
  - (2) Με ρύθμιση τριών διαφορετικών αξόνων περιστροφής.

Υπάρχει η δυνατότητα για επιλογή βαθμών ελευθερίας με ελάχιστο βαθμό ελευθερίας έναν άξονα.

Το μπλοκ ενεργοποίησης «Body Actuator block»  Body Actuator ενεργοποιεί ένα μπλοκ σώματος με ένα απλό σήμα Simulink εφαρμόζοντας μια δύναμη/ροπή στο σώμα. Η δύναμη είναι μια λειτουργία του καθορίζεται από ένα σήμα εισαγωγής Simulink. Αυτό το σήμα μπορεί να είναι οποιοδήποτε σήμα Simulink και προσδιορίζει:

- Δύναμη για τη μεταφορική κίνηση.
- Ροπή για την περιστροφική κίνηση.

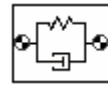
Το μπλοκ Αισθητήρας «Body Sensor block»  Body Sensor λειτουργεί ως αισθητήριο για την κίνηση ενός σώματος που αντιπροσωπεύεται από το «Body block». Ο αισθητήρας μετρά τα δεδομένα της θέσης, την ταχύτητα και επιτάχυνση, μεταφορικής και περιστροφικής κίνησης σε οποιοδήποτε συνδυασμό.



Joint Initial Condition

Το μπλοκ Αρχικών Συνθηκών «Joint Initial Condition block». Οι αρχικές τιμές είναι οι θέσεις και οι ταχύτητες του σώματος (body) και διευκρινίζουν πλήρως την αρχική κατάσταση της κίνησης και θέσης, μεταφορική ή περιστροφική:

- Μεταφορικοί αρχικοί όροι της γραμμικής θέσης και της ταχύτητας.
- Περιστροφικοί αρχικοί όροι της γωνιακής θέσης και γωνιακής ταχύτητας.
- Το μπλοκ μπορεί να ενεργοποιήσει ένα, μερικά, ή όλα μπλοκ που ελέγχονται από κοινό μπλοκ καθορισμού βαθμών ελευθερίας «Custom Joint block».



Body Spring & Damper

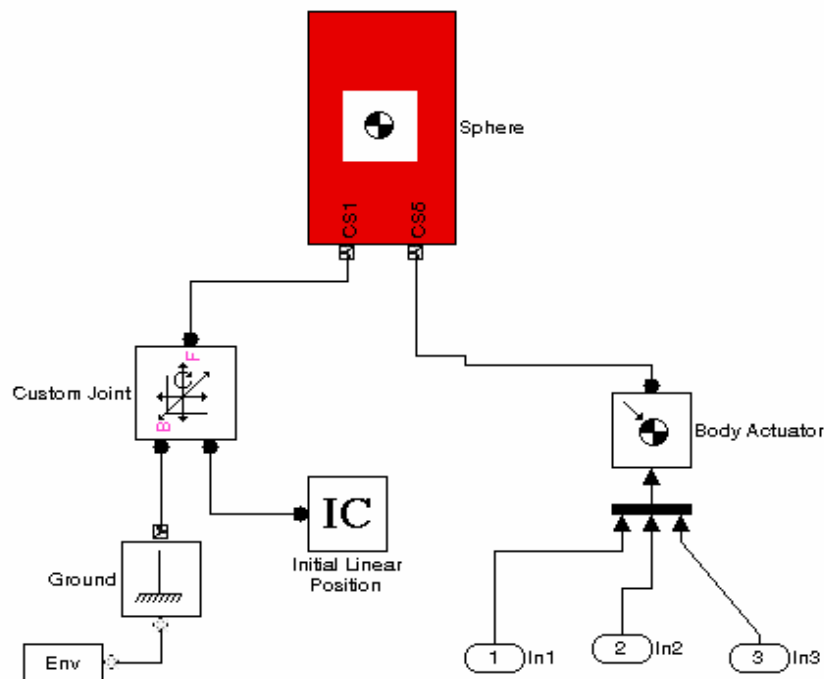
Το μπλοκ «Ελατήριο» «The Body Spring block» διαμορφώνει τη δύναμη ενός ελατηρίου ενεργώντας μεταξύ δύο σωμάτων. Από τον τρίτο νόμο Newton, το ελατήριο εφαρμόζει ίσες και αντίθετες δυνάμεις στα δύο σώματα. Διαμορφώνει οποιαδήποτε γραμμική (νόμος Hooke) δύναμη με τους σταθερούς συντελεστές που ενεργεί μεταξύ ενός ζεύγους των σωμάτων.

## VII. ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

### A. ΣΤΕΡΕΟ

Στο μοντέλο που ακολουθεί γίνεται προσπάθεια να προσομοιωθεί η κίνηση των μορίων στερεού. Η προσομοίωση έχει ως σκοπό να προσφέρει μια τρισδιάστατη εμπειρία στους μαθητές όσον αφορά την συνεχή κίνηση των μορίων στερεού. Συσχετίζει την κίνηση αυτή των μορίων με τη θερμοκρασία του στερεού το οποίο επίσης διαστέλλεται ή συστέλλεται κατά τη αύξηση ή μείωση της θερμοκρασίας αντίστοιχα. Στο μοντέλο που ακολουθεί δεν γίνεται χρήση των τεχνικών Monte Carlo μιας και δεν θα εξυπηρετούσαν στην καλύτερη αντίληψη της τρισδιάστατης κίνησης των μορίων.

Προκειμένου να πραγματοποιηθεί η κατασκευή του θα χρησιμοποιηθεί το μπλοκ «body» που είναι η σφαίρα. Θα δοθούν δύο είσοδοι στο μπλοκ αυτό, μία για τις αρχικές συνθήκες (IC), βαθμούς ελευθερίας και περιβάλλον εργασίας και μία για την είσοδο των δεδομένων των δυνάμεων που θα ασκούνται πάνω στη σφαίρα. Το μπλοκ «Custom Joint» ορίζει τους βαθμούς ελευθερίας της σφαίρας, το μπλοκ «IC» τις αρχικές συνθήκες, θέση και ταχύτητα, το «Ground» το επίπεδο που θα θεωρείται κατώτερο όριο, το «Env» πληροφορίες σχετικά με περιβάλλον εργασίας του μοντέλου ενώ το μπλοκ «Body Actuator» δίνει τις μηχανικές δυνάμεις στη σφαίρα που έχει πάρει πριν ως πληροφορίες



Εικόνα 12. Το μοντέλο Simulink μιας σφαίρας



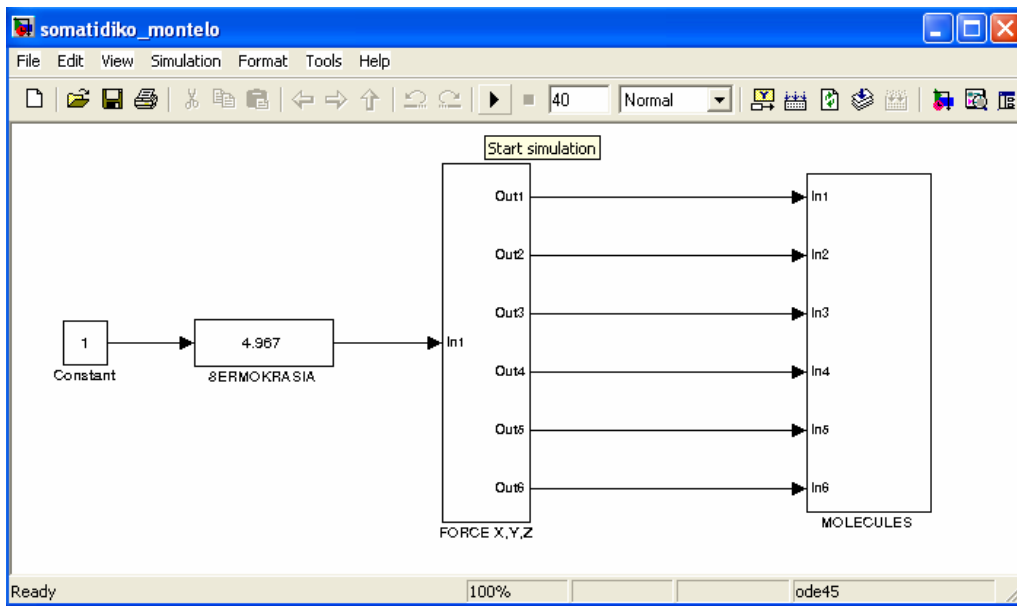
1) ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΙ - ΠΑΡΑΔΟΧΕΣ

Η προσομοίωση περιορίζεται από την υπολογιστική δύναμη του Η/Υ. Αν χρησιμοποιηθούν πάρα πολλά σωματίδια που θα δίνουν μεν καλύτερη αίσθηση του αντικειμένου, η προσομοίωση θα «τρέχει» αργά. Μετά από δοκιμές προτιμήθηκε να χρησιμοποιηθούν 16 σωματίδια διατεταγμένα συμμετρικά στο χώρο. Ο παραπάνω αριθμός δίνει αίσθηση αντικειμένου (στερεού σώματος) χωρίς να επιβραδύνει τον Η/Υ.

- Όπως έχουμε ήδη αναφέρει οι κινήσεις των σωματιδίων γίνονται στο χώρο κατά τους τρεις άξονες. Κάθε σωματίδιο κινείται παλινδρομώντας γύρω από μια συγκεκριμένη θέση ισορροπίας στις τρεις διευθύνσεις των αξόνων.
- Το Simulink δίνει τη δυνατότητα η κίνηση να γίνει προς οποιαδήποτε κατεύθυνση, προτιμάται όμως η κίνηση παράλληλα με τους άξονες συντεταγμένων, μιας και δίνει καλύτερη εντύπωση της τρισδιάστατης αναπαράστασης.
- Με το ίδιο σκεπτικό ορίζονται να κινούνται τα σωματίδια συντεταγμένα προς την ίδια ή αντίθετη κατεύθυνση και όχι τυχαία. Μια εφαρμογή με τυχαία κατεύθυνση κίνησης των σωματιδίων δεν προσφέρεται για την εξαγωγή συμπερασμάτων ως προς τη δομή, το πλάτος ταλάντωσης και τη διαστολή του υλικού.
- Τα σωματίδια παλινδρομούν γύρω από τη θέση ισορροπίας τους, η οποία δεν μετατοπίζεται.
- Προκειμένου να χρησιμοποιηθεί η εφαρμογή για τη διδασκαλία φυσικών εννοιών όπως η θερμοκρασία, η εσωτερική ενέργεια και η διαστολή, δίδεται η δυνατότητα να αυξάνεται το πλάτος της ταλάντωσης των σωματιδίων.
- Δεν είναι στόχος αυτής της εφαρμογής να υπάρχουν συγκρούσεις ανάμεσα στα σωματίδια. Σε περίπτωση που ο χρήστης επέμβει στον γραφικό κώδικα και αυξήσει το πλάτος πάνω από κάποια όρια, τα σωματίδια αλληλοκαλύπτονται χωρίς να αντιδρούν. Έτσι δίδεται περιορισμός από την εφαρμογή ως προς το πλάτος ταλάντωσης.
- Δεν υπάρχουν αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα σωματίδια. Κάτι που δεν κρίθηκε απαραίτητο για μια πρώτη προσομοίωση της κίνησής τους και για την διδασκαλία της διαστολής των σωμάτων.
- Επιχειρείται μια εποπτική παρουσίαση της δομής της ύλης στερεού με δυνατότητα διάδρασης από τον χρήστη – μαθητή. Επιλέγει θερμοκρασία και βλέπει έτσι την αλλαγή στην εσωτερική ενέργεια των σωματιδίων και την αλλαγή στη διαστολή του.
- Ως εκ τούτου δεν υπάρχει μαθηματική συσχέτιση της κίνησης των σωματιδίων για συγκεκριμένο υλικό, μιας και διαφορετικά υλικά διαστέλλονται και διαφορετικά.

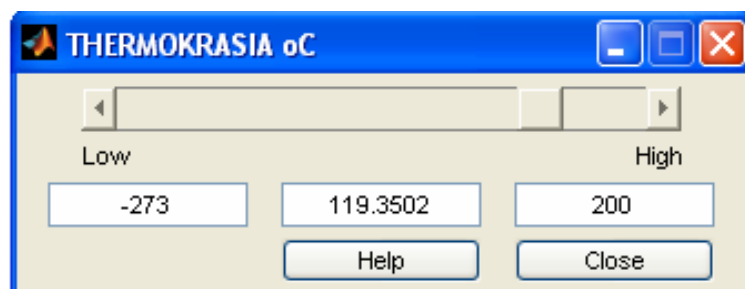
2) MONTELO

Το μοντέλο αποτελείται από 16 σωματίδια διατεταγμένα στο χώρο και σε ίσες αποστάσεις μεταξύ τους. Το κάθε σωματίδιο εκτελεί ταλάντωση κατά σειρά στους άξονες X, Y, Z. Δημιουργούμε τα 16 σωματίδια με αντιγραφή – επικόλληση και τα ομαδοποιούμε σε ένα μπλοκ (Εικ. 18 Molecules). Η τιμή των δυνάμεων που ασκούνται στα σωματίδια γίνεται με γεννήτριες παλμών που ομαδοποιούνται σε μπλοκ (Εικ. 13, Force).








Εικόνα 13. Το πλήρες μοντέλο

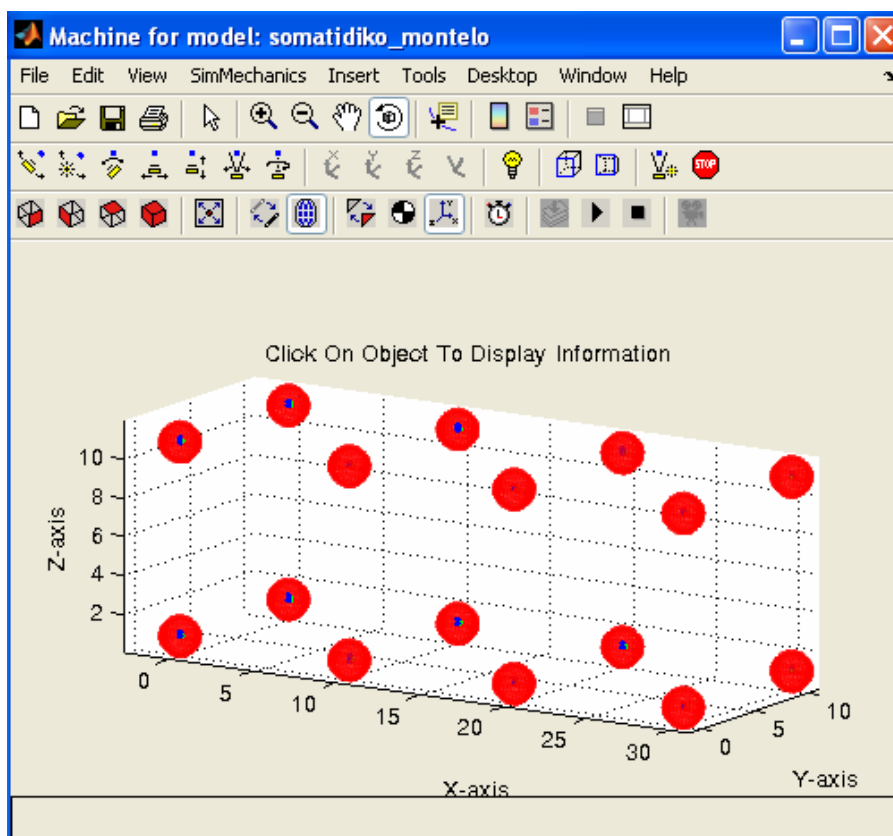
Η επιλογή της ενίσχυσης των δυνάμεων παραμένει έξω από τα δύο ομαδοποιημένα μπλοκ ώστε να μπορεί να τροποποιηθεί. Με διπλό κλικ στο μπλοκ ανοίγει το παρακάτω παράθυρο (Εικ. 3). Στο συγκεκριμένο παράδειγμα η τιμή κυμαίνεται από -273 έως 200 °C.



Εικόνα 14. Ρύθμιση Θερμοκρασίας

Ο χρήστης επιλέγοντας θερμοκρασία, ουσιαστικά επιλέγει τη δύναμη που θα ασκείται στο κάθε σωματίδιο με αποτέλεσμα να μεταβάλλεται το πλάτος κίνησής του. Η εμφάνιση της τρισδιάστατης προσομοίωσης γίνεται με το πάτημα του κουμπιού  (Start Simulation).

Ανοίγει το εργαλείο «Machine», όπου σε σύστημα συντεταγμένων εμφανίζονται τα σωματίδια να εκτελούν τις κινήσεις που έχουν προγραμματισθεί. Η προσομοίωση μπορεί να ξεκινά και να σταματά με τα κουμπιά  (Start Simulation),  (stop) και  (pause). Με το εργαλείο  μπορεί να γίνει περιστροφή της οπτικής γωνίας προς όλες τις κατευθύνσεις ενώ υπάρχει πλήθος εργαλείων προκειμένου να μελετηθεί η εμφανιζόμενη εφαρμογή με τον καλύτερο δυνατό τρόπο. Αυτές οι δυνατότητες επιτρέπουν στους μαθητές να δράσουν επί του εξεταζόμενου αντικειμένου και να εξετάσουν τις κινήσεις από όλες τις κατευθύνσεις.



Εικόνα 15: Η προσομοίωση

Ουσιαστικά δημιουργήθηκε ένα δυναμικό αντικείμενο για τους μαθητές οι οποίοι μπορούν να επέμβουν, όχι μόνο στη μεταβολή της κινητικής του κατάστασης μεταβάλλοντας τη θερμοκρασία του, αλλά και να εξετάσουν το ίδιο το αντικείμενο σαν να το είχαν στα χέρια τους αλλάζοντας όλα τα χαρακτηριστικά της γραφικής αναπαράστασης του. Δημιουργούνται με αυτό τον τρόπο διαστάσεις πραγματικών εργαστηριακών εφαρμογών, όπου ο μαθητής βιώνει τη σωματιδιακή φύση του υλικού και ανακαλύπτει εξερευνώντας τις μεταβολές από την αύξηση της θερμοκρασίας του.



### 3) ΠΡΟΤΑΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ

Με βάση τις πιο πάνω εφαρμογές μπορεί να διαμορφωθεί μια πρόταση διδασκαλίας στη θεματική ενότητα της Φυσικής Β' Γυμνασίου «Θερμοκρασία, Θερμότητα και Μικρόκοσμος». Η προετοιμασία της διδασκαλίας θα περιλαμβάνει α) έλεγχο καλής λειτουργίας του εργαστηριακού εξοπλισμού, β)

διανομή Φύλλου Πράξης με Τίτλο, Σκοπούς του μαθήματος, Εισαγωγικές πληροφορίες, Βοηθήματα, Εργαλεία – Μηχανήματα, Πορεία εργασίας συνοπτική και σαφής για να αποφευχθούν διαδικαστικά προβλήματα (Πλαγιανάκος, 1995), γ) εφαρμογή με το Matlab-Simulink, και δ) Φύλλο Ανάθεσης Εργασίας.

### ΠΟΡΕΙΑ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

Στους μαθητές μετά από εισαγωγή και ενημέρωση για το αντικείμενο, θα διανεμηθεί πορεία εργασίας σύμφωνα με το Φύλλο Πράξης με τα εξής βήματα:

- Ενεργοποίηση των Η/Υ.
- Άνοιγμα του προγράμματος Matlab από το μενού έναρξη των Windows.
- Άνοιγμα της βιβλιοθήκης του Simulink από το μενού “start” του Matlab.
- Άνοιγμα από το μενού «File» της βιβλιοθήκης του αρχείου, όπου ήδη έχει αποθηκευτεί το μοντέλο της Εικ.13.
- Άνοιγμα με διπλό κλικ του μπλοκ «Θερμοκρασία».
- Πάτημα του κουμπιού .
- Περιστροφή της εφαρμογής με το εργαλείο .
- Συμπλήρωση Φύλλου Ανάθεσης Εργασίας.

### ΦΥΛΛΟ ΑΝΑΘΕΣΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

Συμπληρώστε τον παρακάτω Πίνακα 1.

Πίνακας 1

A/A	Θερμοκρασία °C	Εύρος Ταλάντωσης	Διαστολή ή Συστολή
1	0		
2	150		
3	-273		
4	100		
5	50		
6	-50		
7	-100		
8	200		

- Πότε έχουμε τη μεγαλύτερη κίνηση των σωματιδίων και γιατί;
- Πότε έχουμε τη μεγαλύτερη διαστολή;
- Υπάρχει κάποια περίπτωση που δεν κινούνται τα σωματίδια και γιατί;

- Ποια η σχέση της θερμοκρασίας με την εσωτερική ενέργεια του υλικού;

## B. ΜΕΘΥΣΜΕΝΗ ΣΦΑΙΡΑ

Στο επόμενο βήμα έχουμε δημιουργήσει το μοντέλο μιας σφαίρας που κινείται σε τρισδιάστατο χώρο από μια τυχαία δύναμη. Καλούμε αυτό το μοντέλο "Μεθυσμένη Σφαίρα", σύμφωνα με το πρόβλημα του "μεθυσμένου ναύτη" που μπορεί να λυθεί με τη μέθοδο MC. Η δύναμη στη σφαίρα είναι τυχαία και συνεχής, προκειμένου να μιμηθεί η κίνηση ενός μορίου που κινείται αντιδρώντας με τα άλλα μόρια.

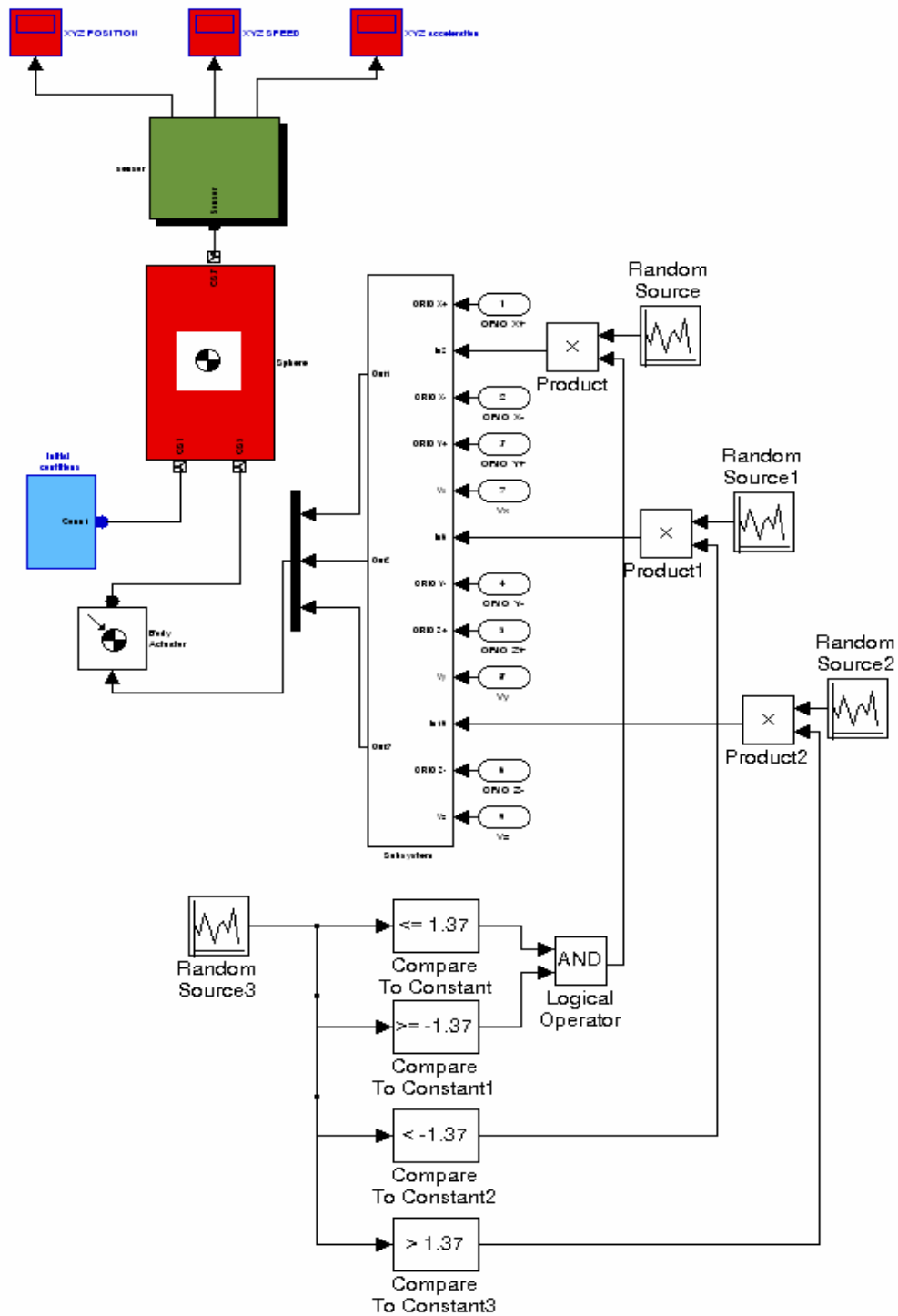
Ειδικά όταν η "Random source 3" (Εικ. 16) δίνει έναν αριθμό μεταξύ  $-1,37$  και  $1,37$ , η δύναμη εφαρμόζεται κατά τη διεύθυνση του άξονα X. Όταν ο ανωτέρω αριθμός είναι κάτω από  $-1,37$ , η δύναμη εφαρμόζεται κατά τον άξονα Y και σε οποιαδήποτε άλλη περίπτωση έχουμε τη δύναμη να ασκείται κατά τον άξονα Z. Κατ' αυτό τον τρόπο έχουμε την ίση πιθανότητα της εφαρμοζόμενης δύναμης στους τρεις άξονες, θεωρώντας ότι η γεννήτρια τυχαίων αριθμών είναι Γκαουσιανή (Εξ. 6). Έχουμε επίσης μια τυχαία τιμή της δύναμης από τις "random source" 0, 1, 2.

### 1) ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ:

Η μάζα της σφαίρας είναι 50 gr.

- Δεν υπάρχει καμία βαρύτητα στο περιβάλλον.
- Οι διαστάσεις του δοχείου είναι 30x30x30m.
- Η σφαίρα αντιδρά ελαστικά με τα όρια του δοχείου.
- Ο χρόνος δειγμάτων (sample time) της "τυχαίας πηγής 3" είναι 0,005 sec, ο μέσος όρος είναι 0 και η διαφορά 10 (Γκαουσιανή).
- Η τυχαία γεννήτρια δύναμης είναι Γκαουσιανή, ο χρόνος δειγμάτων είναι 0,05 sec, με τη μέση αξία σε 0 και τη διαφορά σε 0,2 σε N (Newton).
- Οι βαθμοί ελευθερίας είναι 6 στους άξονες X, Y και Z.
- Η δύναμη στη σφαίρα εφαρμόζεται για ολόκληρο το χρόνο της προσομοίωσης.
- Είμαστε σε θέση να δούμε την τρισδιάστατη γραφική αναπαράσταση της κίνησης της σφαίρας.
- Μπορούμε επίσης να δούμε τις γραφικές παραστάσεις της θέσης, της ταχύτητας και της επιτάχυνσης της σφαίρας.

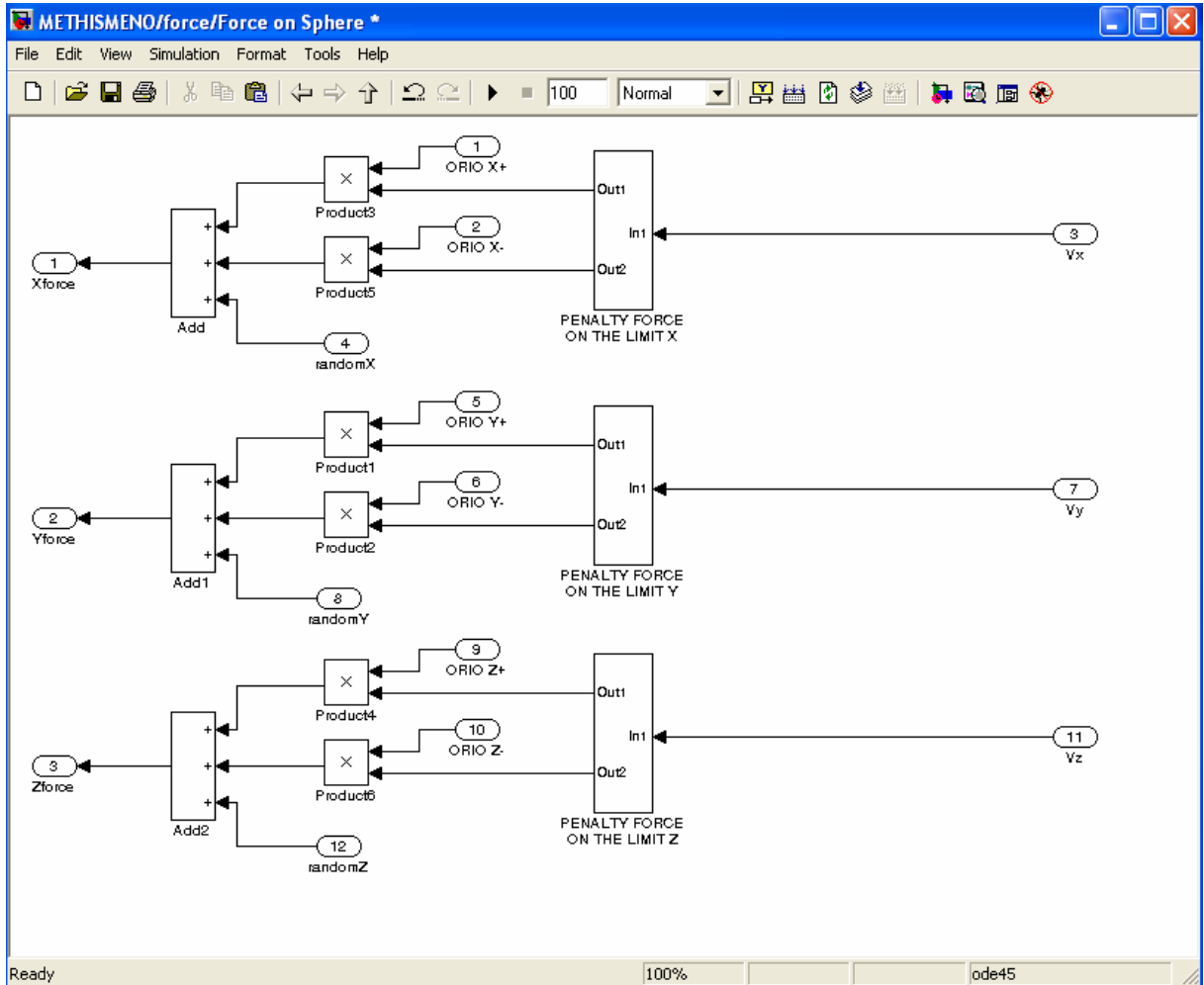
2) ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΣ



Εικόνα 16 Το μοντέλο «Μεθυμένη Σφαίρα»

Στην παραπάνω εικόνα παρουσιάζεται ο γραφικός κώδικας δημιουργίας του μοντέλου. Διακρίνονται τα τμήματα δημιουργίας του σώματος της σφαίρας, ενεργοποίησης (body actuator), του αισθητήρα και λήψης των δεδομένων κίνησης, καθώς και των αρχικών συνθηκών. Η τιμή της δύναμης

κίνησης της σφαίρας παράγεται από τις γεννήτριες τυχαίων αριθμών καθώς και η διεύθυνσή της. Η διαχείριση της δύναμης γίνεται στο υποσύστημα όπως παρουσιάζεται στη παρακάτω εικόνα (Εικ. 18).



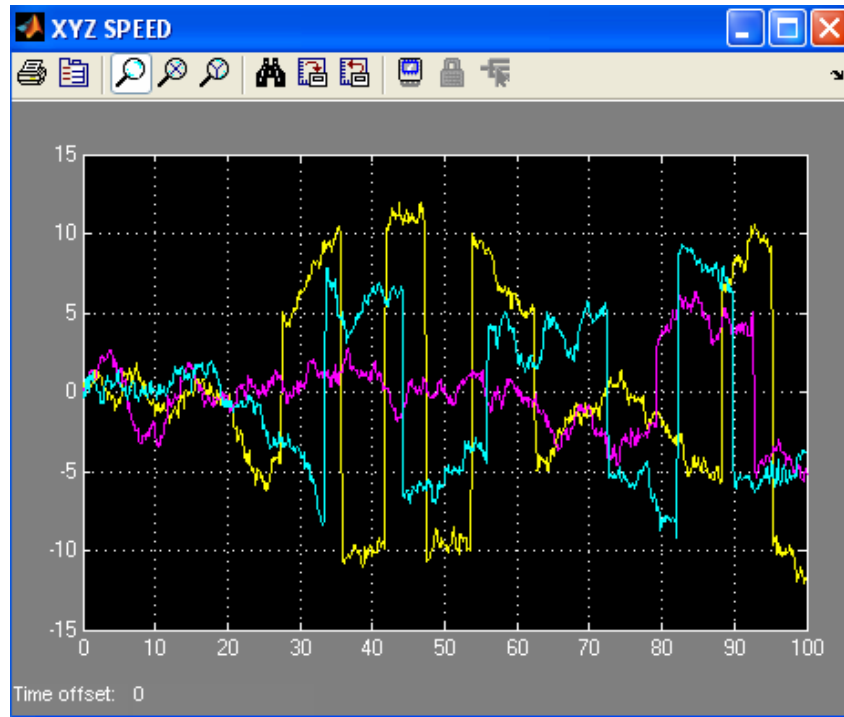
Εικόνα 17. Διαχείριση της δύναμης

Όπως παρατηρείται παράγεται μια δύναμη στα μπλοκ «Penalty force on the limit» σύμφωνα με τη σχέση Εξ. 28, η οποία εφαρμόζεται στη σφαίρα όταν αυτή φτάσει σε κάποιο όριο  $\pm X$ ,  $\pm Y$ ,  $\pm Z$ . Ενώ μόνιμα εφαρμόζεται η τυχαία τιμή και διεύθυνση δύναμης «random X,Y,Z».

Η υπολογιστική ικανότητα του υπολογιστή μας αναγκάζει να θέσουμε κάποια όρια στη σχεδίαση του μοντέλου. Είναι γνωστό ότι ένα μόριο αντιδρά και αλλάζει την ταχύτητά του  $10^9$  φορές ανά δευτερόλεπτο περίπου. Η δύναμη σε αυτό το μοντέλο αλλάζει 200 φορές/sec. Εάν αυξήσουμε τη δειγματοληψία από τις γεννήτριες τυχαίων αριθμών το μοντέλο «τρέχει» πιο αργά.

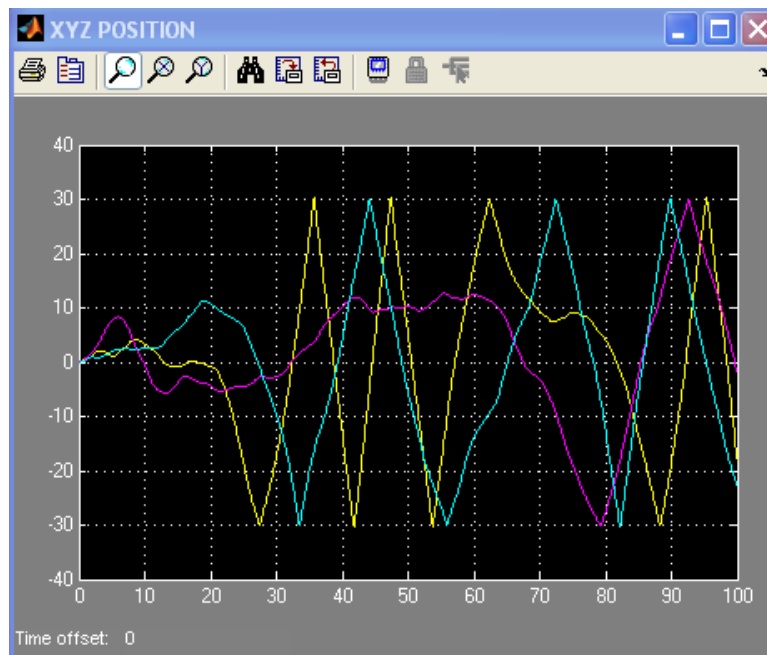
Επίσης οι διαστάσεις του δοχείου είναι αρκετά μεγάλες με σκοπό να βοηθήσουν τον παρατηρητή να δει την τυχαία μετακίνηση της σφαίρας καλύτερα.

3) ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ



**Εικόνα 18.** Ταχύτητα της σφαίρας αναλυόμενη κατά τους τρεις άξονες  $u_x$ : κίτρινο,  $u_y$ :μωβ,  $u_z$ : πράσινο

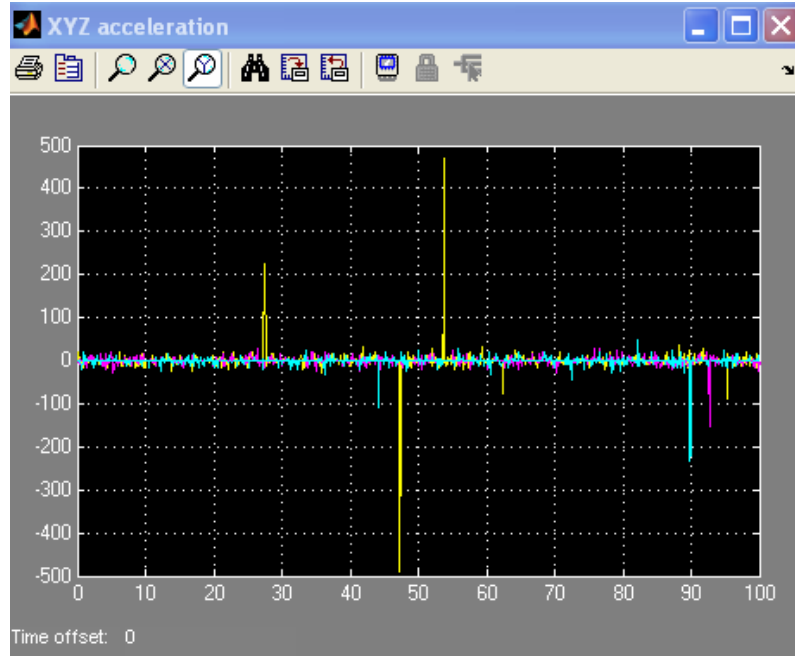
Σύμφωνα με τις αρχές της μεθόδου Monte Carlo αξιόπιστα αποτελέσματα παίρνουμε μετά από ένα αρχικό αριθμό δειγματοληψιών, έτσι και στο παραπάνω σχήμα (Εικ. 18) παρατηρούμε ότι στην αρχή της προσομοίωσης οι ταχύτητες είναι μικρές με τη πάροδο των γεγονότων η ορμή της σφαίρας αυξάνεται μαζί με την ταχύτητά της. Οι συγκρούσεις στα τοιχώματα φαίνονται με την απότομη μεταβολή των ταχυτήτων και από αρνητικές σε θετικές τιμές και αντίστροφα.



**Εικόνα 19.** Διάγραμμα θέσης της σφαίρας αναλυόμενη κατά τους τρεις άξονες  $r_x$ : κίτρινο,  $r_y$ :μωβ,  $r_z$ : πράσινο



Οι ακμές στο παραπάνω διάγραμμα (Εικ. 19) δείχνουν τα σημεία σύγκρουσης της σφαίρας με τα τοιχώματα. Λόγω της ορμής της σφαίρας μετά από κάθε ανάκλαση στα τοιχώματα υπερσχύει των τυχαίων τιμών η δύναμη αντίδρασης στα τοιχώματα και μόνο όταν βρεθεί κάποια τυχαία τιμή μεγάλου μεγέθους αλλάζει δραστικά την πορεία της σφαίρας.



**Εικόνα 20** Διάγραμμα επιτάχυνσης, αναλυόμενη κατά τους τρεις άξονες  $\gamma_x$ : κίτρινο,  $\gamma_y$ : μωβ,  $\gamma_z$ : πράσινο

Οι επιταχύνσεις (Εικ. 21) είναι συνεχείς, θετικά ή αρνητικά και μόνο όταν έχουμε έντονη αντίδραση από τα τοιχώματα παρατηρούμε κάποια κορύφωση στην τιμή της επιτάχυνσης.

Το παραπάνω μοντέλο μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε όλες τις βαθμίδες της εκπαίδευσης από την πρωτοβάθμια μέχρι και την τριτοβάθμια προκειμένου να γίνει εισαγωγή στη ποιοτική ανάλυση της μοριακής δυναμικής. Επίσης όπως και το πρόβλημα του μεθυσμένου ναύτη είναι εξαιρετικό παράδειγμα για τη διδασκαλία στη τριτοβάθμια εκπαίδευση της μεθόδου Monte Carlo.

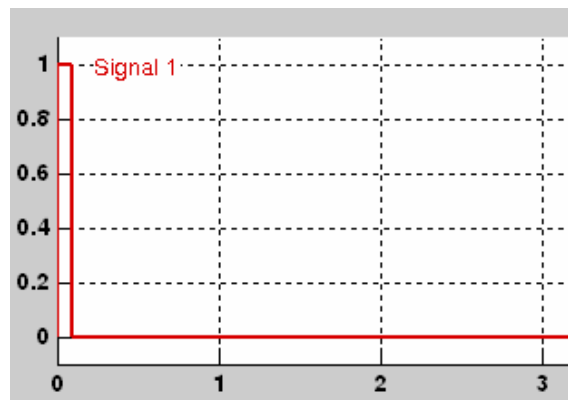
### c. ΜΠΙΛΙΑΡΔΟ

Σύμφωνα με τις αρχές της μεθόδου MC, έχουμε δημιουργήσει ένα μοντέλο παρόμοιο με το παιχνίδι μπιλιάρδου. Τέσσερις σφαίρες κινούνται σε 2 διαστάσεις, σε έναν τραπέζι με συγκεκριμένα όρια. Όταν η κάθε προσομοίωση αρχίζει, οι σφαίρες αναγκάζονται να κινηθούν από μια τυχαία στην κατεύθυνση και την τιμή δύναμη, έτσι κάθε φορά που «τρέχει» η προσομοίωση δίνει διαφορετικά αποτελέσματα. Αυτό το μοντέλο παρουσιάζει την τυχαία κίνηση ενός φυσικού συστήματος, όπου οι σφαίρες σε κάθε προσομοίωση έχουν διαφορετική συμπεριφορά. Το τελικό μοντέλο είναι ένας συνδυασμός του μοντέλου κάθε σφαίρας (Εικ. 22).

1) ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ:

- Η μάζα κάθε σφαίρας είναι 150 gr.
- Δεν υπάρχει καμία βαρύτητα στο περιβάλλον.
- Οι επιτραπέζιες διαστάσεις είναι 5 x 5 m.
- Οι σφαίρες αντιδρούν ελαστικά μόνο με τα όρια του πίνακα και όχι η μια με την άλλη.
- Η δύναμη έχει τυχαία τιμή και διεύθυνση στις σφαίρες για 0,1 sec στην έναρξη της προσομοίωσης.
- Η τυχαία γεννήτρια δύναμης δίνει τιμές ομοιόμορφης κατανομής στο διάστημα (0-1) σε N (Newton), ο χρόνος δειγματοληψίας είναι 0,1 sec.
- Οι βαθμοί ελευθερίας είναι 4 στους άξονες X, Y.
- Δεν υπάρχει καμία δύναμη να εφαρμόζεται στις σφαίρες, μετά από την αρχική δύναμη.
- Είμαστε σε θέση να δούμε την τρισδιάστατη γραφική αναπαράσταση της μετακίνησης των σφαιρών.
- Μπορούμε επίσης να δούμε τις γραφικές παραστάσεις της θέσης και της ταχύτητας κάθε σφαίρας.

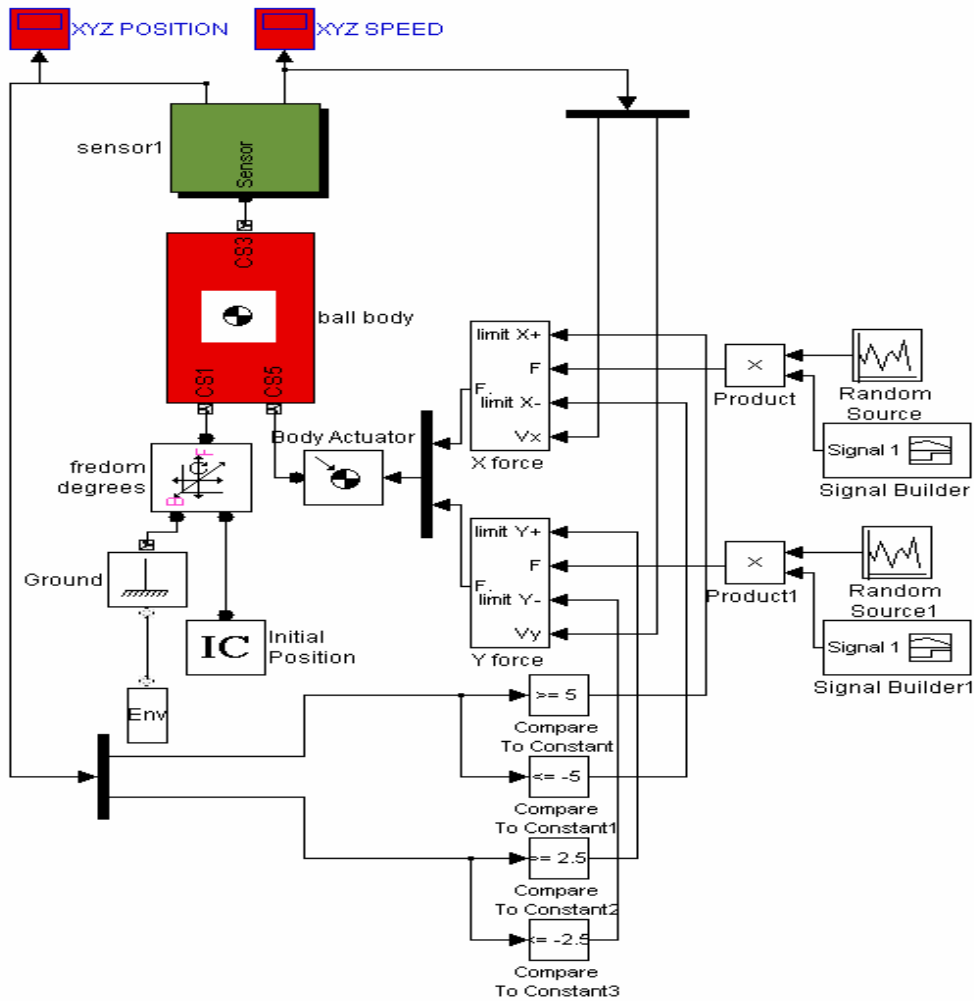
Στο σχήμα (Εικ. 22) διακρίνονται τα επιμέρους τμήματα του μοντέλου μιας σφαίρας του «Μπιλιάρδου». Στην περίπτωση αυτή έχουμε πολύ μικρότερο τμήμα παραγωγής δύναμης μιας και δεν έχουμε δύναμη για τον τρίτο άξονα Z και δεν χρειάζεται να καθορίσουμε με άλλο τυχαίο τρόπο τη διεύθυνση της δύναμης. Αυτή καθορίζεται από την τιμή της δύναμης για κάθε κατεύθυνση X, Y μιας και αφού ισχύουν για τον ίδιο χρόνο, 0,1sec, η αρχική διεύθυνση της σφαίρας θα είναι η συνισταμένη των επιμέρους τυχαίων. Ο χρόνος της αρχικής δύναμης καθορίζεται από το μπλοκ «Signal Builder» όπου δίνεται το σήμα της (Εικ. 21)



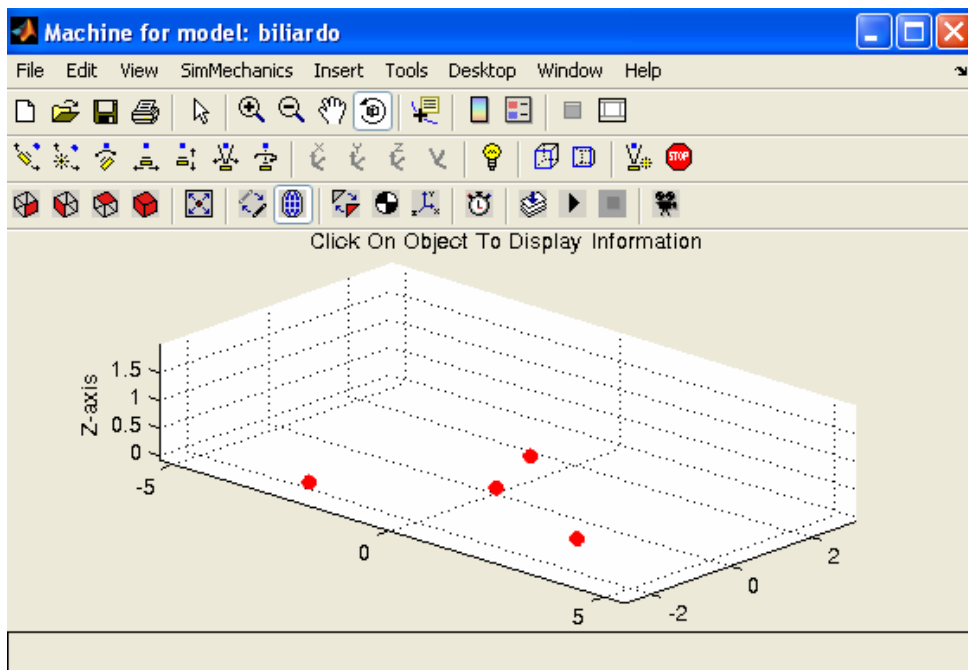
Εικόνα 21 Σήμα εκκίνησης από το «Signal Builder»

Διακρίνεται επίσης στο σχήμα (Εικ. 22) το τμήμα ελέγχου της θέσης όπου συγκρίνει τη θέση της σφαίρας με μια τιμή που είναι τα όρια του δοχείου, το τμήμα αυτό για λόγους οικονομίας χώρου δεν παρουσιάστηκε στο προηγούμενο μοντέλο «Μεθυσμένη Σφαίρα», η λειτουργία του είναι ίδια με το παρόν μοντέλο αλλά σε τρεις διαστάσεις.

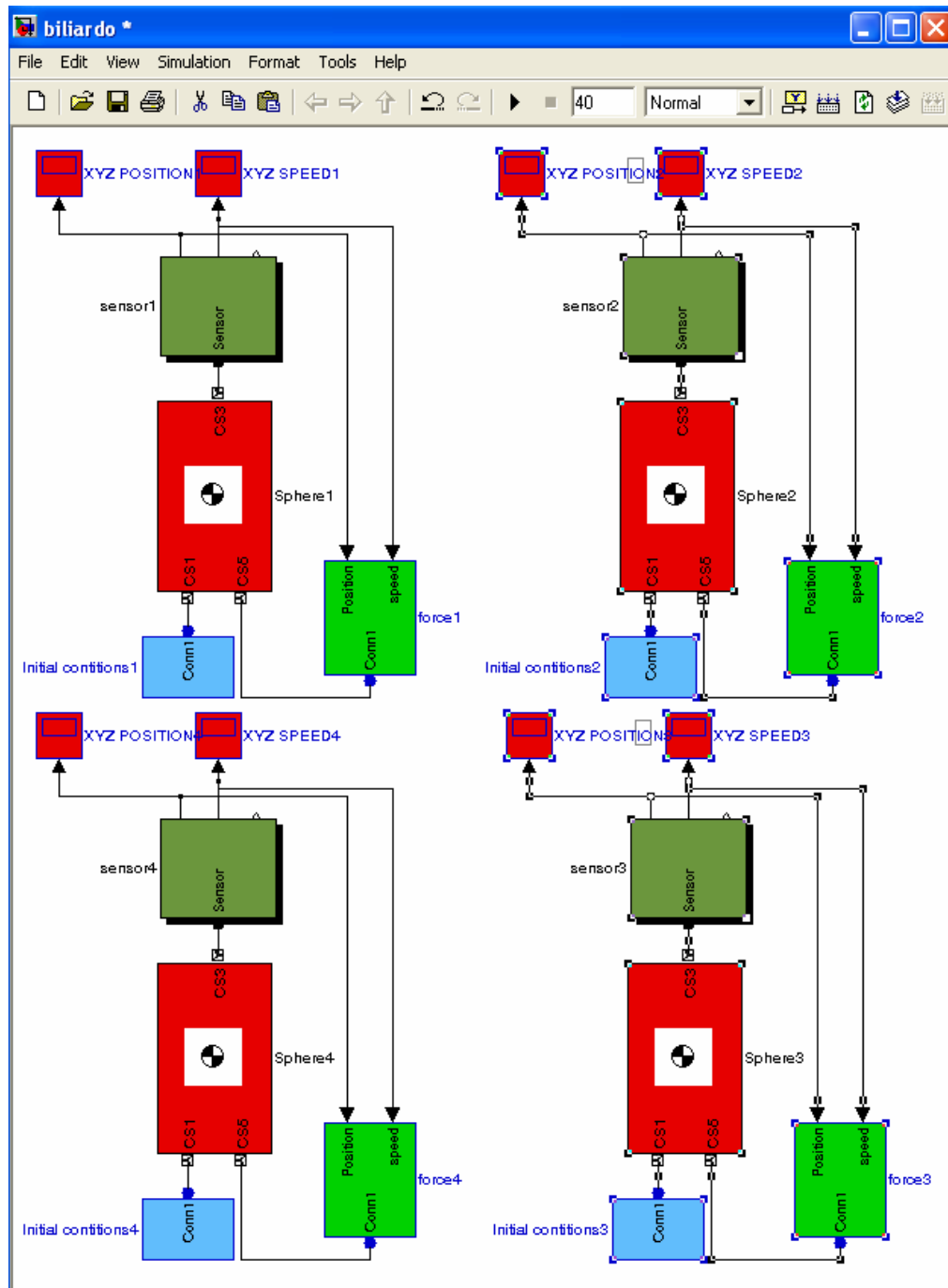
2) ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΣ



Εικόνα 22. Το μοντέλο μιας σφαίρας που κινείται σε 2D και αντιδρά μόνο με τα τοιχώματα



Εικόνα 23. Τρισδιάστατη απεικόνιση της κίνησης των 4 σφαιρών στο μοντέλο «Μπιλιάρδο»



Εικόνα 24. Το ολοκληρωμένο μοντέλο με ομαδοποιημένα τα επιμέρους συστήματα

### 3) ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Στο παραπάνω μοντέλο υπάρχει η δυνατότητα να δούμε την γραφική παράσταση της ταχύτητας, της θέσης και της επιτάχυνσης ενώ μπορούμε να εξάγουμε τα αποτελέσματα σύνθεσης των παραπάνω δεδομένων, όπως μέση και ενεργή ταχύτητα ή πίεση που ασκούν οι σφαίρες στα τοιχώματα.

Παρόλα αυτά η αξία του παραπάνω μοντέλου έγκειται στην παρουσίαση της κίνησης μορίων που αντιδρούν με τα τοιχώματα του δοχείου, ούτως ώστε να γίνει εισαγωγή στην έννοια της τυχαιότητας της κίνησης των μορίων και τη αντίδρασή τους όταν συγκρούονται. Επίσης λόγω της κίνησης σε 2 διαστάσεις προσφέρεται για διδασκαλία σε μαθητές που αντιμετωπίζουν δυσκολίες με την κατανόηση των τρισδιάστατων μοντέλων.

Η διαφορετικότητα του παραπάνω μοντέλου σε σχέση με το προηγούμενο (Μεθυσμένη Σφαίρα) δεν είναι μόνο η κίνηση σε δύο διαστάσεις αλλά και η μη συνεχής άσκηση τυχαίων δυνάμεων. Οι σφαίρες μετά από μια αρχική δύναμη αυτοτροφοδοτούνται από δύναμη με την αντίδραση τους στα τοιχώματα του τραπέζιου. Το γεγονός αυτό καθιστά το μοντέλο ένα έξοχο παράδειγμα προγράμματος, που εκμεταλλευόμενο τη μέθοδο Monte Carlo εξελίσσεται οδηγούμενο από τα γεγονότα της προσομοίωσης (Event Based Programming). Έτσι μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη διδασκαλία προγραμματισμού που οδηγείται από τα γεγονότα, στη δευτεροβάθμια και τριτοβάθμια εκπαίδευση. Στο επόμενο μοντέλο παρουσιάζεται το πως το τρισδιάστατο πλέον μοντέλο του «Μπιλιάρδου» χρησιμοποιήθηκε για τη διδασκαλία του συγκεκριμένου διδακτικού αντικειμένου.

#### D. ΑΕΡΙΟ 1

Ο σχεδιασμός του μοντέλου γίνεται με βάση τις αρχές της μεθόδου Monte Carlo, τα μόρια κινούνται αντιδρώντας με τα τοιχώματα του δοχείου και με τα άλλα μόρια, ενώ πάνω τους ασκούνται Νευτώνειες δυνάμεις. Η σημαντική διαφορά με το προηγούμενο μοντέλο είναι ότι πλέον οι σφαίρες κινούνται στο χώρο και χρειάζεται να γίνεται ο υπολογισμός των δεδομένων σε τρεις διαστάσεις. Επίσης, ενώ το προηγούμενο μοντέλο παρουσίαζε τη συμπεριφορά σφαιρών μπιλιάρδου για το παρόν μοντέλο μπορούμε να πούμε ότι είναι μια στοχαστική προσομοίωση της μοριακής δυναμικής αερίου με τα μόρια να αντιδρούν μεταξύ τους και με τα τοιχώματα του δοχείου.

Το παρόν μοντέλο χρησιμοποιήθηκε για τη διδασκαλία του αντικειμένου «Προγραμματισμός Οδηγούμενος από Γεγονότα». Επιλέξαμε το στοχαστικό μοντέλο της κίνησης των μορίων ενός αερίου μιας και αποτελεί εξαιρετικό παράδειγμα προσομοίωσης οδηγούμενης από γεγονότα ενώ επιτυγχάνουμε μια ενδιαφέρουσα διεπιστημονική προσέγγιση του διδακτικού αντικειμένου.

##### 1) ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ

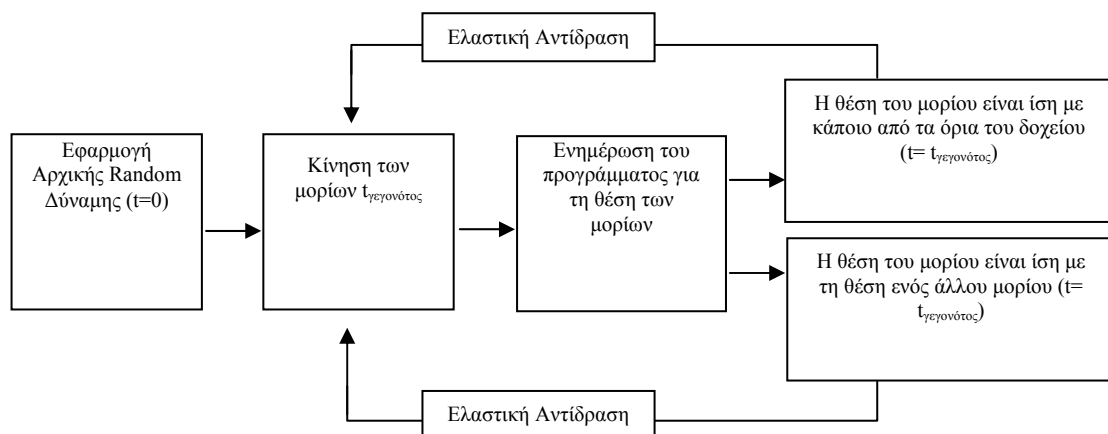
Τα βασικά χαρακτηριστικά του μοντέλου είναι:

- Η μάζα κάθε μορίου είναι  $21,81 \times 10^{-23}$  gr, που αντιστοιχεί στη μάζα του μορίου του αερίου Xenon (Xe).
- Το δοχείο έχει διαστάσεις 3x3x3m και δεν υπάρχουν πεδιακές δυνάμεις.
- Τα μόρια αντιδρούν ελαστικά με τα τοιχώματα και με τα άλλα μόρια.

- Οι βαθμοί ελευθερίας τους είναι 6 στους τρεις άξονες x, y, z.
- Δεν επιτρέπεται η περιστροφή τους.
- Εφαρμόζεται μια αρχική, τυχαία σε διεύθυνση και τιμή δύναμη, κατά την έναρξη της προσομοίωσης και για περίπου 0,1 sec.
- Η γεννήτρια τυχαίων αριθμών έχει ομοιόμορφη κατανομή στο χώρο  $(-0,2 \times 10^{-23} - 0,2 \times 10^{-23})$  σε N, και δίνει τιμές κάθε 0,05 sec (sample time).
- Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης παρουσιάζονται ως τρισδιάστατη απεικόνιση της κίνησης των μορίων, αλλά και με γραφήματα της θέσης, της ταχύτητας και της επιτάχυνσης κάθε μορίου.

## 2) ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΣ

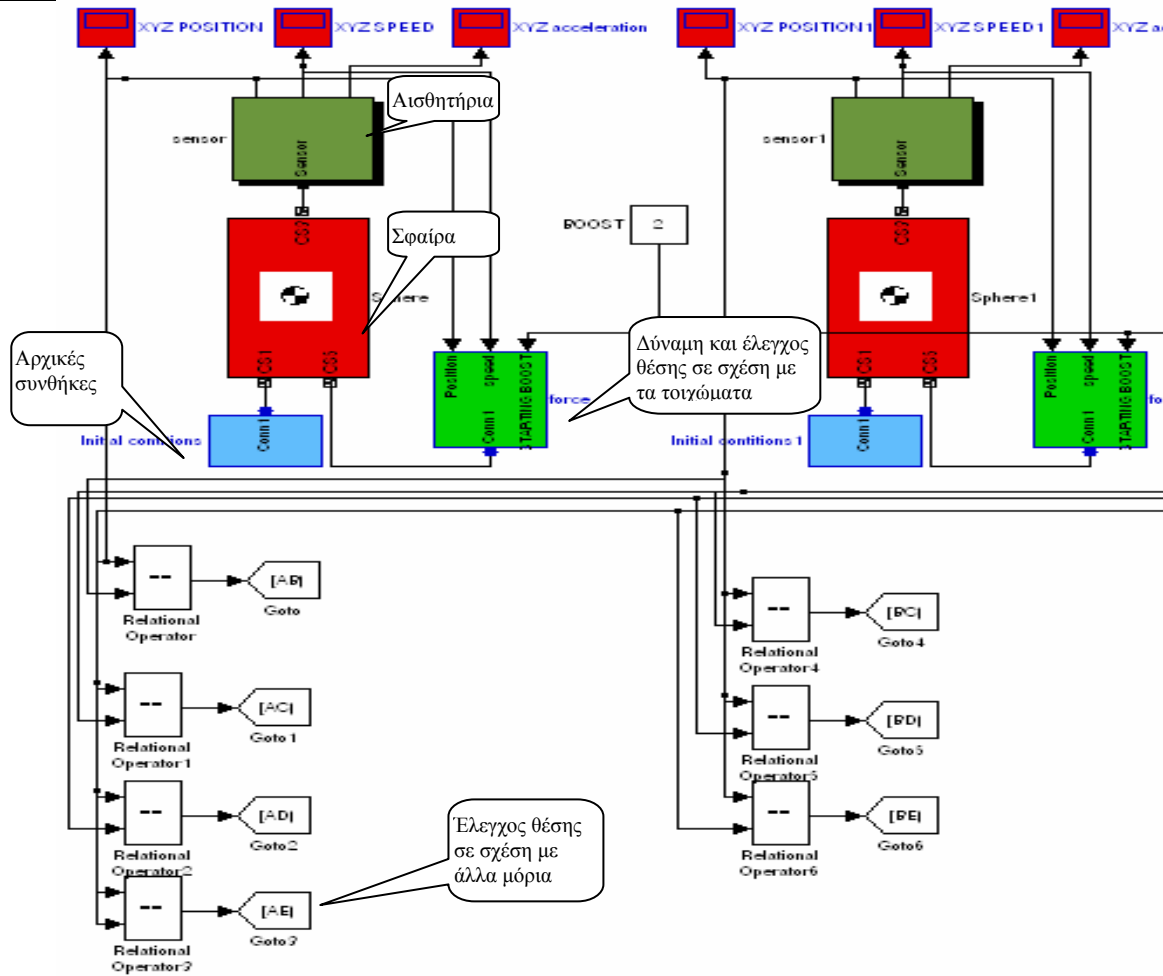
Ο προγραμματισμός του μοντέλου είναι οδηγούμενος από τα γεγονότα, τα οποία παρέχει το πρόγραμμα κατά την εκτέλεσή του, δηλαδή τα αποτελέσματα της προσομοίωσης. Η λογική που ακολουθήθηκε κατά το σχεδιασμό του προγράμματος φαίνεται στην Εικ. 25.



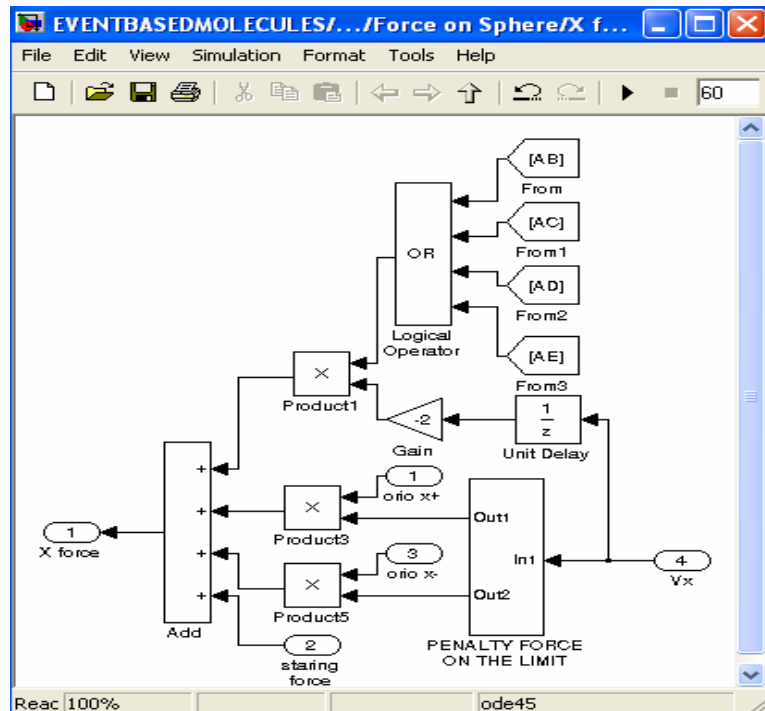
**Εικόνα 25.** Λειτουργία του προγράμματος

Στο παρακάτω σχήμα (Εικ.26) παρουσιάζεται ο κώδικας των δύο από τα συνολικά 5 μόρια του μοντέλου. Διακρίνονται τα υποσυστήματα του σώματος της σφαίρας, των αρχικών συνθηκών, του αισθητήρα αποτελεσμάτων, της παραγωγής της απαιτούμενης κάθε φορά δύναμης και του ελέγχου σύγκρουσης με άλλα μόρια.

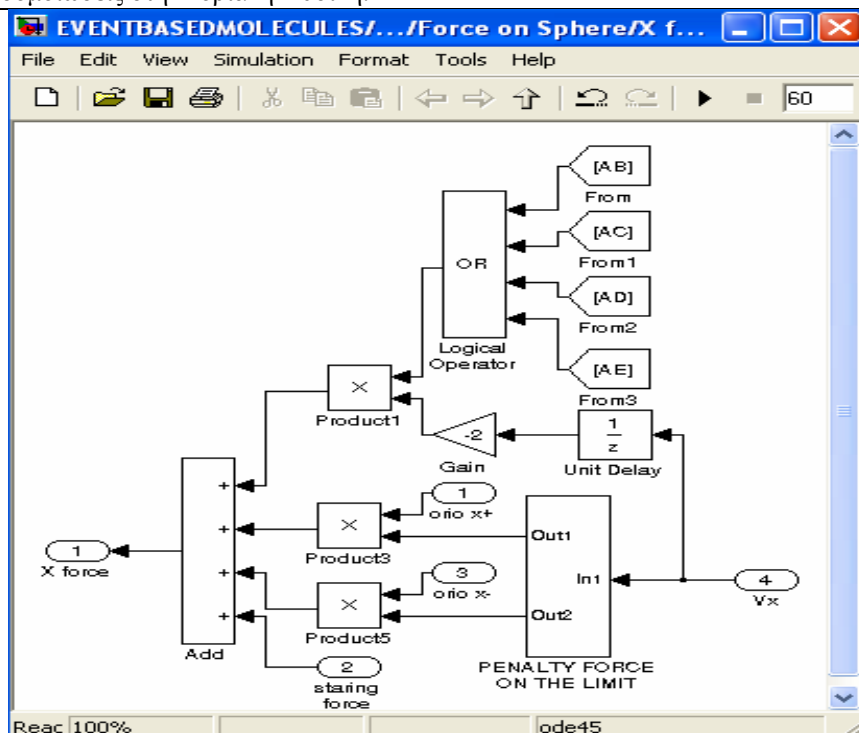
Στις παρακάτω εικόνες παρουσιάζονται, το τμήμα παραγωγής δύναμης του πρώτου μορίου (Εικ. 27), το υποσύστημα που παράγει την δύναμη αντίδρασης στα τοιχώματα κατά την συνάντηση των δύο μορίων, κατά τον άξονα X (Εικ. 28).



Εικόνα 26 Μοντέλο δύο από τα πέντε μόρια



Εικόνα 27. Ελαστική αντίδραση



Εικόνα 28. Παραγωγής δύναμης

Όπως παρατηρούμε από τα παραπάνω, τα τμήματα του προγράμματος είναι διακριτά ενώ η επικοινωνία ανάμεσα στα τμήματα του προγράμματος δίκην ηλεκτρικών σημάτων, βοηθά ώστε να μην χάνεται η συνέχεια στη λογική του προγραμματισμού, όπως και στα λογικά διαγράμματα. Τα χαρακτηριστικά αυτά σε συνδυασμό με τη λογική της στοχαστικής προσομοίωσης MC με οδηγό τα γεγονότα, βοηθά στη διδασκαλία της τεχνικής προγραμματισμού οδηγούμενου από τα γεγονότα.

### 3) ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑ

Με βάση το παραπάνω στοχαστικό μοντέλο προσομοίωσης που οδηγείται από γεγονότα, προχωρήσαμε στη διδασκαλία του διδακτικού αντικείμενου «Προγραμματισμός που οδηγείται από γεγονότα», που διδάσκεται στην Α΄ τάξη του Β΄ Κύκλου των ΤΕΕ στον τομέα Ηλεκτρονικών, ειδικότητας υπολογιστικών συστημάτων και δικτύων. Το ίδιο διδακτικό αντικείμενο διδάσκεται και στο Γενικό Λύκειο στον Τεχνολογικό τομέα και η συγκεκριμένη διδακτική πρόταση μπορεί να εφαρμοστεί και εκεί.

Η προετοιμασία της διδασκαλίας περιλαμβάνει α) έλεγχο καλής λειτουργίας του εργαστηριακού εξοπλισμού, β) διανομή Φύλλου Πράξης με Τίτλο, Σκοπούς του μαθήματος, Εισαγωγικές πληροφορίες, Βοηθήματα, Εργαλεία – Μηχανήματα, Πορεία εργασίας συνοπτική και σαφής για να αποφευχθούν διαδικαστικά προβλήματα (Πλαγιαννάκος, 1995), γ) εφαρμογή με το Simulink και δ) Φύλλο Ανάθεσης Εργασίας. Η διδασκαλία πραγματοποιήθηκε σε 2 διδακτικές ώρες λόγω της έκτασης της εφαρμογής.



Στους μαθητές, μετά από την εισαγωγή και την ενημέρωση για το αντικείμενο, διανεμήθηκε το «Φύλλο Πράξης» με τα εξής βήματα:

- Ενεργοποίηση των Η/Υ.
- Άνοιγμα του προγράμματος Matlab, από το μενού έναρξη των Windows.
- Άνοιγμα της βιβλιοθήκης του Simulink, από το μενού “start” του Matlab.
- Άνοιγμα από το μενού «File» της βιβλιοθήκης του αρχείου, όπου ήδη έχει αποθηκευτεί το μοντέλο.
- Εκτέλεση της προσομοίωσης.
- Συμπλήρωση Φύλλου Ανάθεσης Εργασίας.

#### ΦΥΛΛΟ ΑΝΑΘΕΣΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

Συμπληρώστε τον παρακάτω Πίνακα 1:

Πίνακας 2

A/A	ΕΡΩΤΗΣΗ	ΑΠΑΝΤΗΣΗ
1	Ποια είναι τα όρια του δοχείου;	
2	Ποια η τιμή της αρχικής δύναμης;	
3	Για πόση ώρα ασκείται η αρχική δύναμη;	
4	Ποιοι δύο παράγοντες καθορίζουν την άσκηση δύναμης στο μόριο, όταν αυτό είναι στα όρια του δοχείου;	1) 2)
5	Ποιοι δύο παράγοντες καθορίζουν την άσκηση δύναμης στο μόριο, όταν αυτό συναντιέται με ένα άλλο μόριο;	1) 2)
6	Οι παραπάνω παράγοντες καθορίζονται εξωτερικά ή εσωτερικά από τα αποτελέσματα του προγράμματος;	

- Από τι καθορίζεται ο χρόνος της προσομοίωσης;
- Κάθε φορά που εκτελείται το πρόγραμμα, έχει τα ίδια αποτελέσματα και γιατί;
- Σε ποιο τμήμα του προγράμματος έχουμε τις συνθήκες για να παραχθεί νέα δύναμη;
- Διαγράψτε την γεννήτρια παραγωγής τυχαίων τιμών σε ένα μόριο, τι παρατηρείται για τον χρόνο προσομοίωσης;
- Δημιουργήστε το λογικό διάγραμμα για τη δημιουργία προγράμματος προσομοίωσης που οδηγείται από τα γεγονότα, μιας μπάλας που αναπηδά.

## Ε. ΑΕΡΙΟ 2

Προκειμένου να δημιουργηθεί ένα μοντέλο μοριακής δυναμικής ενός αερίου, έχουμε επιλέξει το αέριο Xenon (Xe), το οποίο έχει τα βαρύτερα μόρια που κινούνται σχετικά αργά. Επιλέγουμε να δημιουργήσουμε ένα μοντέλο 8 μορίων, για καλύτερη και γρηγορότερη προσομοίωση στον υπολογιστή.

### 1) ΔΕΔΟΜΕΝΑ

- Η μάζα κάθε μορίου είναι  $21,81 \times 10^{-23}$  gr.
- Από την (Εξ. 25) διαπιστώνεται ότι  $u_{rms}=7.5$ m/sec στους  $T=300$  °K.
- Η γραμμομοριακή μάζα του αερίου Xenon είναι  $M=131,3$ gr/mol.
- Για 8 μόρια του αερίου έχουμε  $n= 1.33 \times 10^{-23}$  mol
- Από την (Εξ. 34) προκύπτει ότι η εσωτερική ενέργεια του συγκεκριμένου αερίου είναι  $U=4.976 \times 10^{-20}$  J στους  $T=300$  °K.
- Η πίεση αερίου σε αυτήν την κατάσταση από την Εξ. 16 είναι  $p=1.228 \times 10^{-24}$  N/m<sup>2</sup>.

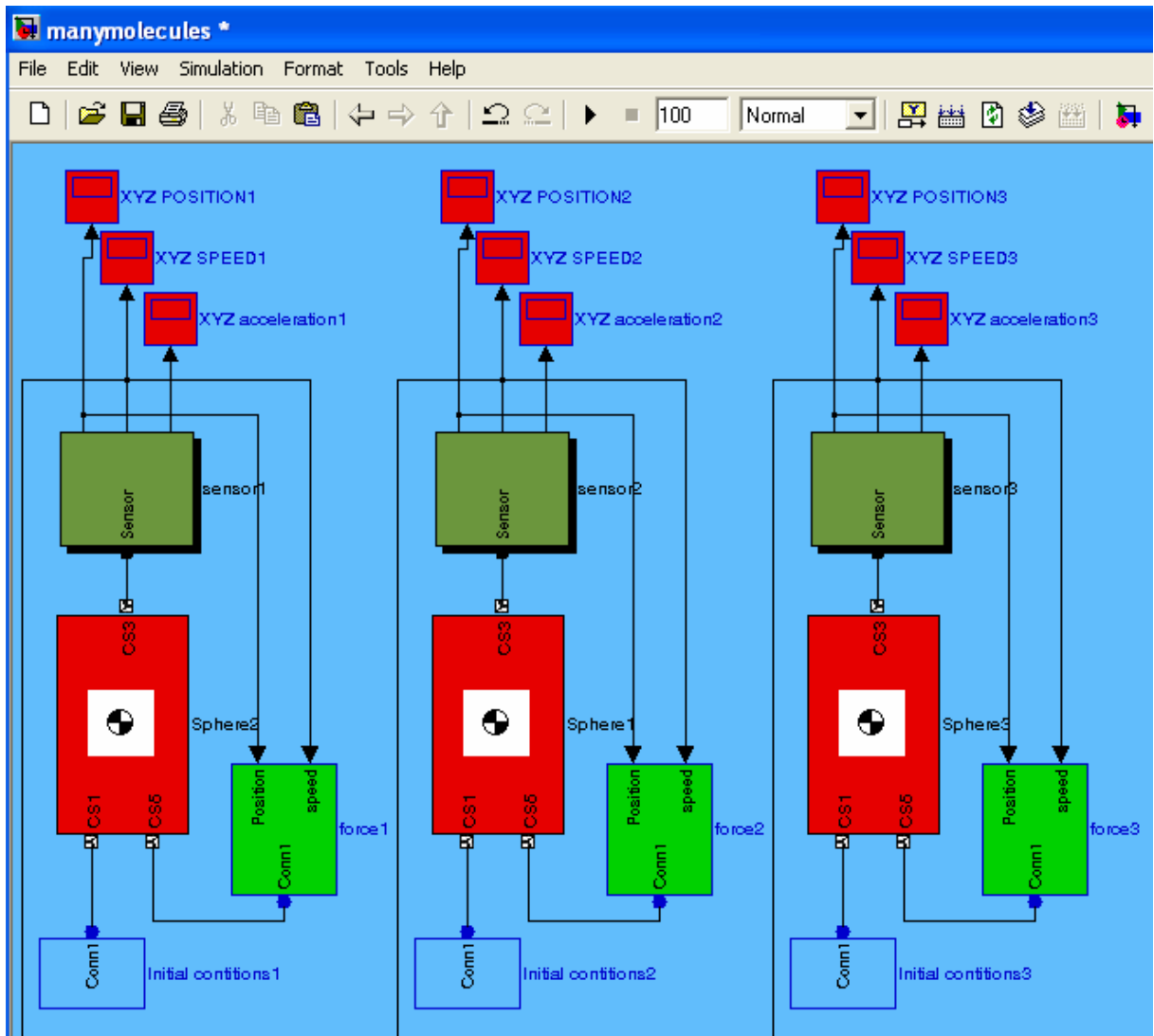
Οι ανωτέρω τιμές είναι θεωρητικές και αναμένουμε να αποδειχθούν στο μοντέλο. Οι πολύ μικρές τιμές της τάξης του  $10^{-20}$  είναι κάτι που οφείλεται στο ότι έχουμε πολύ λίγα μόρια λόγω των πεπερασμένων δυνατοτήτων της υπολογιστικής δύναμης των Η/Υ.

### 2) ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ:

- Η μάζα κάθε σφαίρας - μορίου είναι  $21.81 \times 10^{-23}$  gr.
- Δεν υπάρχει βαρύτητα στο περιβάλλον που κινούνται τα μόρια, όπως και καμία άλλη επίδραση από πεδία.
- Οι διαστάσεις του δοχείου είναι 30x30x30 m.
- Οι σφαίρες αντιδρούν ελαστικά μόνο με τα όρια του πίνακα και όχι η μια με την άλλη.
- Η δύναμη στις σφαίρες είναι τυχαία, σε τιμή και κατεύθυνση.
- Η τυχαία γεννήτρια της τιμής της δύναμης είναι Γκαουσιανή, με χρόνο δειγματοληψίας είναι 0.05sec, με τη μέση τιμή 0 και μέση μεταβολή  $0.2 \times 10^{-23}$  N.
- Η τυχαία γεννήτρια της κατεύθυνσης δύναμης είναι ομοιόμορφη, ο χρόνος δειγμάτων είναι 0.005sec, στο διάστημα (0,1).
- Οι βαθμοί ελευθερίας είναι 6 στους άξονες X, Y, Z χωρίς περιστροφή.
- Η δύναμη εφαρμόζεται συνεχώς στις σφαίρες.
- Ο χρόνος προσομοίωσης είναι 100sec.

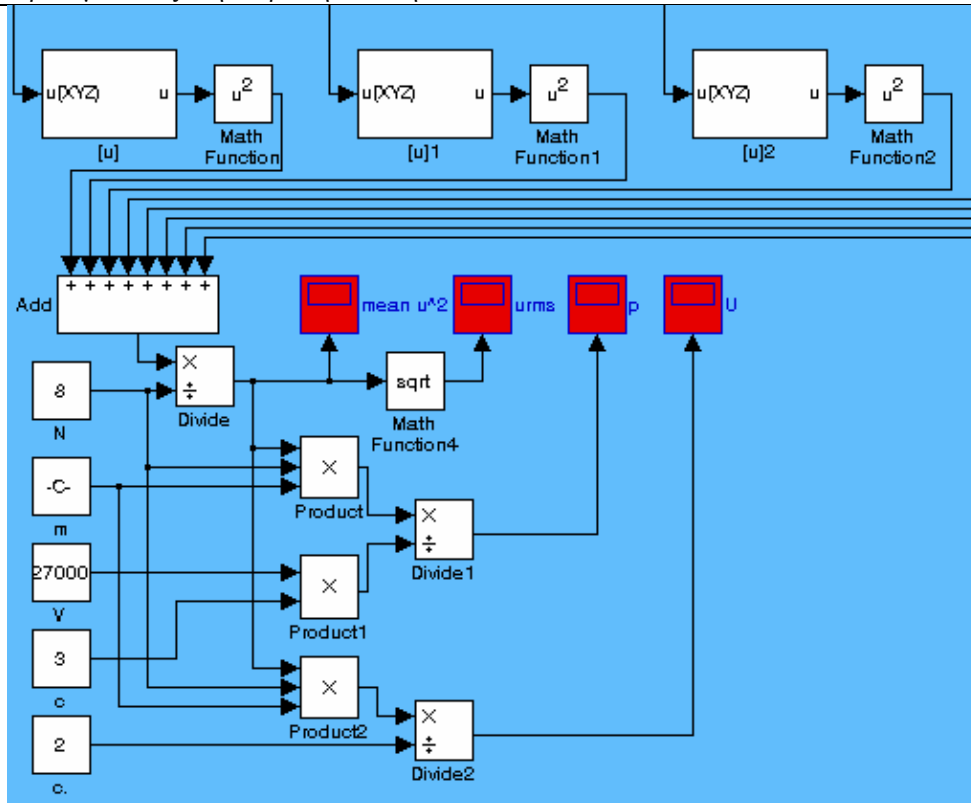
Οι ιδιότητες αυτού του μοντέλου είναι σχεδόν κοινές με το μοντέλο μεθυσμένη σφαίρα. Δεικνύοντας με αυτό τον τρόπο ότι αλλάζοντας τις ιδιότητες του μοντέλου είναι δυνατή η προσομοίωση της κίνησης οποιουδήποτε αερίου με οποιοδήποτε αριθμό μορίων. Επαναλαμβάνουμε ότι επιλέγεται εδώ το αέριο Xenon μιας και έχει σχετικά βαρύ μόριο και κινείται με μικρές ταχύτητες και έτσι είναι πιο εύκολα παρατηρήσιμη η κίνηση στην τρισδιάστατη προσομοίωση.

Στο παρακάτω σχήμα (Εικ. 29) παρουσιάζεται ο κώδικας τριών από τα συνολικά 8 μόρια.



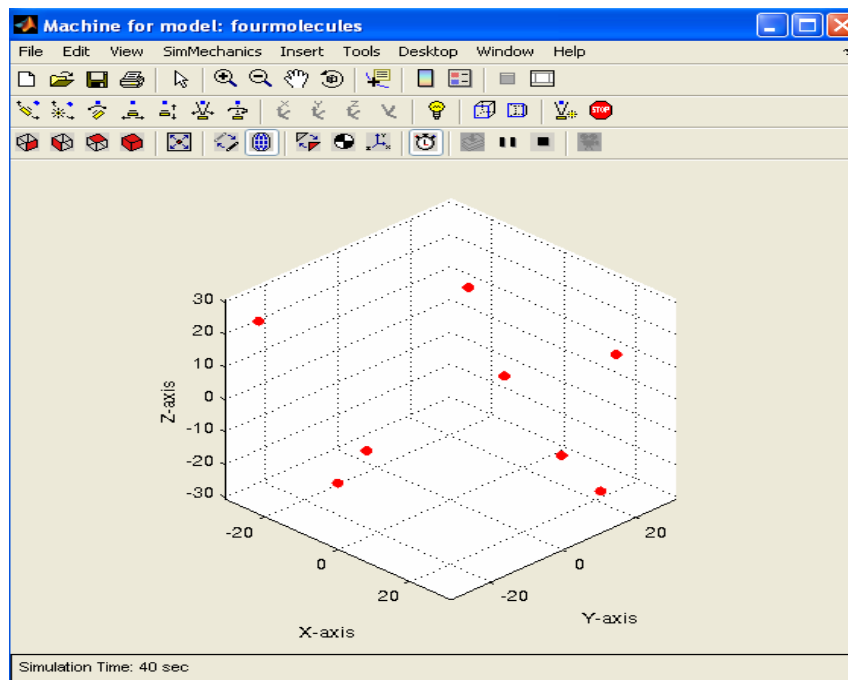
Εικόνα 29 Ο κώδικας από τα τρία μόρια

Στο παρακάτω σχήμα (Εικ.30) φαίνεται ο γραφικός κώδικας για τον υπολογισμό της ενεργής ταχύτητας  $u_{rms}$  από την Εξ. 25, της πίεσης  $P$  από την Εξ. 22, και της εσωτερικής ενέργειας  $U$  από την Εξ. 37. Πρόκειται συνέχεια του πιο πάνω σχήματος και διακρίνεται κατά σειρά ο υπολογισμός της απόλυτης τιμής της εκάστοτε ταχύτητας  $|u|$  στη συνέχεια το άθροισμα των τετραγώνων και η υλοποίηση των εξισώσεων για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων στα μπλοκ «score».



Εικόνα 30. Υπολογισμός ενεργής ταχύτητας  $u_{rms}$ , πίεσης  $P$  και εσωτερικής ενέργειας  $U$

Το εργαλείο «machine for the model» (Εικ. 31) αναπαριστά τη κίνηση των μορίων στο χρόνο προσομοίωσης. Οι γραφικές δυνατότητες της μηχανής είναι πολύ ικανοποιητικές και επιπρόσθετα είμαστε σε θέση να αλλάζουμε τη γωνία παρατήρησης κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης.

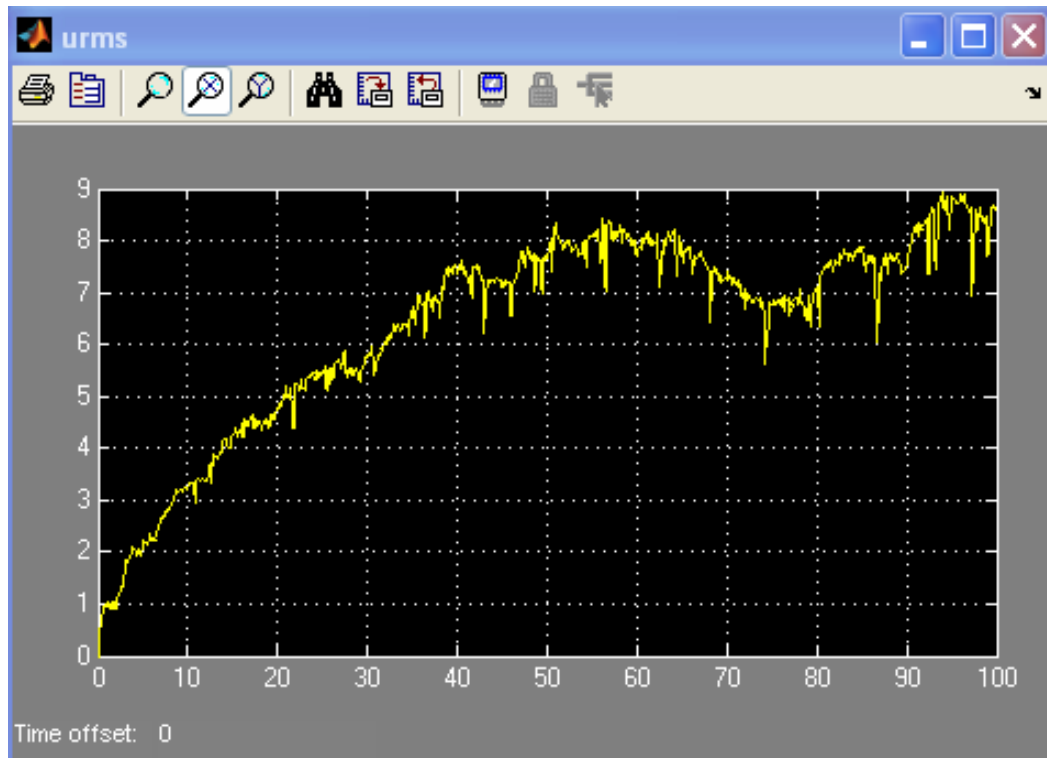


Εικόνα 31. Η τρισδιάστατη κίνηση των μορίων

3) ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Είμαστε σε θέση να εξαγάγουμε σημαντικά αποτελέσματα από το μοντέλο, σχετικά με τη μοριακή δυναμική και ειδικά  $u_{rms}$ ,  $U$  και  $p$ . Το μοντέλο γίνεται σταθερότερο μετά από τα πρώτα 40 sec, λόγω της τεχνικής MC, οι οποία χρειάζεται αρκετά τυχαία δείγματα για να δώσουν τα πρώτα σταθερά αποτελέσματα. Επιπλέον, αυτή η ασταθής κατάσταση στην έναρξη της προσομοίωσης ενισχύεται από την αδράνεια των σφαιρών, οι οποίες ενεργούν όπως οι πραγματικές σφαίρες.

Ενεργή ταχύτητα  $u_{rms}$

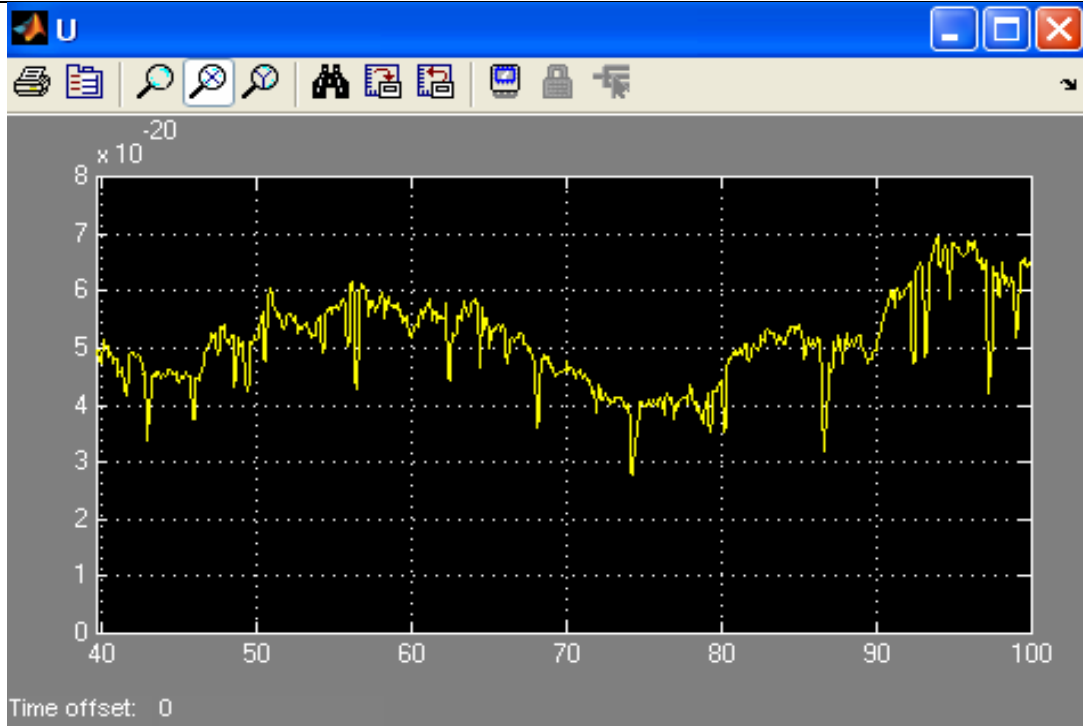


**Εικόνα 32.** Ενεργή ταχύτητα  $u_{rms}$  (m/sec)

Στο παραπάνω διάγραμμα (Εικ. 32) παρατηρούμε μια αυξανόμενη τιμή της ταχύτητας και μετά από 40sec σταθεροποιείται στα 7-8 m/sec. Αυτή η τιμή είναι περίπου αυτή που αναμένουμε. Κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης MC, κάθε φορά που τρέχουμε το πρότυπο, παίρνουμε διαφορετικά αποτελέσματα αλλά παρόμοια με το ανωτέρω διάγραμμα.

Εσωτερική ενέργεια  $U$

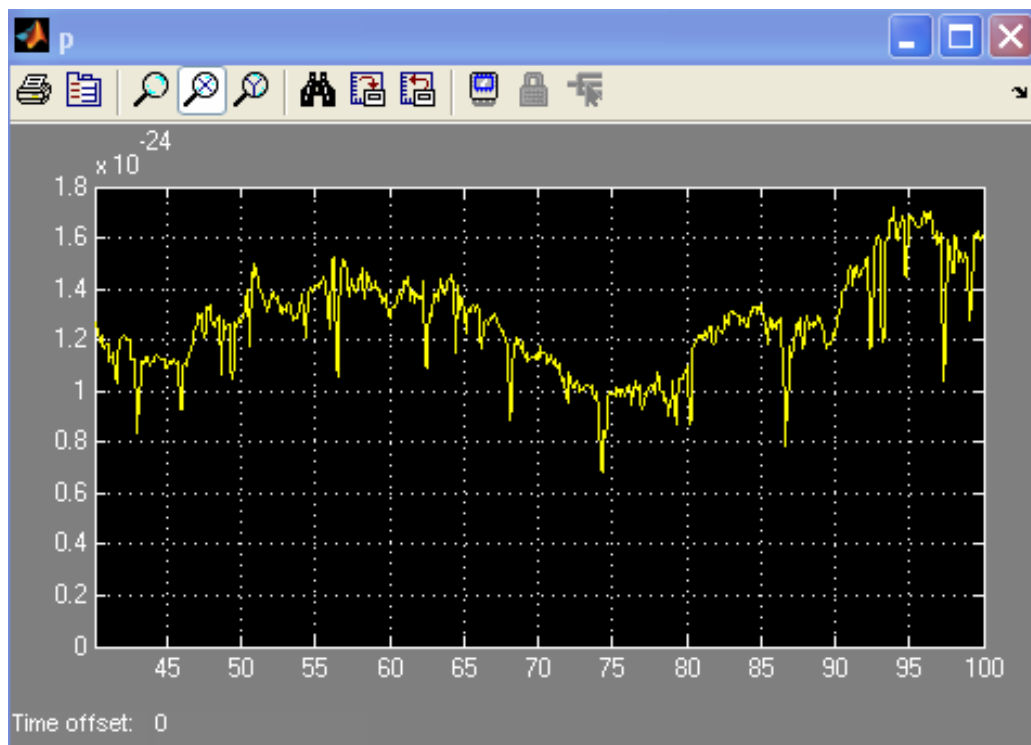
Στο παρακάτω διάγραμμα (Εικ. 33) μετά από 40 sec είμαστε σε θέση να δούμε μια σταθερή τιμή  $U=4.976 \times 10^{-20}$  J στους  $T=300$  °K. Αυτή η τιμή είναι περίπου αυτή που αναμέναμε.



Εικόνα 33. Εσωτερική ενέργεια U (J)

Πίεση p

Στο παραπάνω διάγραμμα (Εικ. 34) μετά από 40 sec παρατηρούμε μια σταθερή τιμή πίεσης  $p=1.7 \times 10^{-24} \text{ N/m}^2$ . Αυτή η τιμή είναι περίπου αυτή που αναμέναμε.



Εικόνα 34. Πίεση p (N/m<sup>2</sup>)

## F. ΔΙΑΤΟΜΙΚΟ ΑΕΡΙΟ

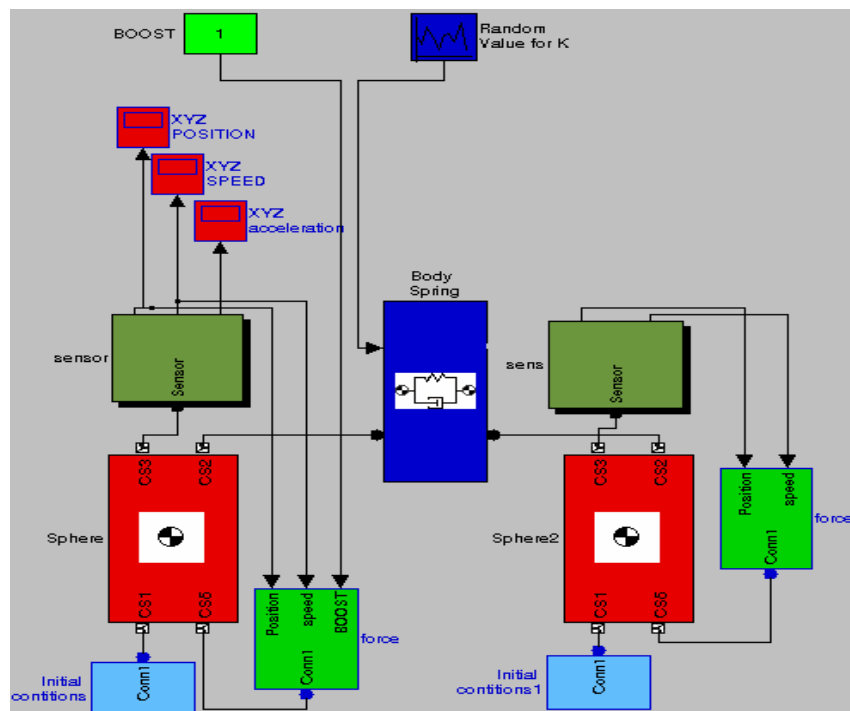
Ιδανικά αέρια δεν υπάρχουν στη φύση. Για να δημιουργήσουμε ένα αξιόπιστο μοντέλο μορίων αερίων πρέπει να λάβουμε υπόψη ότι εκτός από τα μονοατομικά αέρια που η συμπεριφορά τους ομοιάζει με αυτή των ιδανικών αερίων, υπάρχουν και τα πολυατομικά μόρια αερίων, αλλά και τα μίγματα αερίων με διαφορετικό αριθμό ατόμων στα μόριά τους. Η διαφορές αυτές είναι σημαντικές μιας και η κινήσεις των μορίων αλλάζουν και ως εκ τούτου και η συμπεριφορά του αερίου.

Ένα πρώτο βήμα για την δημιουργία ενός πιο ρεαλιστικού μοντέλου αερίου είναι η δημιουργία μοντέλου διατομικού αερίου. Ως διατομικό αέριο επιλέγουμε το υδρογόνο  $H_2$ , ένα πολύ κοινό αέριο που λόγω του πολύ ελαφρού μορίου του, παρουσιάζει ξεχωριστά κινητικά χαρακτηριστικά όπως η διαφυγή του στο διάστημα, η πολύ χαμηλή θερμοκρασία υγροποίησης κ.α.. Τα χαρακτηριστικά αυτά το καθιστούν αρκετά ενδιαφέρον και στην εκπαιδευτική διαδικασία

### 1) ΔΕΛΟΜΕΝΑ

Από τη βιβλιογραφία (Serway, 2003) γνωρίζουμε ότι η μάζα κάθε μορίου είναι  $33,55 \times 10^{-25}$  gr. Από τη σχέση Εξ. 25, υπολογίζουμε ότι η ενεργός ταχύτητα των μορίων είναι  $1,93 \times 10^3$  m/sec για θερμοκρασία  $T=300^\circ K$ . Δημιουργώντας ένα μοντέλο που περιλαμβάνει 8 μόρια ο αριθμός των mol θα είναι  $n=1,33 \times 10^{-23}$  mol, από την Εξ. 34 υπολογίζουμε την εσωτερική ενέργεια  $U=4,98 \times 10^{-23}$  J και από την Εξ. 16 την πίεση  $p=1,23 \times 10^{24}$  N/m<sup>2</sup>.

Οι παραπάνω τιμές είναι θεωρητικές και περιμένουμε να επαληθευτούν από τα αποτελέσματα του μοντέλου.



Εικόνα 35. Γραφικός κώδικας διατομικού αερίου. Οι δύο σφαίρες-μόρια ενώνονται ελαστικά με το μπλοκ «Body Spring»

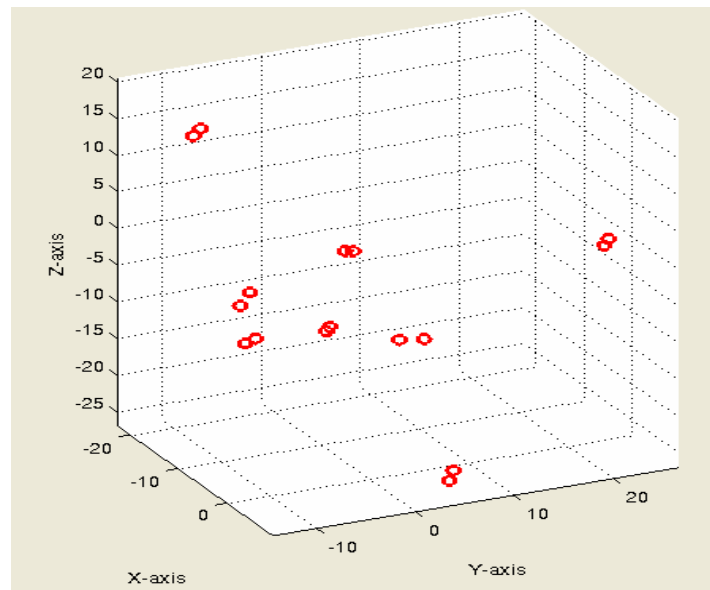
2) *ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ*

- Δημιουργούμε σφαίρα μάζας  $m=16,75 \times 10^{-25}$  gr με το μπλοκ «body» (Εικ. 35).
- Ορίζουμε αρχικές συνθήκες μηδενικής βαρύτητας, θέσης και βαθμών ελευθερίας από τα μπλοκ «environment, linear position, joint, ground»
- Δίνουμε κίνηση στη σφαίρα με τιμές από τις γεννήτριες τυχαίων αριθμών χρησιμοποιώντας το μπλοκ «body actuator». Η κατανομή των τιμών είναι Gaussian μιας και η θεωρητική κατανομή ταχυτήτων Maxwell – Boltzmann των μορίων προσομοιάζει αυτή της κατανομής Gauss.
- Παρεμβάλουμε ένα πολλαπλασιαστική boost ώστε να μεταβάλουμε την ασκούμενη δύναμη.
- Δημιουργούμε δεύτερη σφαίρα μάζας  $m=16,75 \times 10^{-25}$  gr. Συνδέουμε τις δύο σφαίρες με το μπλοκ «body spring» (Εικ. 35).
- Συνδέουμε την τιμή του συντελεστή ταλάντωσης ( $\kappa$ ) με γεννήτρια τυχαίων αριθμών.
- Κάθε φορά που μια σφαίρα πλησιάζει στο όριο των 30 m, που είναι τα όρια του «δοχείου» ασκείται πάνω τους δύναμη από τη σχέση της Εξ.28, τέτοια ώστε να εξουδετερώνει την κάθετη στο επίπεδο ορμή και να της προσδίδει μια αντίθετη κατεύθυνση.
- Αναπαράγουμε το παρόν μοντέλο ώστε να δημιουργήσουμε και άλλα μόρια.
- Δημιουργώντας αλγόριθμους από τις εξισώσεις υπολογισμού μέσης (Εξ. 23) και ενεργής ταχύτητας (Εξ. 25), εσωτερικής ενέργειας (Εξ. 37) και πίεσης (Εξ. 22) και κάνοντας λήψη των δεδομένων κίνησης των σφαιρών από τα μπλοκ «body sensor», υπολογίζουμε τα σχετικά μεγέθη.
- Οι βαθμοί ελευθερία είναι 6 σε X, Y, Z.
- Ο χρόνος προσομοίωσης είναι 100 sec.

3) *ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ*

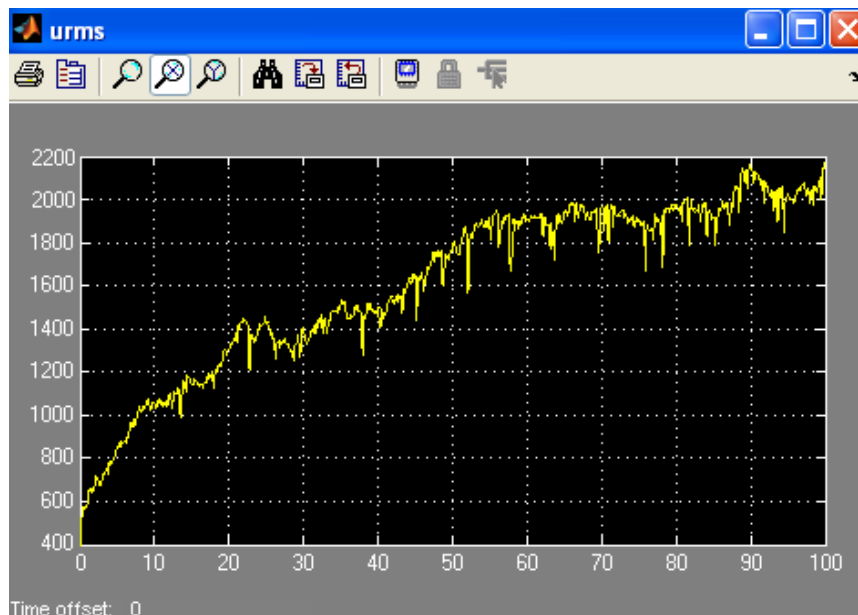
Η κίνηση των μορίων παρουσιάζεται με τρισδιάστατο γράφημα (Εικ. 36) όπου τα μόρια φαίνονται να κινούνται σε πραγματικό χρόνο και να ταλαντεύονται τα άτομά τους.





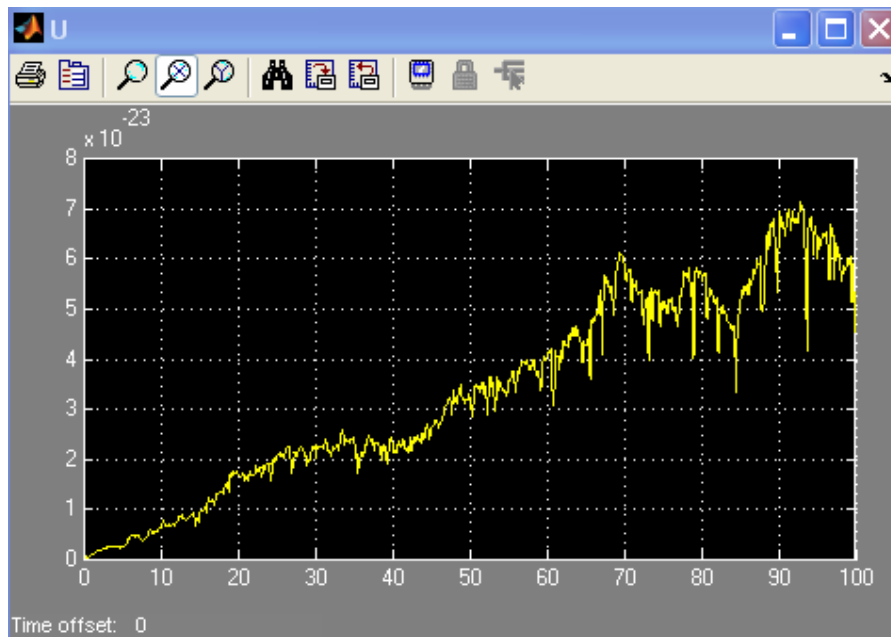
**Εικόνα 36.** Τρισδιάστατη απεικόνιση της κίνησης των μορίων

Η ενεργός ταχύτητα των μορίων παρουσιάζεται σε γράφημα (Εικ.37) και σε πραγματικό χρόνο. Η θεωρητική τιμή είναι 1902m/sec για  $T=300^{\circ}\text{K}$  και όπως βλέπουμε στο γράφημα προσεγγίζεται σχετικά.



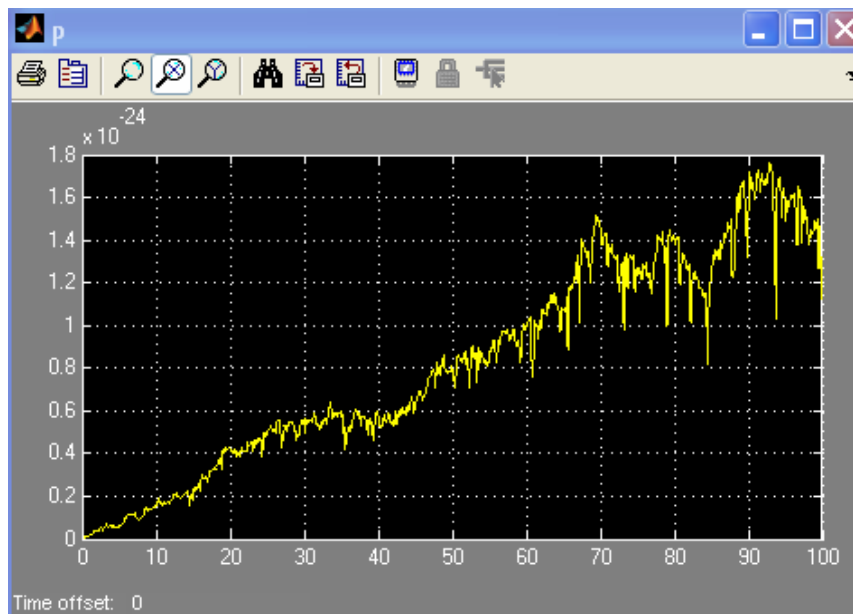
**Εικόνα 37.** Η ενεργός ταχύτητα των μορίων σε m/sec

Η εσωτερική ενέργεια του συστήματος παρουσιάζεται στο παρακάτω γράφημα (Εικ. 38). Η θεωρητική τιμή είναι  $U=4,98 \times 10^{-23}$  J και σε αυτή την περίπτωση το μοντέλο προσεγγίζει τις θεωρητικές τιμές.



Εικόνα 38. Η εσωτερική ενέργεια  $U$  σε  $J$

Η πίεση που ασκεί το αέριο στην επιφάνεια του δοχείου προκύπτει θεωρητικά από τη σχέση 1 και είναι  $p=1,23 \times 10^{24} \text{ N/m}^2$ , τιμή η οποία προσεγγίζεται από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης (Εικ. 39).



Εικόνα 39. Η πίεση που ασκεί το αέριο στην επιφάνεια του δοχείου σε  $\text{N/m}^2$

## VIII. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- AINSWORTH, S. (1999), The functions of multiple representations. *Computers and Education*, 33, 131-152.
- ALDER B.J. & WAINWRIGHT T.E. (1957), Phase Transition for a Hard Sphere System Preliminary. Results from a Recalculation of the Monte Carlo Equation of State of Hard Spheres. *J. Chem. Phys.*, 27, 5, 1208-1209.
- ALESSI, S.M. (1988), Fidelity in the design of instructional simulations. *Journal of Computer-Based Instruction*, 15, 40-47.
- ALESSI, S.M. (1995), Dynamic vs. static fidelity in a procedural simulation. Paper presented at the *Annual Meeting of the American Educational Research Association*. San Francisco, CA, USA.
- A. BARNET, C. (2005), *Computational Physics, notes for Physics 440/640*, University of Maryland, Baltimore County, Joint Center for Earth Systems Technology.
- BERENDSEN, H. (1997), Molecular Dynamics Simulations: The Limits and Beyond. In *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas*, In *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas, Proceedings of the 2nd International Symposium on Algorithms for Macromolecular Modelling*. 21-24 May, Berlin, Germany.
- BERNE, B.J. (1997), Molecular dynamics in systems with multipletime Scales: reference system propagator algorithms, In *Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas, Proceedings of the 2nd International Symposium on Algorithms for Macromolecular Modelling*. 21-24 May, Berlin, Germany.
- BONK, C., & CUNNINGHAM, D.J. (1998), Searching for learner-centered, constructivist and sociocultural components of collaborative educational learning tools, In C. BONK, & K. KING (Eds.), *Electronic collaborators: Learner-centered technologies for literacy, apprenticeship, and discourse*. Mahwah, NJ: Lawrence Erlbaum.
- BOUNTIS, T. (1993), Fundamental Concepts of Chaos: Part I. Proceedings of summer school *Let's Face Chaos Through Nonlinear Dynamics*. Ljubljana, Slovenia.
- BUNCE, D.M., GABEL, D. (2002), Differential effects on the achievement of males and females of teaching the particulate nature of chemistry, *Journal of Research in Science Teaching*, 39, 911-927.
- CHEN, J.X., YONGGAO, Y. & XUSHENG, W. (2001), Physics-based modelling and real-time simulation, *Computing in Science & Engineering*, 3, 3.
- CHITTARO, L. & RANON, R. (2007), Web3D technologies in learning, education and training: Motivations, issues, opportunities, *Computers & Education*, 49, 3-18.

- COLLINS, A., BROWN, J.S., & NEWMAN, S.E. (1989), Cognitive apprenticeship: Teaching the craft of reading, writing, and mathematics. In L.B. RESNICK (Ed.), *Knowing, learning, and instruction: Essays in honor of Robert Glaser*. Hillsdale, NJ: Erlbaum, 453- 494.
- DANIELSEN, A. L., KYRKJEBØ, E., PETERSEN, K. Y. (2004), A Marine Visualization Toolbox for MATLAB®. In *Proceedings IFAC conference on control applications in marine system*. IFAC, 515–519.
- DE JONG, T., MARTIN, E., ZAMARRO, J., ESQUEMBRE, F., SWAAK, J., VAN JOOLINGEN, W. (1999), The integration of computer simulation and learning support: An example from the physics domain of collisions, *Journal of Research in Science Teaching*, 36, 597–615.
- DE LARA J. AND ALFONSECA, M. (2003), Visual Interactive Simulation for Distance Education. *Simulation*, Simulation Councils Inc., 79, 19-34.
- DETTORI, G. & LEMUT, E. (1995), External Representations in Arithmetic Problem Solving. In R. SUTHERLAND & J. MASON (Eds), *Exploiting Mental Imagery with Computers in Mathematics Education*. Springer – Verlag, Berlin, 20-33.
- DONGARRA, J., BEICHL, I. & SULLIVAN, F. (2000), The top 10 algorithms. *Computing in Science and Engineering*, 2, 65.
- FENSHAM, P. (1994), Beginning to teach chemistry. In FENSHAM, P., GUNSTONE, R. & WHITE, R. (eds), *The content of science: a constructivist approach to its teaching and learning*. Falmer, London, 14-28.
- FEYNMAN, R., LEIGHTON R. & SANDS, M. (1977), *The Feynman Lectures on Physics*. Reading MA: Addison-Wesley.
- GOKHALE, A. A. (1995), Collaborative learning enhances critical thinking. *Journal of Technology Education*, 7, 1.
- HAGGSTROM, O. (2002), *Finite Markov Chains and Algorithmic Application*. Cambridge University Press, Cambridge.
- HANSELMAN, D. C. (2001), *Mastering Matlab 6: a Comprehensive Tutorial and Reference*. Upper Saddle River: Prentice Hall.
- HJORTH-JENSEN, M. (2004), Lectures IV & V: Examples from the Physical Sciences and Sociology (at: [www.sintef.no/upload/IKT/9011/SimOslo/eVITA/2007/Lecture45.pdf](http://www.sintef.no/upload/IKT/9011/SimOslo/eVITA/2007/Lecture45.pdf)).
- HJORTH-JENSEN, M. (2006), *Computational Physics*, University of Oslo, Oslo.
- HYDE, R. T., SHAW, P. N. AND JACKSON, D. E. (1996), The evaluation of integrated courseware: Can interactive molecular modelling help students understand three-dimensional chemistry?. *Computers & Education*, 26, 233-239.
- INHELDER, B., & PIAGET, J. (1958), *The growth of logical thinking from childhood to adolescence* (A. PARSONS & S. SEAGRIN, Trans.). New-York: Basic.

*Vol I & II.* Academiei - Springer, Bucharest - Berlin.

Zeitschrift für Physikalische Chemie

ISING, E. (1925), Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 31, 253-258.

JOHNSON, D.W., JOHNSON R.T., & SMITH, K.A. (1998), *Active learning: Cooperation in the college classroom.* Interaction Book Company, University of Minesota.

JOHNSON, D.W., JOHNSON, R.T., & HOLUBEC, E.J. (1993), *Circles of learning: Cooperation in the classroom.* Interaction Book Company, University of Minesota

JOHNSTON, K. & DRIVER, R. (1989), *A case study of teaching and learning about particle theory.* University of Leeds, Leeds, UK.

KAGAN, S. (1994), *Cooperative Learning.* Capistrano, San Juan.

KALAGASIDIS, A., WEITZMANN, P., NIELSEN, T., PEUHKURI R., HAGENTOFT C., RODE, R. (2006), The International Building Physics Toolbox in Simulink. *Energy and Buildings*, Elsevier B.V., 39, 665-674.

KLAHR, D., & DUNBAR, K. (1998), Dual space search during scientific reasoning. *Cognitive Science*, 12, 1-48.

KNAPP, M.S., MEANS, B. & CHELEMER, C. (1991), Conclusion: Implementing new models for teaching advanced skills. In B. Means, C. CHELEMER, & M.S. KNAPP (Eds), *Teaching advanced skills to at-risk students: Views from research and practice.* San Francisco: Jossey-Bass.

KRISTENSEN, A.R., & PEDERSEN, C.V. (2003), Representation of uncertainty in a Monte Carlo simulation model of a scavenging chicken production system. *Fourth European Conference of the European Federation for Information Technology in Agriculture, Food and the Environment*, Debrecen, Hungary, July 5-9. [<http://www.prodstyr.ihh.kvl.dk/pub/symp/ark/efita03-2.pdf>]

LANDAU, R. H. AND PAEZ, M. J. (1997), *Computational Physics.* John Wiley & Sons Inc., New York.

LEE, O., EICHINGER, D.C., ANDERSON, C.W., BERKHEIMER, G.D., & BLAKESLEE, T.D. (1993), Changing middle school students' conceptions of matter and molecules. *Journal of Research in Science Teaching*, 30, 249-270.

MCNAMARA, S., BARRAT, J. (1996), The energy flux into a fluidized granular medium at a vibrating wall. (at: <http://arxiv.org/pdf/cond-mat/9609066>)

MEANS, B., BLANDO, J., OLSON, K., MIDDLETON, T., MOROCCO, C., REMZ, A. R. & ZORFASS, J. (1993), *Using Technology to Support Education Reform*, U.S. Department of Education, U.S. Government Printing Office.

METROPOLIS N. & ULAM, S. M. (1949), The Monte Carlo method. *Journal of American Statistical Assosiation*, 44, 335.

- METROPOLIS N., ROSENBLUTH, A., ROSENBLUTH, M. & TELLER, A. (1953), Equation of state calculations by fast computing machines. *Journal of Chemical Physics*, 21, 1087.
- MILLER, J., (1992), Review of book: Foley, J. D., VAN DAM, A., FEINER S. K., HUGHES, J. F., *Computer graphics principles and practice*, Addison-Wesley, Reading, MA (1990)", *Computers & Graphics*, 16, 239-240.
- MORENO, L., GONZALEZ, C., CASTILLA, I., GONZALEZ, E., SIGUT, J. (2005), *Applying a constructivist and collaborative methodological approach in engineering education*. Escuela Tecnica Superior de Ingenieria Informatica, Universidad de La Leguna.
- MORENO, R. & MAYER, R. (1999), Multimedia-supported metaphors for meaning making in mathematics. *Cognitive Instruction*, 17,215-248.
- MORENO, R. & MAYER, R. (1999a), Cognitive principles of multimedia learning: The role of modality and contiguity. *Journal of Educational Psychology*, 91,358-368.
- MORENO, R. & MAYER, R. (2000), A coherence effect in multimedia learning: The case from minimizing irrelevant sounds in the design of multimedia instructional messages. *Journal of Educational Psychology*, 92, 117-125.
- MORENO, R., MAYER, R. & LESTER, J. (2000), Life-like pedagogical agents in constructivist multimedia environments: Cognitive consequences of their interaction. *Proceedings of ED-MEDIA*. AACE Press, Charlottesville, 741-746.
- MOTZNIK, M.S. (1996). Tools for schools [mathematical software packages]. *Spectrum IEEE* 33, 9.
- MZOUGH, T., HERRING, S.D., FOLEY, J.T., MORRIS M.J, AND GILBERT, P.J., (2007). WebTOP: A 3D interactive system for teaching and learning optics. *Computers & Education*, 49, 110-129.
- ONSAGER, L. (1994), Crystal Statistics. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition, *Phys. Rev.*, 65, 117-119.
- PANG, T. (2006), *An Introduction to Computational Physics*, 2nd ed., Cambridge University press.
- PATHRIA, R. K. (1972), *Statistical Mechanics*. Oxford: Pergamon.
- PSYCHARIS, S. & TATSIS, V. (2007), Simulink as a mathematical tool in the teaching of physics. *5th Mediterranean Conference in Mathematics Education*. 13-15 April, Rhodes, Greece.
- PSYCHARIS, S. & TATSIS, V. (2008), Monte Carlo Simulations In Molecular Dynamics of a Gas. A Didactic Approach. *International Conference on Technology, Communication and Education*, IEEE, , 7-9 April, Kuwait.
- RAHMAN, A. (1964), Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon. *Physical. Review*, 136, 2A.
- RAHMAN, A., AND STILLINGER, F. H., (1971), Molecular dynamics study of liquid water. *J. Chem. Phys*, 55, 3336-3359.
- RESNICK, L.B. (1987), Education and learning to think. National Academy Press, Washington DC, USA.

- REZAI, R., & KATZ, L. (2002), Using computer Assisted instruction to Compare the inventive model and the radical Constructivist approach to teaching Physics. *Journal of Science Education and Technology*, 11,4, 367-380.
- RODRIGUEZ, A.A., CIFDALOZ, O., PHELIPP, M. & DICKESON, J. (2007), Description of a Modeling, Simulation, Animation, and Real-Time Control (MoSART) Environment for a Class of 6-DOF Dynamical Systems, American Control Conference, Arizona State University, USA, 9-13 July, 2515-2520.
- SCAIFE, M. & ROGERS, Y. (1996), External cognition: How do graphical representations work?, *International Journal of Human-Computer Studies*, 45, 185-213.
- SCHLOTTER, M. (2003), Multibody system simulation with SimMechanics. unpublished. (at:[http://people.bath.ac.uk/enpms/pdf\\_files/sem03sm\\_report.pdf](http://people.bath.ac.uk/enpms/pdf_files/sem03sm_report.pdf)).
- SERWAY, R. (2003), *Physics for scientist and engineers*, Thomson.
- SLOOT, P. & OVEREINDER, B.J. (1999), Time Warped Automata: Parallel Discrete Event Simulation of Asynchronous CA's. In *Proceedings of The Third International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics*, Poland, 43-62.
- SPIRO, R.J., FELTOVICH, P.J., JACOBSON, M.J., COULSON, R.L. (1991), Knowledge representation, content specification, and the development of skill in situation-specific knowledge assembly: some constructivist issues as they relate to cognitive flexibility theory and hypertext, *Educational Technology* 31, 22-25.
- SUTHERS, D. (1997), *An interface for collaborative and coached approaches to learning critical inquiry*. ACM inc.
- TERSOFF, J., (1985), New Empirical Model for the Structural Properties of Silicon. *Physical Review Letters*, 56, 6, 632-635.
- THE MATHWORKS, (1997), *MATLAB Language Reference*. The MathWorks (at: [www.mathworks.com](http://www.mathworks.com)).
- THE MATHWORKS, (1999), *Simulink, Dynamic System Simulation for Matlab, Using Simulink Version 3*. The MathWorks.
- THE MATHWORKS, (2005), *Matlab and Simulink*. The MathWorks. (at: [www.mathworks.com](http://www.mathworks.com)).
- TVERSKY, B. (2001), Spatial schemas in depictions. M. GATTIS, *Spatial Schemas and Abstract Thought*. MIT Press, Gambridge, 79-111.
- TVERSKY, B., MORRISON, J. & BETRANCOURT, M. (2002), Animation: Can it facilitate? *Human Computer Studies*, 57, 247-262.
- TZOUMANEKAS, C. (2003), *Monte Carlo Simulations of Silicon-Germanium Alloys*. Phd Thesis, University of Crete, Department of Physics.

- VAN JOOLINGEN, W.R., & DE JONG, T. (1996), *Discovery Learning with Computer Simulations*. In *Simpósio Investigação e Desenvolvimento de Software Educativo Convento dos Capuchos*. 7-9 de Outubro, Costa da Caparica, Portugal.
- VON NEUMAN, J. & ULAM, S.M. (1945), Random ergodic theorems, *Bulletin of the American Mathematical Society*, 51, 660.
- VOULGARAKIS, N.K. (2002), *Non Linear Localization in model Systems and Materials*. Phd Thesis, University of Crete.
- VYGOTSKY, L.S. (1978), *Mind in society*. Harvard University Press, Cambridge.
- WISKE, M.S., ZODHIATES, P., WILSON, B., GORDON, M., HARVEY, W., KRENSKY, L., LORD, B., WATT, M., & WILLIAMS, K. (1988), *How technology affects teaching*. (Technical report prepared for the Office of Technology Assessment, Congress of the United States). Harvard Graduate School of Education, Educational Technology Center, Cambridge.
- YOUSUF, A., LUO, J. & HUANG, C. (2004), Using the Simulink as a Teaching Tool ASEE. *Annual Conference & Exposition: Engineering Education Reaches New Heights*, Salt Lake City, USA, 20-23 June.
- YUAN-BI LAI, (2002), *Matlab tutorial*. National Unlin University of Sciences and Technology.
- ZORFASS, J.M. (1991), Promoting successful technology integration through active teaching practices. *Paper presented at the annual meeting of the American Educational Research Association*, Chicago, USA, April.
- ΑΝΑΓΝΩΣΤΟΠΟΥΛΟΣ, Κ. (2006), *Πρόχειρες σημειώσεις Υπολογιστικής Φυσικής*. Σημειώσεις για το μάθημα Υπολογιστική Φυσική ΙΙ, Ε.Μ.Π., Σχολή Ε.Μ.Φ.Ε..
- ΒΡΑΤΣΑΛΗΣ, Κ. (2002), Η Προσομοίωση και η Διαδικασία της Μάθησης: Μερικά Ζητήματα που Αφορούν στη Σχέση Υποκειμένου και Πραγματικότητας. *3ο Συνέδριο ΕΤΠΕ*, Ρόδος, Σεπτέμβριος.
- ΓΑΡΟΦΑΛΑΚΗΣ, Γ. (1999), Σημειώσεις για το μάθημα «Προσομοίωση πληροφοριακών συστημάτων». Πανεπιστήμιο Πατρών, τμήμα Μηχανικών Η/Υ και Πληροφορικής, 2<sup>η</sup> έκδοση.
- ΓΚΑΝΑΤΣΙΟΥ, Χ., ΤΖΩΡΤΖΙΟΣ, Σ. (2005), Επιστημολογική προσέγγιση των στοχαστικών μοντέλων και οι εφαρμογές τους στις βιολογικές επιστήμες. *22<sup>ο</sup> Συνέδριο Ελληνικής Μαθηματικής Παιδείας*, Λαμία.
- ΔΕΛΛΑΠΟΡΤΑΣ, Π. (1994), Προσομοίωση και Στοχαστικά Μοντέλα – Πανεπιστημιακές Παραδόσεις. Οικονομικό Πανεπιστήμιο Αθηνών.
- ΔΕΝΔΡΙΝΟΣ, Μ. & ΚΑΛΚΑΝΗΣ, Θ. Γ. (2007), Η συμβολή των δυναμικών οπτικοποιήσεων στη διδασκαλία/μάθηση φυσικών, μηχανικών και πειραματικών διαδικασιών. Μια εφαρμογή σε φοιτητές/υποψήφιους δασκάλους και επιμορφούμενους δασκάλους στο Παιδ. Τμήμα Δημ. Εκπαίδευσης. *5<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής Φυσικών Επιστημών και Νέες Τεχνολογίες στην Εκπαίδευση*, Γιάννενα, Μάρτιος.



- ΔΗΜΑΚΗΣ, Χ. & ΣΥΜΕΩΝΙΔΗΣ, Π. (2001), Η περίπτωση ενός εργαστηρίου Ψηφιακών Τηλεπικοινωνιών Συστημάτων, *Πρώτο Πανελλήνιο Συνέδριο στην Ανοιχτή και εξ Αποστάσεως εκπαίδευση, Ελληνικό Ανοιχτό Πανεπιστήμιο*, Πάτρα, Ελλάδα.
- ΖΙΟΥΒΑ, Ε. & ΦΟΥΖΑ, Χ. (2003), Matlab: Ένα Ισχυρό Εργαλείο για τη Διδασκαλία του Μαθήματος Μετάδοση Δεδομένων & Δίκτυα Υπολογιστών Ι&ΙΙ. *2<sup>ο</sup> Συνέδριο στη Σύρο – ΤΠΕ στην Εκπαίδευση*, Πανεπιστήμιο Αιγαίου, Σύρος, Ελλάδα.
- ΙΜΒΡΙΩΤΗ, Δ., ΚΑΛΚΑΝΗΣ, Γ. (2007), Το Πρότυπο του μικρόκοσμου στην πρωτοβάθμια εκπαίδευση – Εκπαιδευτικές προσεγγίσεις για την Ε΄ και Στ΄ τάξη του Δημοτικού Σχολείου – Λογισμικό και αξιολόγηση, *5<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής Φυσικών Επιστημών και Νέες Τεχνολογίες στην Εκπαίδευση, Ιωάννινα*, 15-18 Μαρτίου 2007
- ΝΤΑΛΛΑΟΥΤΗ, Π. & ΤΣΑΠΑΡΛΗΣ, Γ. (2007), Το σωματιδιακό μοντέλο της ύλης – Διδακτική πρόκληση για την στ΄ τάξη του δημοτικού σχολείου. *5<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής Φυσικών Επιστημών και Νέες Τεχνολογίες στην Εκπαίδευση, Ιωάννινα*, 15-18 Μαρτίου.
- ΠΑΠΑΓΕΩΡΓΙΟΥ, Γ. (2007), Εισαγωγή στο Συμπόσιο: Σωματιδιακά Μοντέλα και Μικρόκοσμος στο Δημοτικό Σχολείο. *5<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής Φυσικών Επιστημών και Νέες Τεχνολογίες στην Εκπαίδευση, Ιωάννινα*, 15-18 Μαρτίου.
- ΠΑΠΑΓΕΩΡΓΙΟΥ, Γ. (2007), Συμπόσιο: Σωματιδιακά μοντέλα και μικρόκοσμος στο δημοτικό σχολείο. *5<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής Φυσικών Επιστημών και Νέες Τεχνολογίες στην Εκπαίδευση, Ιωάννινα*, 15-18 Μαρτίου 2007
- ΠΑΛΓΙΑΝΑΚΟΣ, Ι. (1995), *Διδακτική Επαγγελματικών Μαθημάτων*. Β΄ μέρος. Αθήνα: Έλλην.
- ΨΥΧΑΡΗΣ Σ., ΤΑΤΣΗΣ Β. & ΔΙΑΚΟΜΑΝΩΛΗΣ Κ. (2007α), Διαφορετικές προσεγγίσεις διδασκαλίας στο αντικείμενο «πλάγια βολή» με το εργαλείο Simulink. *Συνέδριο "Έρευνα και Εκπαίδευση στις Φυσικές Επιστήμες στα Παιδαγωγικά τμήματα Δημοτικής Εκπαίδευσης"*. Διοργάνωση Παιδαγωγικό Τμήμα Δημοτικής Εκπαίδευσης του Πανεπιστημίου Αθηνών (Τομέας Φυσικών Επιστημών, Τεχνολογίας και Περιβάλλοντος) –σε συνεργασία με το Κέντρο Έρευνας Επιστήμης και Εκπαίδευσης. 11-13 Μαΐου, Αθήνα, Ελλάδα.
- ΨΥΧΑΡΗΣ Σ., ΤΑΤΣΗΣ Β. & ΔΙΑΚΟΜΑΝΩΛΗΣ Κ. (2007β), Το Simulink ως εργαλείο για τη διδασκαλία Φυσικής. Διαφορετικές προσεγγίσεις στο αντικείμενο Αποσβένουσες Ταλαντώσεις. *4ο Συνέδριο για την Αξιοποίηση των ΤΠΕ στην Εκπαίδευση*. 4-5 Μαΐου, Σύρος, Ελλάδα.
- ΨΥΧΑΡΗΣ, Σ. & ΤΑΤΣΗΣ Β. (2007α), Το Matlab ως Εργαλείο για τη Διδασκαλία του Μαθήματος «Αυτοματισμοί και Σ.Α.Ε.». *5ο Πανελλήνιο Συνέδριο «Διδακτική Φυσικών Επιστημών και Νέες Τεχνολογίες Εκπαίδευσης*. Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, 15-18 Μαρτίου, Ιωάννινα, Ελλάδα.
- ΨΥΧΑΡΗΣ, Σ. & ΤΑΤΣΗΣ, Β. (2007β), Τρισδιάστατη προσομοίωση του μικρόκοσμου με το Simulink-Matlab: Η περίπτωση της διαστολής στερεού. *Συνέδριο Έρευνα και Εκπαίδευση στις Φυσικές Επιστήμες στα Παιδαγωγικά τμήματα Δημοτικής Εκπαίδευσης*. Διοργάνωση Παιδαγωγικό Τμήμα Δημοτικής Εκπαίδευσης του Πανεπιστημίου Αθηνών (Τομέας Φυσικών Επιστημών, Τεχνολογίας

και Περιβάλλοντος) –σε συνεργασία με το Κέντρο Έρευνας Επιστήμης και Εκπαίδευσης. 11-13 Μαΐου, Αθήνα, Ελλάδα.

ΨΥΧΑΡΗΣ, Σ. & ΤΑΤΣΗΣ, Β. (2008), Στοχαστική Προσομοίωση Monte Carlo Μοριακής Δυναμικής Διατομικού Αερίου ως Εργαλείο για τη Διδασκαλία. 6<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο με Διεθνή Συμμετοχή για τις Τεχνολογίες της Πληροφορίας και των Επικοινωνιών στην Εκπαίδευση, 25-28 Σεπτεμβρίου, Λεμεσός, Κύπρος. (υπο δημοσίευση)

ΨΥΧΑΡΗΣ, Σ. (2006), Υπάρχει αυθόρμητο σπάσιμο της συμμετρίας στη διαδικασία της μάθησης; Η χρήση της προσομοίωσης Monte Carlo και του αλγόριθμου Metropolis για την παρακολούθηση της χρονικής εξέλιξης του μαθησιακού αποτελέσματος. *Περιοδικό Μέντορας*.

ΨΥΧΑΡΗΣ, Σ., ΣΙΔΗΡΟΠΟΥΛΟΥ, Π. & ΣΠΑΡΤΑΛΗ, Μ. (2006), Οι Τεχνολογίες Πληροφορίας και Επικοινωνιών στο πλαίσιο της συνεργατικής μάθησης και η διασύνδεσή τους με την αλληλεπίδραση και την αυτοεκτίμηση των μαθητών. *Περιοδικό Νέα Παιδεία*.