

اخبار

مرکز تحقیقات فیزیک نظری و ریاضی



سال هشتم، شماره اول، بهار ۱۳۸۰، شماره پیاپی ۲۴

دیدگاه

پیدایش شاخه سوم پژوهش و ضرورت ایجاد آزمایشگاه علوم محاسباتی



هاشم رفیعی تبار
پژوهشکده فیزیک
پژوهشگاه دانشهای بنیادی

اگر از پژوهشگران، به ویژه آنهایی که در شاخه‌ای از علوم پایه نظیر فیزیک فعالیت می‌کنند، بخواهید که هدف فعالیت پژوهشی خود را تعریف کنند، احتمالاً چنین پاسخی می‌دهند: «تدوین قوانین نظری عام که بر خواص و رفتار ماده فیزیکی ناظرند.» چنین هدفی عموماً معنایش تدوین مدل‌های بسیار پیچیده که نشانگر بخشی از جهان فیزیکی هستند و ارائه روابط ریاضی مابین مشاهده‌پذیرهای آن مدل‌هاست. از نخستین نمونه‌های پژوهش علمی در این راستا می‌توان از فعالیت‌های ماکسول (۱۸۳۱-۱۸۷۹) فیزیکدان برجسته اسکاتلندی نام برد. وی در سال ۱۸۶۵ توانست نظریه نسبتاً انقلابی «میدان» را که فارادی (۱۸۶۷-۱۷۹۱) مدتها پیش جهت نمایش اثرات الکتریکی و مغناطیسی در فضا پیشنهاد کرده بود به صورت یک طرح ریاضی در آورده و چهار معادله معروف خود را که ناظر بر رفتار میدانهای الکترومغناطیسی هستند به دست آورد و از طریق این معادلات دو نیروی اساسی و ظاهراً مجزای طبیعت را با هم متحد گرداند. این گونه نظریه سازی را می‌توان در سطوح گوناگونی از پیچیدگی انجام داد. به عنوان مثال، ما می‌توانیم معادله مربوط به یک قانون فیزیکی را صرفاً از طریق تجربی و با برازش (fitting) نتایج یک آزمایش با یک رابطه ریاضی به دست آوریم. در حقیقت، از این طریق بود که قانون معروف گازهای کامل ($PV = nRT$) که رابطه‌ای مابین حجم، فشار، و دمای یک گاز کامل را بیان می‌کند اولین بار ارائه گردید. این قبیل نظریه سازی ساده‌ترین شکل نظریه سازی بوده و فلسفه دانان علم آن را مدل سازی پدیده‌ای (phenomenological)

باسمه تعالی

در این شماره:

دیدگاه

ریاضیات در مرکز تحقیقات میکروسافت

گزارشی از همکاری‌های ایران و سرن

نخستین مدرسه تابستانی جنبه‌های نظری علوم کامپیوتر

اخباری از پژوهشگاه

میهمانان پژوهشگاه

آنچه گذشت

برنامه فعالیت‌های پژوهشگاه در سال ۱۳۸۰

فرارو

(modelling) نام نهاده‌اند. در سطح عمیق‌تری، هدف ما از پژوهش نظری کوشش‌پذیر کرده، و در نتیجه حالت میکروسکوپی شار نیز تغییر می‌کند. در تطابق با این تغییر، نقطه‌نماینده، مکان خود را در فضای فاز تغییر داده و یک مسیر را ترسیم می‌کند. در طبیعت ما می‌توانیم تاریخچه هر دستگاه فیزیکی را از طریق دنبال کردن این مسیر به دست آوریم. تمام مشاهده‌پذیرهای روزمره، مانند دمای درون اتاق، در حقیقت میانگینهای زمانی روی تکه‌هایی از این مسیر هستند. حال فرض کنید دستورالعملی در دست داریم که به ما می‌گوید که چگونه این N مولکول برهمکنش دارند، یعنی مکانیسم تغییر q ها و p ها چیست، و نیز چگونه این مولکولها با ذره سبک معلق برهمکنش دارند. اگر ممکن باشد تمام این اطلاعات را نزد خود حفظ کرده از آن استفاده کنیم، آن وقت واضح است که نه فقط می‌توانیم حالت پایه شار را عددی (مشاهده‌پذیر) کنیم، بلکه همچنین ساز و کاری را نیز که توسط آن این حالت پایه دینامیک حرکت کاتوره‌ای ذره معلق را به‌طور مستقیم کنترل می‌کند ارائه می‌دهیم. تا دهه ۸۰ قرن بیستم، تولید این حجم اطلاعات و استفاده از آن جهت بررسی پدیده‌هایی از قبیل حرکت کاتوره‌ای خواب و خیالی بیش نبود. ولی اکنون مدتی است که دیگر چنین نیست. ما اکنون شاهد پیدایش و رشد انقلابی در علم هستیم که عبارت است از عددی شدن رفتار و ساخت ماده فیزیکی. این عددی شدن می‌تواند مربوط به تعدادی از اتمها و مولکولها و یا مربوط به تعدادی از کهکشانها باشد. این علم نوین به نام علم محاسباتی (Computational Science) نام گذاری شده و ابزارهای اساسی آن مدل‌سازی عددی و شبیه‌سازی وابسته به کامپیوتر می‌باشند و به‌مثابه شاخه سوم پژوهش در کنار نظریه‌سازی سنتی و فعالیت آزمایشگاهی قرار گرفته است.

پیدایش علم محاسباتی حقیقتاً یک انقلاب نوین در علم است و به ایجاد پارادایم جدیدی منجر گشته است. از طریق این شاخه پژوهشی، ما اکنون قادریم که بر روی ذرات اتمی و زیر اتمی یک جامد، شار و یا گاز قرار گرفته و جزئی‌ترین حرکت‌های این ذرات را هنگامی که دستگاه از یک حالت میکروسکوپی به حالت دیگر گذار می‌کند، دنبال کنیم و هم‌زمان با این امر مقادیر عددی خواص مشاهده‌پذیر دستگاه، از قبیل سختی و نرمی آن را نیز به دست آوریم. وقوع این انقلاب و پیدایش علم محاسباتی مربوط به آن مرهون پیدایش امکانات عظیم محاسباتی در قالب ابر کامپیوترها، سکوهای گرافیک محاسباتی و کامپیوترهای کوچک ولی بسیار قدرتمند شخصی است. علم محاسباتی، علم کاملاً نوینی در سطح جهان است که هنوز تعریف جامع و دقیقی برای آن ارائه نشده است. می‌توانیم به طور کلی این علم را به مثابه استفاده گسترده از کامپیوترها (آزمایشگاههای عددی) جهت مدل‌سازی عددی و شبیه‌سازی مسائل علمی در رشته‌های فیزیک، شیمی، ریاضیات، زیست‌شناسی، مهندسی، و اخیراً اقتصاد، تعریف کنیم. در علم محاسباتی، جهت شناسایی عمیق فرایندهایی که ساختمان و پویایی یک دستگاه فیزیکی، شیمیایی، و یا بیولوژیک را کنترل می‌کنند، از کامپیوترهای با توان بالا (high performance computers) و محاسبه با توان بالا (high performance computing) استفاده می‌شود. برای ریاضیدانان،

جهت توصیف قوانین قابل مشاهده طبیعت بر حسب حالت‌های زیرین یا زیر بنایی است. پیدایش فیزیک نوین در سه دهه اول قرن بیستم در قالب دو نظریه بنیادی مکانیک کوانتومی و نسبیت خاص و عام اینشتین، ما را به ابزار لازم، ولی نه کافی، جهت این‌گونه نظریه سازی مجهز ساخت. ما اکنون می‌توانیم با به‌کارگیری این نظریه‌ها برخی از مشاهده‌پذیرهای روزمره طبیعت را بر حسب فرآیندهای بسیار پیچیده و دقیقی که در زیر ساخت طبیعت جریان دارند توضیح دهیم. به‌عنوان مثال، توصیف ما از پدیده انتشار نور که فیزیک نوین آن را به درستی به واکنجستگی اتمها مربوط ساخته است، و با توصیف ثبات ساختمانی میزی که در مقابل شما قرار دارد بر حسب مدارهای کوانتیزه شده اتمها و یا توصیف خمیدگی نوری که از کنار اجسام سنگین عبور می‌کند بر حسب پیوستار فضا-زمان (space-time continuum)، آن‌طور که اینشتین (۱۹۵۵-۱۸۷۹) آن را تدوین نمود، بر این پایه قرار دارند. در چنین سطحی از پیچیدگی، ما می‌توانیم انتظار داشته باشیم که نظریه‌ایمان هم دارای قدرت پیش بینی و هم دارای قدرت توضیح باشند. معذالک، با اینکه با استفاده از این نظریه‌ها توانسته‌ایم بسیاری از پدیده‌های مشاهده‌پذیر سطح ماکروسکوپی را بر حسب حالت‌های بسیار پیچیده سطح میکروسکوپی توضیح دهیم، ولی از نظر محاسباتی با بن بست روی روبرو بوده‌ایم، بدین صورت که خود این حالت‌های میکروسکوپی پایه تاکنون قابل کمی شدن (عددی شدن) نبوده‌اند. جهت روشن شدن مطلب، مثالی را از فیزیک نوین در نظر بگیریم، یعنی نظریه بسیار زیبای اینشتین درباره حرکت براونی یک ذره سبک معلق در یک شار. مطابق نظریه اینشتین، این حرکت ناشی از افت و خیزهای بسیار شدید مولکولهای شار است که این افت و خیزها به‌صورت تصادفات کاتوره‌ای به ذره سبک منتقل می‌شوند و باعث حرکت مشاهده‌پذیر زیگزاگی آن می‌گردند. معذالک از آنجایی که این حالت‌های زیرین، یعنی افت و خیزهای مولکولی، خود بر حسب حرکت‌های انفرادی مولکولها به طریق عددی قابل مشاهده نگشته‌اند، در نتیجه یگانه انتظاری که می‌توانیم از نظریه اینشتین داشته باشیم آن است که حرکت ذره معلق را بر حسب حالت‌های احتمالی زیرین شار برآیمان توصیف کند. پس مشاهده می‌کنیم که مدل نظری بسیار پیچیده ما درباره حرکت کاتوره‌ای با یک بن بست محاسباتی روبرو می‌گردد، زیرا معادله نهایی حرکت ذره هیچ‌گونه اطلاعاتی درباره حالت افت و خیز تک تک مولکولها در بر ندارد. آنچه که ما بدان نیازمندیم مشاهده‌پذیر ساختن (یا عددی کردن) خود حالت زیرین میکروسکوپی شار می‌باشد. حال فرض کنید که یک شار نمونه در اختیار داریم که از تعداد نسبتاً زیادی، مثلاً N ، مولکول تشکیل شده است که اندازه N وابسته به قدرت محاسباتی ماست. همچنین فرض کنیم که می‌توانیم به هر کدام از این N مولکول یک شناسنامه بدهیم که در آن سه مختص فضایی (q) و سه مختص تکانه‌ای (p) ثبت گشته‌اند. به‌دسته $6N$ تایی اعداد (q, p) حالت میکرو گفته می‌شود و این دسته حالت پایه شار را نمایش می‌دهد. ما می‌توانیم از این هم فراتر رفته و این دسته را توسط یک نقطه نماینده در یک فضای $6N$ بُعدی به نام فضای فاز مشخص کنیم. همان طوری که زمان تغییر می‌کند، این q ها و p ها هم

گشته است. ضرورت ایجاد یک آزمایشگاه علوم محاسباتی از مدتها پیش در پژوهشگاه دانشهای بنیادی (IPM) احساس می شده است (رجوع شود به اخبار ۲۳). این امر ناشی از اهمیت جهانی این شاخه پژوهشی نوین از یک طرف و احتیاج مبرم و روز افزون به پیشرفت علوم در ایران و نیاز همه جانبه پژوهشگران ایرانی به این شاخه علمی از طرف دیگر است. در پاسخ به این نیاز، پژوهشگاه دانشهای بنیادی، ایجاد یک «آزمایشگاه علوم محاسباتی» را در دستور کار خود قرار داده است. این آزمایشگاه در برگزیده دو شاخه علم محاسباتی، یکی مربوط به علوم فیزیکی و دیگری مربوط به علوم ریاضی است. هدف آزمایشگاه متمرکز کردن فعالیتهای پژوهشی مدل سازی عددی و شبیه سازی وابسته به کامپیوتر در یک ساخت واحد است که از این طریق بتوان قدرت پژوهشی پژوهشگاه را هر چه بیشتر ارتقاء داد و در این زمینه نیز، همانند زمینه های دیگر، پژوهشگاه را در سطح ملی و بین المللی مطرح ساخت. آزمایشگاه علوم محاسباتی فعالیتهای پژوهشی را در سطوح مختلف دکتری و پست دکتری در بر خواهد گرفت. به منظور تربیت کادر اولیه، دوره های تخصصی چه در پژوهشگاه و چه در دانشگاهها و مراکز آموزش عالی در تهران، و در صورت امکان در شهرستانها، دایر خواهد شد. هدف از تمامی این فعالیتهای انجام پژوهشهای قابل طرح در سطح جهانی از طریق تهیه مقالات پژوهشی و چاپ آنها در مجله های معتبر جهانی، شرکت در کنفرانسها و نشستهای مربوطه و به طور خلاصه دامن زدن به یک جریان نوین علمی در سطح کشور می باشد. علاوه بر انجام پژوهش، یکی دیگر از اهداف آزمایشگاه ارائه راینی های کارشناسانه در زمینه برپایی و پیشبرد چنین آزمایشگاههایی در سراسر کشور است. علم محاسباتی این امکان را برای کشورهایی نظیر کشور ما به وجود آورده است که با صرف هزینه های نسبتاً کم بتوان به پژوهشهای مدرن، کم خرج و در عین حال پیشرفته دامن زد و نسل جدیدی از پژوهشگران را که با پیشرفته ترین زمینه های علمی سر و کار دارند ترتیب کرد. در عین حال علم محاسباتی برای اولین بار این امکان را برای ما به وجود آورده است که بتوان پژوهشهایی را که منجر به ایجاد ثروت می شوند در سطح ملی اجرا کرد و به تحقق آرزوی دیرینه مبنی بر ایجاد یک اقتصاد متکی بر علم و فناوری کمک جدی نمود.

هاشم رفیعی تبار

rafi@theory.ipm.ac.ir

<http://www.ipm.ac.ir/IPM/homepage/csl.html>

این علم به معنای تهیه الگوریتمهای جدید، نرم افزارهای محاسبات علمی و تدوین مدل هایی ریاضی است که قابل عددی شدن هستند و می توانند هم به طور مستقل و هم در رابطه با شاخه های دیگر علم مورد استفاده قرار گیرند. این قبیل فعالیتهای مختلف مابین علم محاسباتی و علم کامپیوتر را نیز روشن می کنند. در علم کامپیوتر، هدف استفاده از کامپیوتر به مثابه یک آزمایشگاه عددی جهت شبیه سازی قوانین طبیعت نیست، بلکه تمرکز فعالیت روی عملکرد خود کامپیوتر است. در طی ده سال گذشته، علم محاسباتی قدم به قدم شکل گرفته و در درون علوم سنتی نفوذ کرده و شاخه های نوینی را در این علوم به وجود آورده است. در علوم فیزیکی (شامل زیست شناسی فیزیکی) کاربرد علم محاسباتی در قالب مدل سازی عددی و شبیه سازی وابسته به کامپیوتر منجر به پیدایش محاسبات ناومتری (Computational Nano-Science) گشته که به مثابه یک شاخه کاملاً نوین رشته های فیزیک ماده چگال، علم مواد، شیمی کوانتومی و زیست شناسی محاسباتی را در بر می گیرد. علم ناومتری محاسباتی و فناوری ناومتری متکی بر آن، دو ابزار پژوهش مربوط به دستکاری و ایجاد تغییرات عمدی در بافت اتمی فازهای چگال شده را تشکیل می دهند که از طریق آنها می توانیم هر نوع ساخت فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی را اتم به اتم و مولکول به مولکول طراحی کرده و تولید نماییم. کاربرد علم محاسباتی همچنین منجر به پیدایش چند رشته جدید از قبیل دینامیک محاسباتی شارها (CFD)، مدل سازی سیستم های هواشناسی و زلزله شناسی، مدل سازی در فیزیک پلاسما و فیزیک لیزری، مدل سازی مخزنهای بزرگ، مدل سازی شرایط جوئی و محیط زیست، مدل سازی فرآیندهای اقتصادی، مدل سازی در علوم پزشکی، مجسم سازی علمی، مدل سازی شبکه های عصبی و سیستم های هوشمند، بهینه سازی گرافیک کامپیوتری و شیوه های نوین روش اجزای متناهی در علوم و مهندسی گشته است.

علم محاسباتی در شکل شبیه سازی قادر به شناخت کمی و کیفی پدیده هایی گشته است که با بسیار پیچیده اند، و در نتیجه بررسی آنها از طریق کاربرد نظریه های تحلیلی امکان پذیر نیست، و یا بسیار بزرگ و یا بسیار کوچک اند و بررسی آنها با کار آزمایشگاهی میسر نیست. بسیاری از آزمایشها و بررسیهای نظری آینده بی شک از طریق علم محاسباتی انجام خواهند گرفت و ما با اطمینان می توانیم اعلام کنیم که پیدایش علم محاسباتی قدم بعدی در پیشرفت علوم است.

پیدایش علم محاسباتی به مثابه یک زمینه پژوهشی مستقل منجر به ایجاد آزمایشگاهها، پژوهشگاهها و مراکز علمی ویژه خود در سراسر جهان