مجله پژوهش فیزیک ایران

CC BY NC

سرمقاله

اعتبارسنجی و راستی‌آزمایی بسته‌های محاسباتی

امروزه استفاده از بسته‌های محاسباتی گوناگون در کارهای پژوهشی و مهندسی بسیار متداول شده است و ابزار اصلی برای پژوهشگران به‌شمار می‌آید. بسیاری از پدیده‌های دنیای علم از پیچیدگی‌هایی شامل تعداد متغیرهای زیاد و برهمکنش‌های متفاوت بین ذرات و محیط اطراف آنها تشکیل شده‌اند. برای مثال، بسته‌های محاسباتی متنوعی برای مطالعه جریان سیالات، تحلیل ساختارهای مهندسی، ساختار بلوری یا مدل‌سازی پدیده‌های فیزیکی بزرگ مورد استفاده قرار می‌گیرند. با توجه به پیشرفت‌ها و نوآوری‌های اخیر در زمینهٔ بسته‌های محاسباتی، مانند الگوریتم‌های بهینه‌سازی جدید، پشتیبانی از محاسبات چند هسته‌ای و یادگیری ماشینی، بسته‌های محاسباتی تا حد خوبی مدل‌های ریاضی متناظر با یک سامانه واقعی را توصیف می‌کنند و بعضی از ویژگی‌های سامانه را محاسبه می‌کنند. گاهی بررسی دینامیک تحول سامانه در بازه زمانی کوتاه با استفاده از یک بستهٔ محاسباتی نیز امکان‌پذیر است. به‌علاوه، پژوهشگران از بسته‌های محاسباتی برای ارزیابی فرضیات موجود در ساختار سامانه بهره می‌برند که ما را قادر می‌سازد پیش‌بینی‌هایی در ارتباط با پاسخ سامانه برای شرایط متفاوت داشته باشیم و این شبیه کاری است که در علوم داده از آن به وفور استفاده می‌کنیم. شبیه‌سازی‌ها به عنوان پلی بین آزمایشگاه و بررسی واقعی پدیده‌ها در عمل و مطالعه نظری سامانه به کار می‌روند. بنابراین از نظر هزینه، زمان آزمایش، خطرات آزمایشگاهی، ریسک‌پذیری و حذف شرایط محیطی آزمایشگاه بسیار سودمند هستند و اجازه می‌دهند رفتار سامانه را در شرایط متفاوت و در حضور عوامل تأثیرگذار بررسی کنیم.

با وجود مزایای بسیار خوب استفاده از بسته‌های محاسباتی گوناگون، نکات مهمی در زمینه کاربرد آنها وجود دارد. زیرا بسته‌های محاسباتی اغلب با ساده‌سازی زیادی نسبت به سامانهٔ پیچیده واقعی همراه هستند تا مدل‌سازی برای سامانه ممکن باشد. چنین ساده‌سازی‌هایی برای مدل‌سازی، اعتبار کاربرد نتایج به‌دست آمده را محدود می‌کند، یا گاهی حذف بعضی از خصوصیات واقعی سامانه منجر به نتایج اشتباه می‌شود. بنابراین اعتبارسنجی نتایج حاصل از بسته‌های محاسباتی می‌تواند چالش برانگیز باشد. بستهٔ محاسباتی اغلب مبتنی بر فرض های اولیه‌ای از سامانه و همچنین روابط بین پارامترهای اساسی سامانهٔ مورد بررسی است. وابستگی نتایج به این فرض های اولیه، اعتبار نتایج را محدود می‌کند و تغییر اندک در پارامترهای ورودی ممکن است تأثیر زیادی در خروجی و نتایج شبیه‌سازی داشته باشد. در یک شبیه‌سازی، جهت یافتن پاسخ به سؤالات مشخص یک سامانهٔ معلوم از مدل مشخصی استفاده می‌کنیم. بنابراین در برخی مواقع نمی‌توانیم پدیده‌های ویژه‌ای را که در یک سامانهٔ پیچیده بروز می‌کند بیابیم و در اغلب موارد، شبیه‌سازی قادر به توصیف پدیده های نوینی که از یک سیستم پیچیده نشات می‌گیرند، نیست.

افرادی که بسته‌های محاسباتی را توسعه می‌دهند و یا افرادی که از آنها استفاده می‌کنند همواره با یک سوال مهم روبه‌رو هستند که چطور به نتایج محاسباتی اعتماد کنند؟ اعتبارسنجی (Verification) و راستی‌آزمایی (Validation) یک شبیه‌سازی

عددی، راهکارهای نخستین برای ایجاد و کمی سازی این اطمینان هستند.

اعتبارسنجی، ارزیابی دقت یک مدل‌سازی عددی در مقایسه با داده‌های تجربی از یک سامانه است. در صورتی که در راستی‌آزمایی، رابطه شبیه‌سازی با دنیای واقعی، مسئله اصلی نیست بلکه ارائه شواهدی مستند است تا بیان کند که مدل محاسباتی با چه دقتی واقعیت سیستم اصلی را شبیه‌سازی می‌کند.

هنگام استفاده از بسته‌های محاسباتی باید به دو مفهوم اساسی توجه کرد: (۱) مدل مفهومی (Conceptual Model) که شامل تمام داده‌های مدلسازی و معادلات حاکم بر سامانه است که رهیافت علمی را توصیف می‌کند و با تحلیل و مشاهده سامانه فیزیکی نتیجه میشود. (۲) مدل کامپیوتری (Computerized Model) که یک الگوریتم عملیاتی است و یک مدل مفهومی را شبیه‌سازی می‌کند.

در علوم و مهندسی، ارزیابی کمی و دقیق، شرط لازم برای اعتبارسنجی است. باید روش‌هایی برای اندازه‌گیری دقت یک مدل با توجه به شرایط ویژه آن ابداع کرد. بدیهی است که با افزایش پیچیدگی یک مدل، ارزیابی دقت دشوارتر و دامنه کاربرد آن محدود خواهد شد.

در فعالیت‌های اعتبارسنجی، دقت در رابطه با داده‌های تجربی اندازه‌گیری می‌شود. از آنجا که همواره داده‌های تجربی دارای خطاهای تصادفی آماری و سیستماتیک هستند، موضوع دقت به معنای مطلق غیرممکن است و با این حال، انتظار داریم که از نظر آماری یک مقایسه معنی‌دار از نتایج محاسباتی و اندازه‌گیری‌های تجربی داشته باشیم. به عبارتی چالش‌ها و پیچیدگی‌هایی در اعتبارسنجی بسته‌های محاسباتی وجود دارد که شامل مسائلی مانند تصدیق تخصصی، تعاملات پیچیده بین اجزای سیستم و مدیریت منابع محاسباتی است.

بنابراین در استفاده از بسته‌های محاسباتی در علوم و مهندسی نیازداریم بدانیم که چه تقریب‌هایی در مدل به‌کار گرفته شده است، چه ویژگی‌های فیزیکی در مدل لحاظ شده است، چه پارامترهای اولیه ای در مدل فرض شده است، چه مدل ریاضی و با چه محدودهٔ اعتباری در مدل شبیه‌سازی به کار گرفته شده است و در نهایت در استفاده از سیستم محاسباتی تنها به دنبال جواب کدام سوال مشخص از سیستم هستیم. تحلیل و دقت نتایج وابسته به کیفیت مدل به کار رفته، دقت پارامترهای ورودی مسئله و خطای محاسباتی است. در این مرحله، دانش نظری برای ارزیابی نتایج به دست آمده از بسته‌های محاسباتی بسیار موثر است. در نهایت مستندسازی داده‌های استفاده شده در شبیه‌سازی و نحوه انتشار آنها برای تسهیل بازبینی و تکرار دقیق تحقیقات، حائز اهمیت است.

رضا عسگری سردبیر
عبداله لنگری مدیر مسئول