אוניברסיטת חיפה
הפקולטה למדעי החברה והמתמטיקה
החוג למדעי המחשב
פרויקט גמר
ד"ר שרונה ט. לוי
מר חננאל חזן

סימולציה שיתופית ללמידה על מערכות מורכבות:
"אני חלקיק, אנחנו חומר"

גל פרי ת.ז 065963761
יבגני רולר ת.ז 317844801

תוכן עניינים

הפרויקט והפתרון	עמ' 2-3
תיאור תהליכים ואלגוריתמים	עמ' 6-9
בניית אב טיפוס והמסקנות שהושגו	עמ' 10-11
סיכונים טכניים וקשיים למימוש דרישות הלקוח	עמ' 12-13
סיכומי פגישות עם לקוח	עמ' 14
עדכוני לוח זמנים ודרישות לקוח	עמ' 15-22
בדיקות תוכנה	עמ' 23-29
מדריך למתכנת	עמ' 30-36
ביבליוגרפיה	עמ' 37

הפרויקט והפתרון

1.רקע

הפרויקט "אני - חלקיק, אנחנו – חומר" נוצר כתגובה לצורך בכלים להוראה מוצלחת יותר בבתי ספר יסודיים ובחטיבות הביניים של מקצוע המדעים ובפרט בכל מה שקשור בפיזיקה של מצבי צבירה של החומרים.
הפרויקט והסימולציה, אשר נוצרו כתוצאה ממחקר, הן בפן החינוכי על ידי ד"ר שרונה ט. לוי והן בפן היישומי, נועדו להמחיש ולמדל עבור התלמידים את התנהגות החלקיקים המרכיבים את החומר.
אנו מקווים שסימולציה זו תהיה האבן הראשונה בבניית האפליקציה הכוללת, המסבירה לילדים את מבנה החומרים ושינויי מצב הצבירה שלהם כתלות בתנאי הסביבה.

2.דרישות

2.1 כללי ומטרות

קהל היעד לשימוש באפליקציה הינו מורים למדעים ותלמידי חטיבות הביניים.
עובדה זו מגדירה את הדרישות של מורי בית הספר מאפליקציה מעין זאת. האפליקציה צריכה להיות מצד אחד פשוטה ואינטואיטיבית להפעלה ומצד שני עליה להיות מסוגלת למדל את התהליכים הפיזיקאליים בצורה קרובה ככל האפשר למציאות הקיימת בטבע.

2.2 דרישות לפרויקט ספציפי

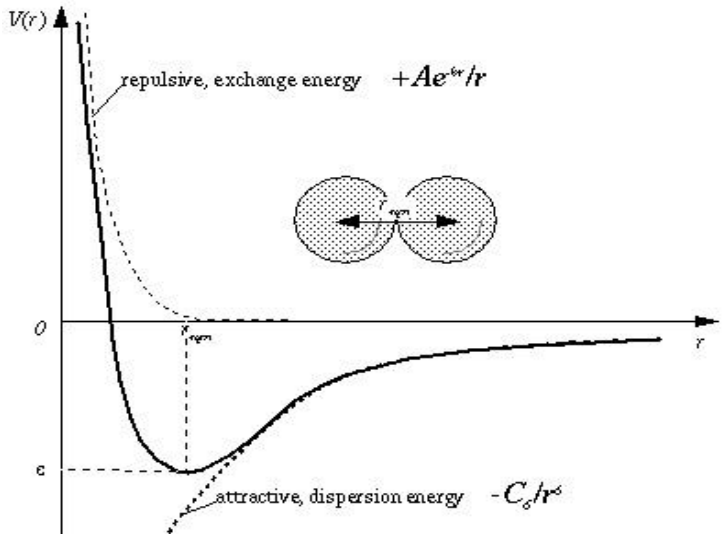
הגדרת הפרויקט המקורית התייחסה לבניית האפליקציה בסביבת NetLogo, כך שתדמה באופן אינטראקטיבי את מבנה החומר ברמה מיקרוסקופית ואת השינויים שמתרחשים ברמה הזו, כאשר החומר משנה את מצבי הצבירה שלו.
המטרה הייתה לתת למשתמשים תחושה של שליטה בחלקיק בודד, כאשר כל הקבוצה ביחד יוצרת את החומר.

3. רקע פיזיקאלי

על מנת להיצמד ככל שניתן לתופעות המתרחשות בטבע, הוחלט להשתמש בפרדיגמה ידועה שחלה על האובייקטים בטבע והיא השאיפה להיות במצב האנרגטי הנוח ביותר.
ברמה המיקרוסקופית פרדיגמה זו ניתנת לביטוי בצורה הטובה ביותר ע"י פוטנציאל Lennard-Jones.
פוטנציאל L-J מוגדר כך:

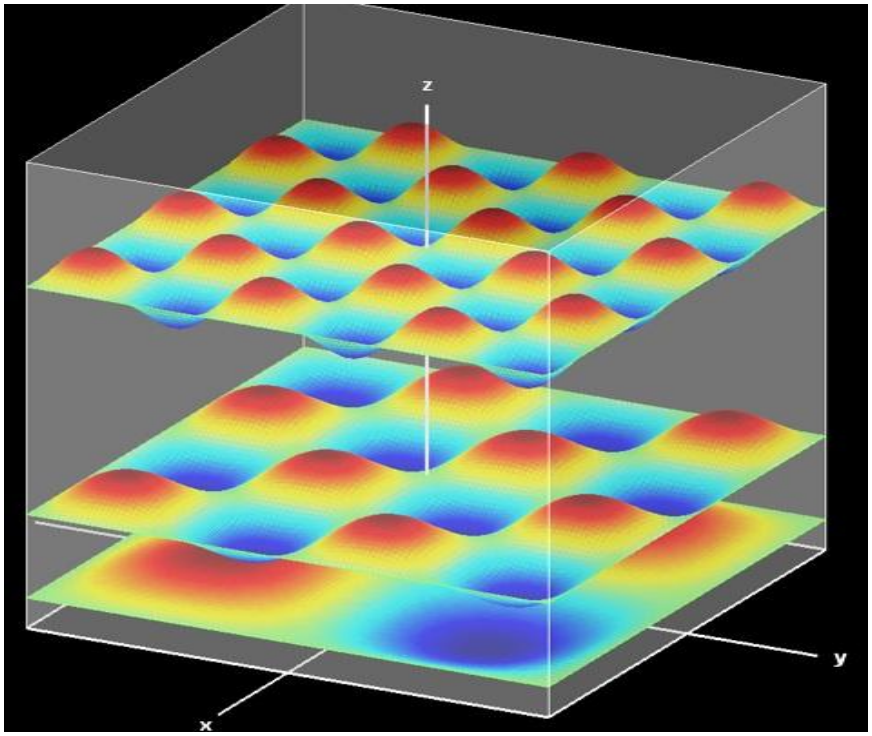
$$(1)\ V_{LJ} = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$$

כאשר ε מהווה את עומק הבור הפוטנציאלי, r הוא מרחק בין מרכזי החלקיקים ו-σ הוא מרחק בו אנרגיית האינטראקציה מתאפסת.
בור פוטנציאלי הוא מצב בו אנרגיה באינטרקציה בין שני החלקיקים היא נמוכה ביותר.
מבחינה גרפית ניתן להציג את הפוטנציאל בצורה הבאה:



הצגה גרפית של פוטנציאל L-J. מינימום של פוטנציאל הוא ε – בור פוטנציאלי

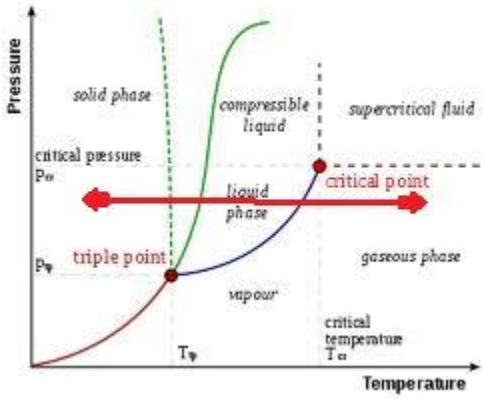
ניתן לראות שאיבר r^{-6} מהווה את החלק של המשיכה בנוסחה ונגזר מכוח van der Waals. איבר r^{-12} מהווה את חלק הדחיה.
יש לציין שהכוח האמיתי גדל מעריכית לפי עקרון האיסור של Pauli.
למרות אי הדיוק, הפוטנציאל המוצע נותן קירוב טוב מאוד לפעולות גומלין בין החלקיקים בגזים אצילים וכפי שהתברר מאוחר יותר גם לחומרים הנמצאים במצב צבירה מוצק ונוזל.
פוטנציאל Lennard-Jones מגדיר את הטופולוגיה של המרחב, כאשר המקומות המעודפים להימצאות החלקיקים מהווים בורות פוטנציאליים.



ייצוג גרפי סכמתי של טופולוגיה בשדה המשחק. אזורים אדומים הם אזורים
עם אנרגיה גבוהה ולכן לא יציבים.

בורות אלו מגדירים את מבנה הגביש עבור אותו חומר, כמובן בהינתן תנאי מעבר בין מצבי צבירה.
ידוע מהנדסת חומרים כי תנאי ההתמצקות של החומר משנים את המבנה הגבישי שלו. לכן אנו מניחים שתי הנחות:

- ✓ מעברי פאזות מתרחשים לאט.
- ✓ מעברי פאזות תמיד מתרחשים בתנאי הסביבה בהם ניתן לראות את 3 הפאזות.



גרף תלות לחץ בטמפרטורה של חומר מסוים, כאשר מופיעים בגרף נקודות מעבר הפאזות.
קו אדום בציור מציג סכמתית חוק התרחבות / התכווצות איזוברי כאשר הלחץ קבוע וערכו
מאפשר לעבור בכל 3 פאזות ע" שינוי בטמפרטורה.

4. היישום בסימולציה

4.1 כללי

היישום המוצע מהווה אפליקציה בה כל סטודנט שולט ומפעיל את החלקיק שלו, כאשר ברשותו מידע כמותי וחזותי על מיקומי הבורות הפוטנציאליים ביחס לסטודנטים אחרים, אשר שולטים גם הם על חלקיקים דומים.

4.2 היישום בפועל

היישום הינו סימולציה עם משטח דו-מימדי, כאשר לכל סטודנט מוצג חלון לקוח (קליינט) בו הוא שולט על החלקיק שלו. לסטודנט יש 3 דרגות חופש במשטח דו-מימדי:

- ✓ תנועות לאורך ולרוחב המשטח.
- ✓ סיבוב סביב מרכז החלקיק שמאפשר לשנות את כיוון התנועה.

אפליקציית השרת מבצעת שליטה, בקרה וחישוב עבור הקליינטים וכך מתחזקת את שדה הסימולציה.
למפעיל הסימולציה (מפעיל השרת) קיימת האפשרות לשנות את מיקומם הן של חלקיקי הקליינט והן של הבורות הפוטנציאליים עפ"י הצורך. שינוי מיקום חלקיקי הקליינט נעשה ע"י גרירה פשוטה באמצעות העכבר.
שינוי מיקומם וגודלם של הבורות הפוטנציאליים נעשה בעזרת שליטה על כמותם ומיקומם של החלקיקים הסטטיים וכן בעזרת שינוי קבועי ε ו-σ בחישוב פוטנציאל Lennard-Jones על השרת.

תיאור תהליכים ואלגוריתמים

1. מפרט דרישות תוכנה

חזון המוצר - סימולציה שיתופית אשר תהיה מסוגלת להמחיש באופן ממשי וכן ללמד תלמידי בית ספר את נושא עולם החומר.
על הסימולציה לאפשר לתלמידים חוויה גופנית ולימודית, אשר תמצה באופן מוחלט את התנהגות החלקיקים במרחב והשפעת תנאים שונים עליהם וכתוצאה מכך, על מבנה החומר.

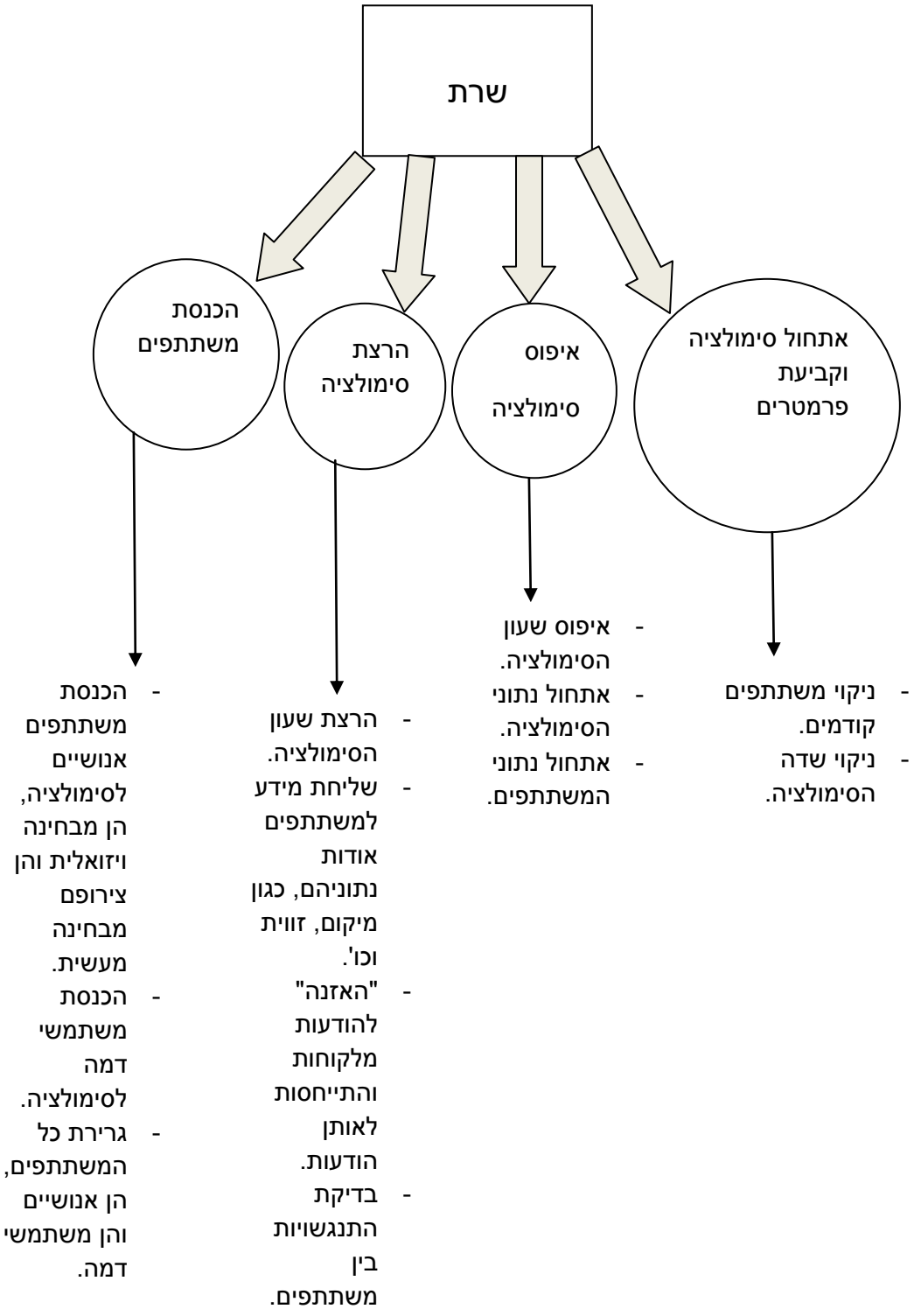
תיאור כללי – על המוצר לפעול בארכיטקטורת שרת-לקוח בעלת שני ממשקים:

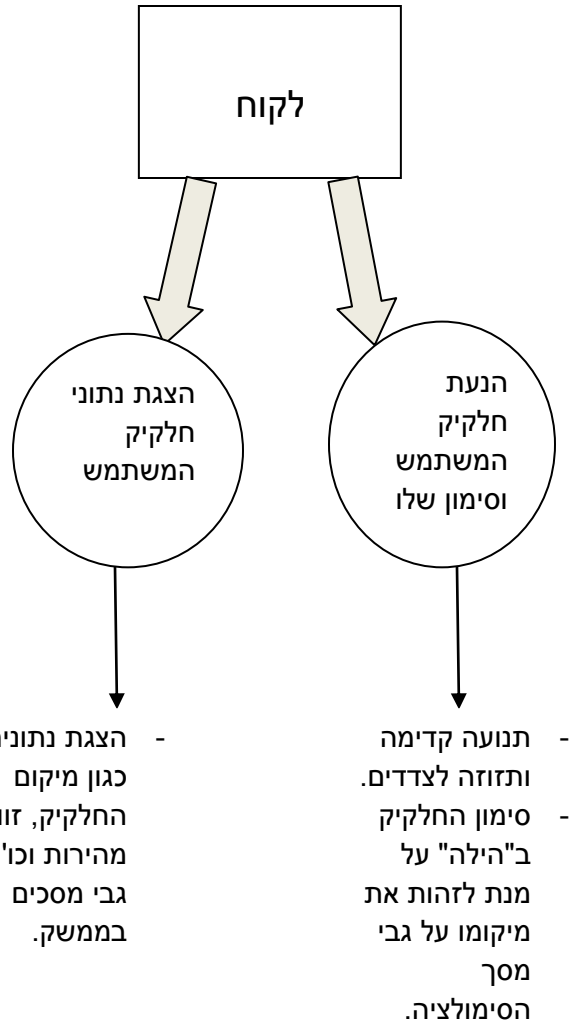
- ממשק שרת – ינהל את הסימולציה ע"י שליטה בפרמטרים שונים וכן שליטה באופי והתנהגות הסימולציה.
- ממשק לקוח, אשר בו תהיה לתלמיד הזדמנות לשלוט על חלקיק ולהבחין כיצד תנועותיו ותנועת שאר התלמידים כחלקיקים, משפיעה על מבנה החומר.

דרישות כלליות:

סביבת עבודה – NetLogo 5.
מודל למימוש ארכיטקטורת שרת-לקוח – HubNet.
מסד נתונים – אין צורך.

2. תרשים לתכנון המערכת





3. מבנה המערכת

שפת NetLogo היא לא שפה מונחת עצמים, אך ניתן לחלק את הפרוצדורות הקיימות בתוכנית לפי תפקידן.

אתחול: פונקציות setup ו-reset המאתחלות את המשתנים הגלובליים ומשתני המערכת, כגון timer ticks ו- tick-advance.

הכנה לכניסת המשתתפים:

- ✓ כניסת הקליינטים (סטודנטים) ע"י פרוצדורה enter-students. הפרוצדורה מכינה את התוכנית לקבלת סימן מ-Hubnet Control על כניסת הקליינט חדש.
- ✓ כניסת הרובוטים – מופעל על השרת עצמו בעזרת הפרוצדורה enter-robots.

ריצה: פרוצדורה go המפעילה את הסימולציה ומנהלת את זרימת התוכנית:

- ✓ מפעילה את התקדמות ה-ticks.
- ✓ מפעילה בדיקות התנגשות בין משתתפי הסימולציה.

- ✓ מפעילה את הפרוצדורה send-info-to-client שבעזרתה נשלחים עדכונים לקליינטים אודות נתוניהם.
- ✓ מקשיבה לקליינטים.

מודול החישובים: פונקציות שתפקידן לבצע חישובים נחוצים לעבודת המערכת:

- ✓ בדיקה וחישוב ההתנגשויות.
- ✓ חישובי מיקום תנועה.
- ✓ חישובי המהירויות – רגעית וממוצעת.
- ✓ חישובי אנרגיה – פוטנציאלית (Lennard-Jones) וקינטית.

מודולי עזר: מבצעים גרירה במהלך הרצת הסימולציה ושינויים בקבועי המערכת טרם הפעלת הסימולציה.

4. אלגוריתמים מרכזיים

- ✓ אלגוריתם בדיקה וביצוע התנגשות בין חלקיקים. מבצע פתרון משוואות תנועה דינמיות:

משוואת שימור אנרגיה:

$$\frac{1}{2}mV_{1,before}^2 + \frac{1}{2}mV_{2,before}^2 = \frac{1}{2}mV_{1,after}^2 + \frac{1}{2}mV_{2,after}^2$$

משוואת שימור תנע:

$$m\overrightarrow{V_{1,before}} + m\overrightarrow{V_{2,before}} = m\overrightarrow{V_{1,after}} + m\overrightarrow{V_{2,after}}$$

משוואת שימור תנע היא משוואה וקטורית ודורשת פתרון לאורך הצירים X ו-Y.

- ✓ אלגוריתם חישוב מיקום בורות פוטנציאליים לפי Lennard-Jones כפונקציה של כמות ומיקום היחסי של החלקיקים. משתמש בחישוב הפוטנציאל לפי הנוסחה $V_{LJ} = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$ וגם בחישובי הקשרים, בעזרת כלי ה- links.

בניית אב טיפוס והמסקנות שהושגו

1. סביבת פיתוח

פיתוח האפליקציה נעשה בסביבת NetLogo 5, אשר פותחה ע"י אורי וילנסקי וצוות מפתחים באוניברסיטת Northwestern.
הסביבה עצמה מהווה סביבת קוד פתוח שכתובה בשפת JAVA וכתוצאה מכך רצה מעל Java Virtual Machine. השפה והסביבה מספקות מגוון אפשרויות לקידוד וליישום האפליקציות המדמות מערכות מורכבות וכן אופטימיזציות של הקוד ברמה של Java Virtual Machine.

2. היבטים פילוסופיים

חלק מהתכנון וההכנה לפיתוח היה רכישת הבנה בסיסית בתופעת הטבע בה נדרשנו לטפל.
כתוצאה מהלימוד נדרשנו לתת תשובות וביטוי מתאים ביישום לשאלות כגון:

- ✓ האם לסטודנט המפעיל את החלקיק תהיה שליטה מלאה עליו?
  הביטוי לשליטה או אי-שליטה נראה ביישום כיכולת החלקיק לרדת לתחתית הבור הפוטנציאלי באופן עצמאי.

- ✓ האם לאחר ההתנגשות, החלקיקים קופצים או פשוט משנים את כוונם עפ"י משוואות התנועה הדינמיות? האם ישנה לסטודנט אפשרות לנוע או לשנות כיוון כראות עיניו?

- ✓ איך מתקיים חוק שימור אנרגיה? אם לחלקיק יש אנרגיה קינטית משמעות הדבר היא תנועה.
  הסטודנט לעומת זאת יכול לבחור שלא לנוע.

חלק מהנושאים הללו קיבלו התייחסות במוצר הסופי וחלקם לא.
למשל, הוחלט כי סטודנט יהיה חופשי לנוע או לא לנוע לכל אורך הפעילות, אך ההתנגשות בחלקיק אחר תגרום לקפיצה של שני החלקיקים למרחק קבוע ולכיוון חדש עבור שניהם על מנת להמחיש את התופעה.
נושא שימור האנרגיה ברמת המערכת וכתוצאה מכך קיום חוקי תרמודינמיקה טרם קיבל התייחסות, היות ובמוצר הסופי מומש במלואו רק מצב בו תנאי הסביבה נשארים קבועים. לכן אין מעברי פאזות לאורך הפעילות וכתוצאה מכך אין צורך לדאוג לקיום החוק ראשון והשני של תרמודינמיקה.
יש לציין שברמת הקוד ישנה האפשרות לכך וכן יהיה זה קל ונוח למפתחים אשר ירצו להמשיך ולהרחיב את הפרויקט, להוסיף את ההתייחסויות לנושאים הנ"ל.

3. מימוש

המימוש של הפרויקט נעשה בשפת NetLogo תוך שמירה, ככל האפשר, על בהירות וקריאות הקוד למשתמש בו, לצורכי פיתוח המשך.
כמו כן, נעשה מאמץ, בהתאם ליכולות ומבנה השפה, לשמור על זרימת התוכנית לפי סדר הופעות הפונקציות, או לחילופין הוצאת פרוצדורות חישוביות לסוף הקובץ.
בשלב ראשון הוצע לנו להשתמש באפליקציה "Dancing with molecules" שפותחה ע"י ווסאם ראפע וסאאיד עוואד בשנת 2009 במסגרת פרויקט גמר בהנחיית ד"ר שרונה ט. לוי.
האפליקציה "Dancing with molecules" היא גזירה של אחד המודלים של GasLab מהספרייה הסטנדרטית של NetLogo.

חשוב לציין שרוב האלמנטים מהפרויקט הנ"ל שונו או הורדו מן הקוד, כאשר התברר כי הם אינם רלוונטיים עבור המטרות שהצגנו.

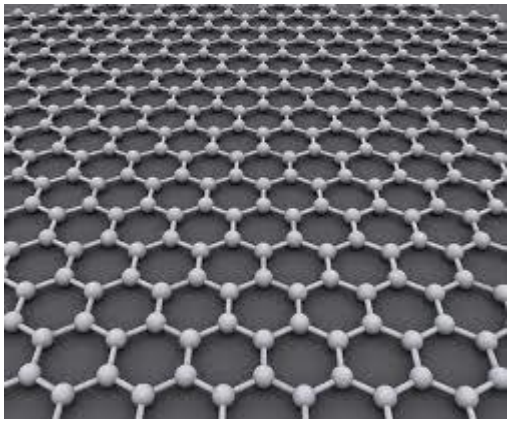
4. שלבים לבניית אב טיפוס

בניית אב טיפוס לפרויקט "אני-חלקיק, אנחנו –חומר" כללה התלבטויות רבות הנגזרות מהצורך להתאמה מרבית של המוצר הסופי לקהל היעד - תלמידי בית ספר.
הניסיון לשמור על פשטות מצד אחד, אך יחד עם זאת גם על נכונות פיזיקלית, ליוו אותנו לאורך כל שלבי העבודה והובילו אותנו ליצירת אב טיפוס שכלל את בחירת מספר השכנים לחלקיק ולא כלל אפשרות לשינוי גודל החלקיק וקבועי החישוב של Lennard-Jones.
לאחר הגשת גרסה זו נדרשנו ע"י המנחה למספר שינויים, כגון:

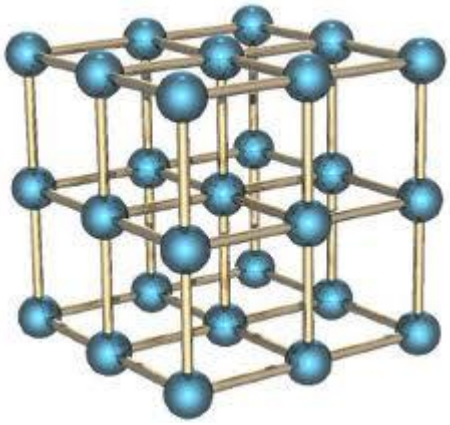
- ✓ הוספת אפשרות של שליטה בערכי הקבועים של פוטנציאל Lennard-Jones.
- ✓ הוספת אפשרות של שינוי הגודל הוויזואלי של החלקיק.
- ✓ הוספת מוניטורים בממשק הסטודנט להצגת מהירות, אנרגיה פוטנציאלית ואנרגיה קינטית של החלקיק.
- ✓ הוספת אפשרות של התנגשות בין חלקיקים, תוך בחירה בין שלושה מצבים – ללא התנגשות, התנגשויות ללא הגבלה והתנגשויות מוגבלות, אשר מאפשרות התנגשות אחת בלבד עם אותו חלקיק.

סיכונים טכניים וקשיים למימוש דרישות הלקוח

פרויקט "אני – חלקיק, אנחנו – חומר" מהווה גישה חדשה וחדשנית לתחום הלמידה האינטראקטיבי של מבנה החומר והשינויים החלים בו עקב שינויי תנאי הסביבה.
נוכח עובדה זו היה ברור לנו שלשלב תכנון הפרויקט חשיבות רבה וכן שההחלטות שנקבל טרם תחילת הקידוד תהיינה רבות השפעה על נכונות ההמחשה של תופעות פיזיקליות.
אחת ההחלטות שקיבלנו בשלב התכנון הייתה ההחלטה לקבוע מראש את מראה המבנה הגבישי.
הכוונה הייתה לגרום לסטודנטים להסתדר לפי אחת מצורות הסידור הבאות:



יחדה בסיסית – משושה



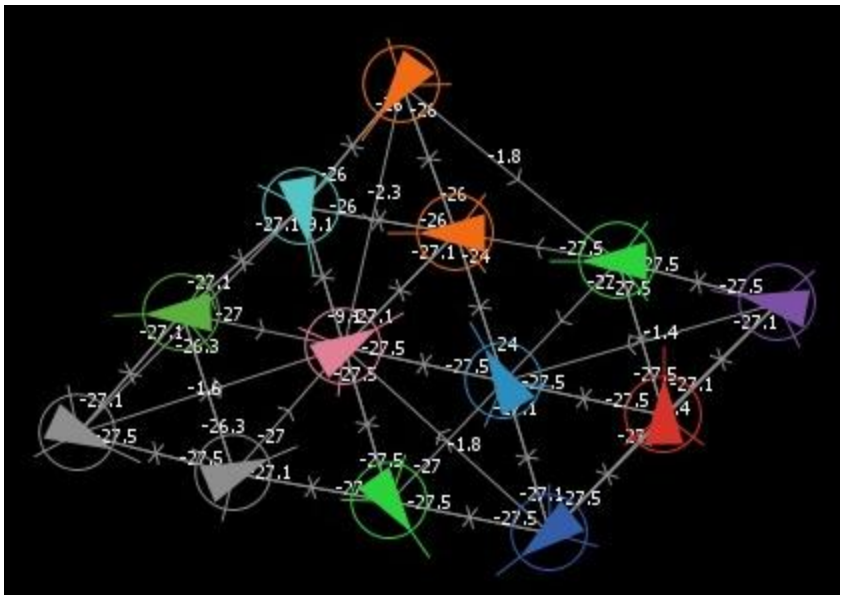
יחידה בסיסית – מרובע

הדרך בה בחרנו לגרום לסטודנטים להסתדר כך כללה את ההגבלות הבאות:

- ✓ הגבלת מספר השכנים עבור כל חלקיק.
- ✓ בנוסף לחישוב פוטנציאל Lennard-Jones, בחרנו להגביל את ערכי הזוויות בין השכנים של אותו חלקיק. במקרה של משושה – 3 שכנים, °120 . במקרה של מרובע – 4 שכנים, °90.

בעת הצגת הגרסה הניסיונית התברר לנו כי לא נכון פיזיקלית לאלץ את כמות השכנים בצורה מפורשת והסידור אמור להתרחש אך ורק מתוקף כוחות דחיה ומשיכה אותם מייצג פוטנציאל L-J.
מאחר ולא היה יותר צורך בחישוב זוויות, נאלצנו לזנוח את קטעי הקוד המתייחסים לחישוב הזויות.
יש לציין שפיתוח הקוד עבור חישוב זוויות הביא לשימוש בכלי חדשני בשפת NetLogo – Links.
השימוש ב-Links הוא נדיר מאוד בסימולציות שפותחו עד כה בסביבת NetLogo. בעזרת כלי זה ניתן לפשט משמעותית את החישובים עבור מערכות מורכבות.
במוצר הסופי משמשים אמצעים אלו להמחשת המיקום האופטימלי של החלקיקים באופן ויזואלי וכן לפעולות הגומלין בין החלקיקים.

המבנה האופטימלי ה"מאולץ" רק ע"י הפוטנציאל נראה במוצר הסופי כך:



13 חלקיקים המסודרים עפ"י אנרגיות אופטימליות, יחידה בסיסית – משולש.

סיכומי פגישות עם הלקוח

17.11.11 – פגישת היכרות, על מנת שנוכל להתרשם מהפרויקטים האפשריים לבחירה.
לאחר הפגישה, הוחלט באישור הלקוחה, להצטרף לפרויקט "סימולציות שיתופיות ללמידה על מערכות מרוכבות", כאשר הסימולציה המבוקשת הינה "אני חלקיק אנחנו חומר".

12.1.12 - בפגישה זו דנו עם הלקוחה על התופעות הפיזיקליות והכימיות המתרחשות בין חלקיקים במרחב, אשר אותם מעוניינת הלקוחה להמחיש באמצעות הפרויקט.
כמו כן, הציגה בפנינו הלקוחה את חזונה לפרויקט ואת דרישותיה לגבי שלבי הפרויקט והתוצר הסופי.

6.2.12 - פגישה עם הלקוחה למטרת הגדרת שלבי הפרויקט וחידוד המשימות הנדרשות.

4.6.12 - דנו עם הלקוחה על שאלות שונות בהן נתקלנו במהלך ביצוע השלב הראשון והשני של הפרויקט.
כמו כן, התייעצנו עם הלקוחה לגבי אופן מימוש השלב השני. עסקנו בעיקר בשאלה כיצד לבצע את אופן חישוב הזויות הנוצרות בין חלקיק לשכניו.
העלינו בפני הלקוחה מספר רעיונות והקשבנו לדעותיה ולהצעותיה.

25.6.12 - במהלך הפגישה הצגנו ללקוחה את התקדמותנו בפרויקט ואת האופן בו מימשנו את השלב השני. כמו כן, דנו עימה בשאלות חיוניות נוספות להשלמת ביצוע השלב הראשון והשני של הפרויקט.
הלקוחה ביקשה מאיתנו לבדוק כיוון חדש בנוגע לאופן הגדרת החלקיקים הנמצאים בשכנות לכל חלקיק ולכן היה עלינו לבחון זאת מחדש תוך אפשרות של שינוי השלב הראשון, אשר את רובו כבר השלמנו.

16.7.12 - קיבלנו מהלקוחה הנחיות חדשות לביצוע, על מנת שנוכל להגיע יחד איתה למסקנות בנוגע לאופן השלמת השלב הראשון מחדש.

30.7.12 – הצגנו בפני הלקוחה את השינויים אשר התבקשנו לבצע ויחד עימה הצלחנו לפתור את הבעיות שעלו.
במהלך הפגישה הועלתה הבעיה שאיננו עומדים בלוח הזמנים אשר תכננו לעצמינו ומפאת חוסר הזמן לא ניתן יהיה לבצע את השלב השלישי המתוכנן לביצוע הפרויקט.
לאחר התייעצות הלקוחה עם רכז הפרויקטים, נתבקשנו לבצע שלב שלישי, אך שונה – מימוש התנגשויות בין החלקיקים.

13.8.12 – הצגנו ללקוחה את הפרויקט, לאחר ביצוע השלב השלישי וקיבלנו את אישורה לסיום הפרויקט.

3.9.12 - דנו עם הלקוחה לקראת הכנת המצגת לפרויקט.

עדכוני לוח זמנים ודרישות לקוח

תאריכים	מה בוצע?	הערות
נובמבר 2011	פגישת התרשמות עם מנחת הפרויקט וגיבוש החלטה לבחירת הפרויקט.	
דצמבר 2011 – ינואר 2012	בשלב הראשון קיבלנו מספר משימות מקדימות מהמנחה. להלן המשימות: - התקנת סביבת העבודה NetLogo. - למידת NetLogo ו-HubNet ע"י מדריכים הנמצאים באתר. - התרשמות ולמידת פרויקט דוגמא – "רוקדים עם מולקולות". - קריאת מאמרים על סימולציות שיתופיות. - למידת נושא החומר ומעברי פאזה, תוך התמקדות בצורות אריזה של מולקולות במוצק והגדרות יסוד של הפאזות השונות.	להלן המאמרים העוסקים בסימולציות שיתופיות: Ares, Nancy, Stroup, Walter M. and Schademan, Alfred R.(2009) 'The Power of Mediating Artifacts in Group-Level Development of Mathematical Discourses', Cognition and Instruction, 27:1, 1 — 24. Colella, V.(2000) 'Participatory Simulations: Building Collaborative Understanding Through Immersive Dynamic Modeling', THE JOURNAL OF THE LEARNING SCIENCES, *9*(4), 471–500. להלן הספרים הרלוונטיים לנושא החומר והחלקיקים: - פרופ' בן-דור, ל ואחרים. כימיה אי אורגנית. יחידות 1,2. תל

		אביב: האוניברסיטה הפתוחה. - קירש,י ואחרים. (1997). אטומים,מולקולות ותכונות החומר יחידות 2-4,6. תל אביב: האוניברסיטה הפתוחה.
פברואר 2012	- פגישה עם המנחה לגיבוש שלבי העבודה הנחוצים למהלך הפרויקט וכן לכתיבת דו"ח הגדרות הפרויקט . - כתיבת דו"ח פרויקט. - פגישה עם המנחה לאישור דו"ח הפרויקט. - בניית סביבת שרת-לקוח ב-HubNet.	**<u>הגדרת מטרת הפרויקט</u>** יצירת סימולציית שרת-לקוח שמטרתה היא הבנת עולם החומר בקרב תלמידים, דרך התנסות אישית כאטום בקהילה של אטומים. **<u>שלבי הפרויקט העיקריים</u>** 1. תכנון אינטראקציה בין זוגות חלקיקים. 2. תכנון אינטראקציה בין חלקיקים במרחב, ע"י חישוב זוויות בין החלקיקים. 3. . תכנון ההתייחסות לטמפרטורה.
מרץ 2012	- המשך בניית סביבת שרת-לקוח.	**מה נכלל בבניית סביבת שרת-לקוח?** <u>סביבת שרת</u>: - קביעת הפרמטרים של ה"עולם" בו נעים החלקיקים – גודל המסך המייצג את ה"עולם", גודל כל משבצת בעולם וכו'. - כפתורים להתחלת הסימולציה, הרצתה,

		הכנסת משתתפים, אתחול הסימולציה. - סליידרים לקביעת פרמטרים המסייעים בחישובים השונים. - סליידרים לקביעת גודל החלקיקים. - אמצעים לתצוגת נתונים – מוניטורים המציגים נתונים, כגון מספר שכנים. <u>סביבת לקוח</u>: - עיצוב הצורה המייצגת את החלקיק בסימולציה. - מוניטורים להצגת מיקום החלקיק והזווית בה הוא נמצא. - כפתורים המאפשרים את קביעת תנועת החלקיק – שמאלה, ימינה וקדימה. הערה: לאורך כל העבודה, שינינו והוספנו אמצעים חדשים, כגון מוניטורים, כפתורים וסליידרים נוספים.
אפריל 2012	- התחלנו בכתיבת שלב תכנות האינטראקציה שבין זוגות חלקיקים. בשלב זה כתבנו את הקוד הדרוש לחישובי מרחקים וחישוב פוטנציאל לנארד-ג'ונס.	**<u>שלבי הביצוע של שלב זה:</u>** - יצירת מבני נתונים (רשימות) לכל חלקיק, הכוללים נתונים אודות מרחקו מכל חלקיק ואת ערך פוטנציאל לנארד ג'ונס עבור כל "זיווג"

		שכזה. - למידת פוטנציאל לנארד ג'ונס ותכנון כיצד לנסח זאת בקוד שלנו. בשלב זה השתמשנו בספר, אשר סוקר רעיון כללי אודות הסימולציות וכן מדגים סימולציות Fortran של אינטראקציות, ע"י שימוש בפוטנציאל לנארד ג'ונס. להלן פרטי הספר: Frenkel D , Smit B. (2001) 'Understanding Molecular Simulation, Second Edition: From Algorithms to Applications', Academic Press. - הוספת אמצעי ויזואלי - לינקים, כלומר קשתות בין כל זוג חלקיקים. מעבר להיותם אמצעים ויזואליים, מילאו הלינקים תפקיד חשוב בכתיבת הקוד ובמהלך החישובים. השימוש בהם איפשר את חישוב המרחק שבין החלקיקים וכן להגדרת אזור מסוים בו נמצא כל חלקיק. כלומר, אילו שכנים מקיפים כל חלקיק ברדיוס מסוים.

		- כתיבת הנוסחא והצגת תוצאותיה בסביבת צד לקוח על גבי הלינקים. כל השלבים הקשורים בכתיבת הקוד ארכו מעט יותר זמן משצפינו. היות וזוהי שפה חדשה עבורנו, נתקלנו בקשיים באופן ביצוע המשימות. היה עלינו לחפש את הדרכים המתאימות והרלוונטיות לשפה זו וללמוד פרוצדורות ואמצעים שונים שאפשריים בשפה. בתחילה, בדקנו את השימוש במערך כמבנה נתונים על מנת ספק את שהיה דרוש לביצוע המשימה, אך לאחר מספר ניסיונות, החלטנו לממש זאת ע"י רשימה והפרוצדורות האפשריות בה.
מאי 2012	- סיימנו את כתיבת שלב תכנות האינטראקציה שבין זוגות חלקיקים. - התחלנו בכתיבת הקוד הקשור בתכנון האינטראקציה שבין כלל החלקיקים במרחב.	במהלך עבודתנו, נתקלנו בשאלות הנוגעות לשלב תכנון האינטראקציה שבין כלל החלקיקים במרחב. שאלות אלו עיכבו את המשך עבודתנו, שכן הן היו חיוניות לצורה שבה יתבצעו החישובים ההכרחיים לביצוע שלב זה. בין השאלות: - מהו מספר השכנים של כל חלקיק, אשר עבורם יש לחשב זוויות? - באיזה אופן לחשב זוויות במקרה שמספר השכנים הנבדק הינו 4?

		- מה יהיה המדד לסידור טוב של החלקיקים השכנים ביחס לחלקיק הנבדק? - מהו המסר אותו יש להעביר לתלמיד, הלוקח חלק בסימולציה, על האופן שבו מסודרים החלקיקים? במהלך הפגישה עם המנחה, העלינו מספר הצעות כיצד לחשב את הזויות. לבסוף סיכמנו לבחון אפשרות של סריקת כל השכנים של חלקיק מסוים וחישוב הזווית לפי כיוון הקשתות, בסיבוב עם כיוון השעון.
יוני 2012	- נפגשנו עם המנחה בתחילת החודש על מנת להתייעץ עימה בנוגע לשאלות אותן העלינו בחודש הקודם. - סיימנו את כתיבת הקוד הקשור בתכנון האינטראקציה שבין כלל החלקיקים במרחב.	הצלחנו לממש את רעיון חישוב הזויות, אותו הצענו בפגישה הקודמת עם המנחה. מימוש פתרון זה ארך כחודש, תוך שאנו בודקים שימוש במבנה נתונים מתאים ומשתמשים בפעולות ופרוצדורות המאופשרות בשפה על "קשתות" שבין חלקיקים. למשל – חישוב אורך קשת, חישוב כיוון הקשת וכו'. במהלך פגישה עם המנחה, אשר התקיימה בסוף החודש, התבקשנו ע"י המנחה לוותר לבסוף על שלב חישוב הזוויות שבין חלקיקים בתוך "שכונות", לאחר שהושלם באופן מלא.

		בנוסף, התבקשנו לבדוק כיוון חדש בנוגע לאופן הגדרת השכנים של כל חלקיק וחישוב פוטנציאל לנארד-ג'ונס. לכן, יהיה עלינו לבחון זאת מחדש תוך אפשרות של שינוי השלב הראשון שאותו כבר השלמנו.
יולי 2012	הוספנו לסביבת השרת-לקוח אמצעים נוספים להם נדרשנו ע"י המנחה, על מנת לבצע מספר ניסויים והשוואות שיענו על שאלותינו בנוגע לשלב הראשון, אותו התבקשנו לבחון מחדש. לאחר התייעצות עם המנחה, כתבנו והשלמנו מחדש את ביצוע השלב הראשון.	בין האמצעים שהוספנו: - מוניטורים - להצגת מהירות החלקיק. - סליידרים – נועדו לקביעת פרמטרים בחישוב פוטנציאל לנארד ג'ונס. - רובוטים – משתתפי "דמה" המתנהגים כחלקיקים חדשים ולהם אותן תכונות כמו לחלקיקים הרגילים. כמו כן, הוספנו את האפשרות לגרור ולהזיז את החלקיקים והרובוטים מתוך סביבת השרת, על מנת לאפשר למנחה להתרשם מסידור החלקיקים במרחב, מבלי שתזדקק להקים חלונות לקוח רבים. על מנת לאפשר את אותם

		אמצעים, כתבנו קטעי קוד שיתאימו לפעילותם התקנית.
אוגוסט 2012	הוספנו לסימולציה אפשרות חדשה – התנגשויות בין חלקיקים. השלמנו באופן סופי את כתיבת הקוד וקיבלנו את אישורה של המנחה לכך.	לאחר התייעצות עם המנחה ורכז הפרויקטים, הוחלט לשנות את השלב השלישי אשר היה מתוכנן לפרויקט. מקום זאת, נתבקשנו לאפשר התנגשויות בין חלקיקים.
ספטמבר 2012	כתבנו את חוברת הפרויקט.	

בדיקות תוכנה

<u>שלב ראשון – בדיקת ממשק השרת</u>:

<u>פירוט:</u> בדיקת התפקוד של סביבת השרת הראשונית. סביבה זו כללה את כל אותם הכפתורים הבסיסיים המאפשרים את הפעלתה הראשונית של הסימולציה.

<u>מה נבדק?</u> כפתורי "Setup", "Restart", "Go", "Enter Participants".

תיאור בדיקה	תוצאות הבדיקה	תיקונים שנדרשו
נבדקו כפתורי "setup", "go", "enter Participants" לתפקוד תקין. בדקנו שלאחר לחיצה על "setup" ולאחריו לחיצה על כפתורי "go" ו –"setup", אכן נוספים למסך השרת משתתפים חדשים ושעון ה-Ticks מתקדם באופן סדיר – עדות לפעולה תקינה של כפתור ה-"go".	למסך השרת נוספו משתתפים חדשים ושעון ה-ticks התקדם באופן סדיר.	לא נדרשו תיקונים.
נבדק כפתור ה-"restart" לאתחול תקין של הסימולציה. כלומר שנתוני כל משתתף מתאפסים ומיקומו נקבע מחדש ומוצג על המסך.	לאחר לחיצה על הכפתור, השתנה צבעו של המסך וכן נעלמו כל המשתתפים. כלומר, הסימולציה אופסה לחלוטין.	שינינו את מימוש פעולת כפתור ה-"restart" וכעת הוא אינו משנה את התצוגה ואינו "הורג" את המשתתפים, אלא רק מאפס את נתוניהם ומשנה מיקומם.

שלב שני – בדיקות ממשק הלקוח:

פירוט: בדיקת התפקוד של סביבת הלקוח הראשונית. סביבה זו כללה את כל אותם הכפתורים הבסיסיים המאפשרים את הפעלתה הראשונית של הסימולציה בצד הלקוח.

מה נבדק? כפתורי "forward", "turn left", "turn right" ובוחר (Selector) "mark?".

תיאור בדיקה	תוצאות הבדיקה	תיקונים שנדרשו
שינינו את בוחר "mark?" למצב On ובדקנו שאכן החלקיק המייצג את הלקוח מסומן בעיגול. שינינו חזרה למצב Off ואימתנו לביטול סימון החלקיק.	בוחר הסימון אכן סימן ב"הילה" את החלקיק בעת שינוי למצב On וביטל הסימון במעבר למצב Off.	לא נדרשו תיקונים.
נבדקו כפתורי "forward", "turn left", "turn right" לתגובה ותפקוד תקין בעת הלחיצה עליהם.	החלקיק אכן התקדם בעת לחיצה על כפתור "forward" והסתובב לצדדים המתאימים בעת לחיצה על כפתורי "turn right" ו – "turn left".	לא נדרשו תיקונים.

שלב שלישי –חישוב פוטנציאל לנארד-ג'ונס:

הקדמה: על מנת שנוכל לחשב את פוטנציאל לנארד ג'ונס עבור כל זוג חלקיקים המיוצגים ע"י התלמידים המשתתפים בסימולציה, הוספנו לסימולציה אמצעי חדש בשם "לינק".

לינקים הם מעין ישות הקיימת בשפת NetLogo. לינק מהווה קשת המחברת בין זוג חלקיקים, אם כקשת מכוונת ואם כקשת לא מכוונת.

כל לינק מחזיק מידע, כגון מי הם החלקיקים בקצותיו, מה אורכו וכו'. ניתן לקבל ולהזין מידע זה בעזרת פרוצדורות הקיימות בשפה ופועלות על לינקים.

בשלב חישוב פוטנציאל לנארד- ג'ונס נעזרנו בלינקים. על מנת שנוכל ליצור קשר בין כל זוג של חלקיקים, הוצאנו קשתות מכוונות מכל חלקיק ואליו, בעת כניסתו למשחק.

הקשתות איפשרו לנו לחשב מרחקים בין החלקיקים ולהשתמש בהם כמשתנה בחישוב פוטנציאל לנארד-ג'ונס.

כמו כן, בעזרת הקשתות, מטרתנו הייתה להמחיש באופן ויזואלי קשרים בין זוגות חלקיקים הנמצאים במרחק שאותו הגדרנו מראש ולהעביר למסך את ערך הפוטנציאל באותו קשר.

שאפנו להציג על המסך אך ורק קשרים בין חלקיקים שערך הפוטנציאל שלהם שונה מאפס.

מכיוון שערך הפוטנציאל תלוי במרחק בין הזוג שבינו מתקיים הקשר, רצינו שעם התרחקות החלקיקים מעבר למרחק מסוים, ייעלם הלינק ביניהם מן המסך.

תיאור הבדיקה	תוצאות הבדיקה	תיקונים שנדרשו
הכנסת משתתפים למשחק ובדיקה האם אכן נוצרו ביניהם לינקים.	לאחר הכנסת משתתפים נוצרו לינקים אל המשתתפים הסובבים אותם ומהסובבים אותם אליהם.	לא נדרשו תיקונים.
הזזת החלקיקים השונים ובדיקה האם הלינק ביניהם נעלם ברגע שהם מתרחקים אחד מהשני, מעבר למרחק שנקבע מראש על ידינו. למטרות הבדיקה בלבד, הגדרנו בקוד בדיקה, כך שבעת התרחקות החלקיקים מעבר לאותו מרחק שהוגדר מראש, יודפס למסך המרחק בין אותם חלקיקים.	הלינקים בין החלקיקים נעלמו בעת התרחקות. הצגת המרחקים הראתה שאכן הלינקים נעלמים רק כאשר המרחק גדול מהמרחק אותו הגדרנו מראש.	לא נדרשו תיקונים.
על מנת לבדוק שהפרוצדורה המחשבת את ערך הפוטנציאל בין שני חלקיקים, בדקנו מספר תרחישים של התקרבות והתרחקות של זוגות חלקיקים. רצינו לוודא שהתוצאות תואמות את גרף לנארד-ג'ונס.	במעקב משותף עם הלקוחה, היה קשה להתרשם האם אכן ערכי הפוטנציאל תואמים את הערכים הנדרשים, כפי שהם בגרף לנארד-ג'ונס, בהתאמה למדד המרחק בין כל זוג חלקיקים.	מפורטים בשלב החמישי.

<u>שלב רביעי – שלב חישוב הזוויות:</u>

<u>הקדמה:</u> שלב חישוב הזוויות כלל את השלב המקדים, שבו הזדקקנו להגדיר תחילה לכל חלקיק את השכנים שלו. לכן, הוספנו לכל חלקיק מבנה נתונים מסוג רשימה והרחבנו את הפרוצדורה מהשלב הקודם.
בשלב הקודם, הפרוצדורה אותה מימשנו, שימשה אך ורק לגילוי או הסתרת הלינקים בהתאם למרחק בין החלקיקים.
בהרחבה אשר מומשה בשלב חישוב הזויות, עדכנו את מבנה הנתונים בהתאם למספר השכנים. אם היו יותר מארבעה שכנים אשר עמדו בהגדרות המרחק, הגבלנו את הרשימה לארבעה בלבד.
לאחר מכן, הגדרנו שתי פרוצדורות הממשות את חישוב הזוויות שבין החלקיקים אשר נמצאים במבנה הנתונים.

<u>הערה:</u> עקב שינוי בדרישות הלקוחה, הוצא שלב זה מן הפרויקט.

תיאור הבדיקה	תוצאות הבדיקה	תיקונים שנדרשו
על מנת לבדוק שאכן לכל משתתף מוגדר מספר מדויק של שכנים, בהתאם לגבולות המרחק, הוספנו מוניטור שמציג את מספר השכנים של המשתתף. הוספנו משתתפים רבים ובדקנו ש"בחירת" השכנים אכן נכונה בהתאם לגבולות המרחק, בדומה לבדיקות בסעיף הקודם. הדפסנו למסך את זהות השכנים, על מנת לוודא שאכן המשתתפים שהוגדרו כשכנים, הם באמת שכנים של אותו משתתף.	לכל משתתף הוגדר והוצג מספר השכנים הנכון. זהות השכנים הייתה מדויקת. כאשר היו למשתתף יותר מארבעה שכנים באותו רדיוס, נכנסו למבנה הנתונים רק ארבעה שכנים.	לא נדרשו תיקונים.
לכל משתתף הוספנו מוניטור המציג את הזוויות בין כל זוג משכניו, עם כיוון השעון. לפי חלוקת המיקום של השכנים מסביב לחלקיק המשתתף, הערכנו האם חישוב הזוויות נכון.	ערכי הזוויות שהוצגו על מסך משתתף, כאשר סבבו אותו שלושה חלקיקים, תאמו את ציפיותינו. יחד עם זאת, נתקלנו בשני "באגים": 1. כאשר סבבו את המשתתף ארבעה חלקיקים, לא הוצגו זוויות כלל.	<u>תיקון לבאג הראשון</u>: התגלתה התנייה לא נכונה בקוד הבודק את מספר השכנים של המשתתף ובהתאם לכך קורא לחישוב הזוויות. ההתנייה בקוד תוקנה וכעת הוצגו הזוויות הנכונות גם לסביבה של ארבעה שכנים.

	2. באחת מן הבדיקות הרבות אותן ביצענו לחישוב הזוויות, התקבלה שגיאת ריצה, אשר קטעה את המשך פעולת הסימולציה.	<u>תיקון לבאג השני</u>: גילינו שבעת הגדרת השכנים לכל משתתף, נוצרת בעיה כאשר אחד השכנים נמצא עם המשתתף עצמו על אותה משבצת. במקרה כזה, לא ניתן לחשב את זווית הלינק לכיוונו של אותו שכן ולכן מתרחשת שגיאת ריצה. לכן, שינינו את הגדרת השכנים, כך שמבנה הנתונים של כל משתתף יכיל שכנים שאינם נמצאים על אותו משבצת עם המשתתף עצמו. כלומר שהמרחק אליהם גדול מאפס.

<u>שלב חמישי – תיקון אופן החישוב של פוטנציאל לנארד-ג'ונס:</u>

<u>הקדמה:</u> שלב זה נועד לתיקון ושינוי השלב השלישי.
כאמור, בשלב השלישי, התקשינו להסיק האם אכן ערכי הפוטנציאל שהתקבלו על המסך על גבי הלינקים, אכן תואמים לערכים אשר אמורים להופיע כתלות במרחק בין החלקיקים.
על מנת להבין טוב יותר את המתרחש, התבקשנו ע"י הלקוחה להוסיף אלמנטים חדשים למסך ממשק השרת.
האלמנטים החדשים אותם התבקשנו להוסיף הם כפתורים להוספת משתתפי דמה, "רובוטים", אשר יתפקדו כמשתתפים חדשים המיוצגים ע"י חלקיקים.
כמו כן, התבקשנו להוסיף למנהל הסימולציה אפשרות לגרור את כל החלקיקים, הן רובוטים והן משתתפים רגילים, דרך מסך ממשק השרת.
בנוסף, היה עלינו לאפשר בחירת ערך לשני פרמטרים בנוסחת לנארד-ג'ונס וכן את גודלו של כל חלקיק, ע"י סליידרים אשר מאפשרים בחירה בין טווח מסוים של ערכים. הסליידרים נדרשו לנו על מנת שניתן יהיה להעריך מהם הפרמטרים הדרושים לייצוג נכון של פוטנציאל לנארד-ג'ונס, כתלות במרחק.

תיאור הבדיקה	תוצאות הבדיקה	תיקונים שנדרשו
בדקנו את תגובת הסליידרים ע"י שינוי הבחירה של הערכים, מספר פעמים. בדקנו שאכן ערכי הפרמטרים לנוסחת לנארד-	סליידר גודל החלקיק אכן שינה את הגודל של החלקיק המצטרף לסימולציה. גם סליידרי הפרמטרים שינו את הערכים המיועדים	לא נדרשו תיקונים.

ג'ונס משתנים, ע"י הדפסת הערכים עצמם למסך.	לחישוב פוטנציאל לנאד-ג'ונס.	
בדקנו את כפתור הוספת הרובוטים ע"י לחיצה עליו. כמו כן, אימתנו שאכן מתקיימת אינטראקציה בין הרובוטים לחלקיקי המשתתפים. כלומר שנוצרים לינקים ביניהם ומתעדכן ערך חישוב פוטנציאל לנארד-ג'ונס.	בכל שלב בבדיקה, התווספו רובוטים למשחק, בהתאם לערך הנבחר בסליידר.	לא נדרשו תיקונים.
בדקנו שאכן ניתן לגרור את כל החלקיקים, הן רובוטים והן משתתפים רגילים, ע"י לחיצה על כפתור גרירה תחילה ולאחר מכן לחיצה על החלקיק עצמו ומשיכתו לכיוון הרצוי. כמו כן, נבדק שאכן הערכים המתאימים הן לחלקיקים עצמם והן לאינטראקציה שבין החלקיקים, מתעדכנים תוך כדי ההזזה.	התאפשרה גרירת כל החלקיקים לאחר לחיצה על כפתור הגרירה. הערכים המתאימים לחלקיקים ולאינטראקציה ביניהם התעדכנו רק לאחר גרירת החלקיק למיקום שונה ולא במהלך הגרירה עצמה.	שינינו את אופן עדכון הנתונים, כך שיתבצע עדכון תוך כדי הגרירה עצמה.

<u>שלב שישי – התנגשויות:</u>

<u>הקדמה:</u> שלב זה התווסף לפרויקט, כחלק משינוי דרישות הלקוחה והחליף את שלב שינוי מצב הצבירה, אשר היה מתוכנן להתבצע.
בשלב זה התבקשנו לאפשר התנגשויות בין החלקיקים, באותו האופן בו מתאפשרות התנגשויות בספריית המודלים של NetLogo בסימולציה "Connected Chemistry – Temperature and Pressure".
במסך ממשק השרת הוספנו אפשרות לבחירה האם לאפשר התנגשויות בין החלקיקים במהלך הסימולציה.

תיאור הבדיקה	תוצאות הבדיקה	תיקונים שנדרשו
בתחילת ההפעלה, איפשרנו התנגשויות בין החלקיקים ובדקנו שאכן החלקיקים מתנגשים ביניהם בעת ההתקרבות אחד לשני.	החלקיקים אכן התנגשו ביניהם, אך הבחנו בשני תרחישים, אותם החלטנו לתקן: <u>תרחיש ראשון</u> – החלקיקים מתנגשים, אך ורק כאשר הם נמצאים ממש "אחד על השני" ולא אחד בקרבת השני. <u>תרחיש שני</u> – בהתאם לאופן בו ממומשות ההתנגשויות בסימולציה בה נעזרנו, חלקיק לא יכול להתנגש פעמיים ברצף עם אותו חלקיק. הגדרה זו נועדה למנוע מצב בו שני חלקיקים מתנגשים שוב ושוב, ללא היכולת להתקדם.	<u>טיפול בתרחיש הראשון</u>: שינינו את תנאי ההתנגשות, כך שחלקיקים יתנגשו ביניהם, כאשר קיים מרחק מסוים ביניהם, אותו הגדרנו מראש. כעת החלקיקים התנגשו, כאשר היו סמוכים אחד לשני ונוצר מגע ראשוני ביניהם. <u>טיפול בתרחיש השני</u>: בהתאם לבקשת הלקוחה, הוספנו אפשרות בחירה נוספת במסך ממשק השרת, כך שניתן לבחור בין שלוש אפשרויות – "ללא התנגשויות", "עם התנגשויות ללא הגבלה", או "עם התנגשויות באופן מוגבל". לאחר הוספת האפשרות החדשה – "התנגשויות ללא הגבלה", החלקיקים התנגשו אחד בשני בצורה חופשית.

מדריך למתכנת

<u>משתנים גלובליים:</u>

Tsize – גודל ה- turtle המייצג משתתף או רובוט. נקבע ע"י סליידר init-turtle-size בממשק השרת.

<u>Breeds:</u>

Students – מייצג את המשתתפים האנושיים אשר נוטלים חלק בסימולציה.

<u>משתני student:</u>

- user-id – מספר מזהה ייחודי לסטודנט.
- speed-n – המהירות הרגעית של החלקיק המייצג את הסטודנט.
- mass – המסה של החלקיק המייצג את הסטודנט.
  נקבעת ע"י סליידר Pmass בממשק השרת.
- last-collision – זהות החלקיק איתו התנגש חלקיק הסטודנט בהתנגשות האחרונה.
- mark – משתנה הקובע האם לסמן את החלקיק ב"הילה" או לא.
  נקבע ע"י בוחר mark בממשק הלקוח.
- neighbors-amount – כמות השכנים המקיפים את החלקיק ברדיוס קבוע מראש.
- in-radius-list – זהות השכנים המקיפים את החלקיק ברדיוס קבוע מראש.
- kinetic-energy – האנרגיה הקינטית של החלקיק המייצג את הסטודנט.
  נקבעת בהתאם למסה ומהירותו הרגעית.
- potential-energy – האנרגיה הפוטנציאלית של החלקיק המייצג את הסטודנט. נקבעת בהתאם לערכי פוטנציאל לנארד-ג'ונס עם שכניו.
- last-move – הפעם האחרונה בה ביצע החלקיק צעד.
  נמדד בשניות לפי התקדמות ה-timer של הסימולציה.
- birth-time – זמן היצירה של החלקיק.
- total-distance – המרחק המצטבר שעבר החלקיק מרגע כניסתו לסימולציה או לאחר איפוס הסימולציה.
- total-speed – המהירות הכללית של החלקיק מרגע כניסתו לסימולציה או לאחר איפוס הסימולציה.

Robots – מייצג את משתתפי הדמה אשר לוקחים חלק בסימולציה.

<u>משתני robot:</u>

- user-id – מספר מזהה ייחודי לרובוט.
- speed-n – המהירות הרגעית של החלקיק המייצג את הרובוט.
- mass – המסה של החלקיק המייצג את הרובוט.
  נקבעת ע"י סליידר Pmass בממשק השרת.
- last-collision – החלקיק איתו התנגש חלקיק הרובוט בהתנגשות האחרונה.
- neighbors-amount – כמות השכנים המקיפים את החלקיק ברדיוס קבוע מראש.
- in-radius-list – זהות השכנים המקיפים את הרובוט ברדיוס קבוע מראש.
- kinetic-energy – האנרגיה הקינטית של החלקיק המייצג את הרובוט.
  נקבעת בהתאם למסה ומהירותו הרגעית.
- potential-energy – האנרגיה הפוטנציאלית של החלקיק המייצג את הרובוט. נקבעת בהתאם לערכי פוטנציאל לנארד-ג'ונס עם שכניו.
- last-move – הפעם האחרונה בה ביצע החלקיק צעד.
  נמדד בשניות לפי התקדמות ה-timer של הסימולציה.

<u>Procedures and Reporters:</u>

<u>פרוצדורות צד שרת:</u>

שם הפרוצדורה	פרוצדורות נקראות	פרוצדורות קוראות	תיאור
setup	send-info-to-client	נקראת ע"י כפתור setup.	מאתחלת את כל עולם הסימולציה טרם הפעלתה. מנקה את כל המשתתפים, אם היו לפני. מנקה את המסך ומאתחלת את נתוני המשתתפים – רובוטים וסטודנטים.
go	send-info-to-client ; check-for-collision ; listen-to-clients	נקראת ע"י כפתור go.	זוהי הפרוצדורה המנהלת את הסימולציה. מריצה את הסימולציה עצמה, שולחת הודעות למשתתפים, מקבלת הודעות מהמשתתפים ומפקחת על התנגשויות בין

			חלקיקים.
restart	reset-vars ; execute-change-turtle ; choose-participatory-molecules ; send-info-to-client	נקראת ע"י כפתור Restart.	מאפסת את הסימולציה, אך לא מנקה את המשתתפים. כלומר, משאירה את המשתתפים, אך ממקמת אותם במקומות חדשים ומאתחלת את המשתנים שלהם.
enter-students	listen-to-clients ; choose-participatory-molecules ; send-info-to-client	נקראת ע"י כפתור enter-participants.	מאפשרת הוספת משתתפים אנושיים לסימולציה.
enter-robots	send-info-to-client	נקראת ע"י כפתור Enter Robots.	מאפשרת הוספת משתתפי דמה לסימולציה.
mouse-drag	send-info-to-client ; check-for-collision ; tag-links	נקראת ע"י כפתור Drag The Turtle.	מאפשרת גרירת חלקיקי המשתתפים או הרובוטים ובמקביל מעדכנת את ערכי לנארד ג'ונס המתאימים לכל זוג ובודקת מצבי התנגשויות.

<u>פרוצדורות HubNet:</u>

שם הפרוצדורה	פרוצדורות נקראות	פרוצדורות קוראות	תיאור
start-up			מאתחלת את מערכת ה-HubNet.
listen-to-clients	create-new-student ; remove-student ; exe-mark ; execute-command	go ; enter-students	בודקת האם מגיעות הודעות חדשות מהמשתתפים ומעדכנת את הסימולציה בהתאם לכך.

send-info-to-client	tag-links ; compute-global-speed ; compute-potential-energy ; select-in-radius-neighbors	setup ; go ; restart ; enter-students ; enter-robots ; mouse-drag ; execute-command ; set-identity	שולחת הודעות לממשק הלקוח המחוות על מצב הסימולציה ומשתני המשתתף.

<u>פרוצדורות צד לקוח – פעולות על חלקיקים:</u>

שם הפרוצדורה	פרוצדורות נקראות	פרוצדורות קוראות	תיאור
create-new-student	set-identity	listen-to-clients	יוצרת "agent" בדמות student.
set-identity	send-info-to-client ; setup-student-vars	create-new-student	מסייעת ל--create-new student ביצירת agent חדש.
setup-student-vars		restart ; enter-students ; set-identity	מאתחלת משתני סטודנט.
execute-change-turtle		Restart	מחזירה מחדש את המשתתף לסימולציה.
exe-mark		listen-to-clients	מסמנת את ה-turtle המשתתף במעין "הילה".
remove – student		listen-to-clients	"הורגת" את ה-turtle.

מאפסת את משתני המשתתף.	Restart	select-in-radius-neighbors	reset-vars
מבצעת את הפעולה המתבקשת ע"י המשתתף (סיבוב או תנועה קדימה) ומעדכנת את הנתונים בהתאם.	listen-to-clients	forward-handler ; send-info-to-client	execute-command
מעדכנת את הנתונים בהתאם לפעולה שהתבצעה.	execute-command	compute-global-speed ; imm-speed ; imm-kinetic-energy ; compute-potential-energy	forward-handler
בוחרת את סביבת השכנים הקרובה של המשתתף.	send-info-to-client ; reset-vars ; compute-neighbors-angles	LJcompute	select-in-radius-neighbors
מעדכנת את הלינקים עם ערכי לנארד-ג'ונס המתאימים.	mouse-drag ; send-info-to-client		tag-links
בודקת האם מתקיימים התנאים להתנגשות. אם כן, קוראת לפרוצדורה המטפלת בהתנגשות.	go ; mouse-drag	collide-with	check-for-collision
מעדכנת את נתוני החלקיקים המתנגשים – מהירות, אנרגיה וכו'.	check-for-collision		collide-with [other-turtle]

פרוצדורות צד לקוח – פעולות חישוביות:

שם	סוג	תיאור
imm-kinetic-energy	Reporter	מחשב ומחזיר כפלט את האנרגיה הקינטית של המשתתף, בהתאם למהירותו הרגעית והמסה שלו.
compute-global-speed	Reporter	מחשב ומחזיר כפלט את המהירות הכללית של המשתתף, לפי המרחק המצטבר שעבר והזמן שעבר מרגע כניסתו לסימולציה.
compute-potential-energy	Procedure	מחשבת אנרגיה פוטנציאלית של המשתתף, ע"י סיכום של מחצית כל ערכי פוטנציאל לנארד ג'ונס עם שכניו.
imm-speed [x1 y1 x2 y2 before after]	Reporter	מקבל כפרמטר קואורדינטות מיקום קודם ונוכחי של המשתתף וכן שני ערכי זמן – האחד הוא הזמן בו המשתתף הגיע למיקום הקודם והשני הוא הזמן בו המשתתף הגיע למיקום הנוכחי. מחשב ומחזיר כפלט את המהירות הרגעית של המשתתף.
LJcompute [rad]	Reporter	מקבל כפרמטר את rad שהוא המרחק בין זוג חלקיקים כלשהו. אם המרחק אינו שווה לאפס או אינו גדול מפעמיים וחצי ערך Ljsigma, מחשב את ערך פוטנציאל לנארד-ג'ונס, לפי הנוסחה המתאימה ומחזיר אותו כפלט.
compute-neighbors-angles	Reporter	בוחר את השכנים הקרובים למשתתף וקורא לחישוב הזוויות ביניהם. הערה: לא נכלל בפרוייקט לבסוף.
compute-angles[inputNum]	Procedure	מחשבת את הזוויות שבין שכני המשתתף. מספר השכנים נקבע לפי הפרמטר inputNum. הערה: לא נכללה בפרוייקט לבסוף.

הצעות להמשך הפיתוח:

1. המערכת הקיימת כרגע פולטת למסך הלקוח נתונים מספריים בלבד.
   על מנת להמחיש למשתמש באופן ברור את משמעות הנתונים יש להוסיף לממשק הלקוח אמצעים אשר יחוו האם הנתונים טובים או לא טובים לחלקיק ואת משמעותם.
   עפ"י חזון מחקר, הפיתוח יכול וצריך להתקדם לכיוון הוספת אינדיקציות מוזיקליות להמחשת מיקום אופטימלי וכן לפיתוח אפשרות שליטה על חלקיקי הקליינט בעזרת מכשירי Joystick, אשר מאפשרים משוב למשתמש (force feedback).
2. יש להמשיך את הפיתוח אל השלב השלישי אשר תוכנן בראשית הדרך.
   קיים הצורך לממש את מעברי מצב הצבירה למצב נוזל וגז.

ביבליוגרפיה

פרופ' בן-דור, ל ואחרים. *כימיה אי אורגנית*. יחידות 1,2. תל אביב: האוניברסיטה הפתוחה.

קירש,י ואחרים. (1997). *אטומים, מולקולות ותכונות החומר*. יחידות 2-4,6. תל אביב: האוניברסיטה הפתוחה.

Ares, N. Stroup ,W. M. & Schademan, A. R.(2009) *'The Power of Mediating Artifacts in Group-Level Development of Mathematical Discourses'*, Cognition and Instruction, 27:1, 1 — 24.

Colella, V.(2000) *'Participatory Simulations: Building Collaborative Understanding Through Immersive Dynamic Modeling'*, THE JOURNAL OF THE LEARNING SCIENCES, *9*(4), 471–500.

Frenkel, D & Smit, B. (2001) *'Understanding Molecular Simulation:* From Algorithms to Applications*',* San Diego: Academic Press.