Praca Dyplomowa Inżynierska

Adrian Rostek 205860

Wykorzystanie technologii webowych i języka Python do stworzenia aplikacji edukacyjnej z mechaniki kwantowej

Utilizing web technologies and Python language to create quantum physics educational application

Praca dyplomowa na kierunku: Informatyka

> Praca wykonana pod kierunkiem dr Andrzeja Zembrzuskiego Instytut Informatyki Technicznej Katedra Sztucznej Inteligencji

Warszawa, rok 2024



Wydział Zastosowań Informatyki i Matematyki

Oświadczenie Promotora pracy

	ygotowana pod moim kierunkiem i stwierdzam, j pracy w postępowaniu o nadanie tytułu zawo-
Data	Podpis promotora
Oświadczen	ie autora pracy
szywego oświadczenia, oświadczam, że nini mnie samodzielnie i nie zawiera treści uzys	tym odpowiedzialności karnej za złożenie fał- ejsza praca dyplomowa została napisana przeze kanych w sposób niezgodny z obowiązującymi z dnia 4 lutego 1994 r. o prawie autorskim i pra- późn. zm.)
Oświadczam, że przedstawiona praca nie by zanej z nadaniem dyplomu lub uzyskaniem (yła wcześniej podstawą żadnej procedury zwią- tytułu zawodowego.
	t identyczna z załączoną wersją elektroniczną. owa poddana zostanie procedurze antyplagiato-
Data	Podpis autora pracy



Spis treści

1	Wst	ęр	9
	1.1	Cel i motywacja pracy	Ģ
	1.2	Tematyka i struktura pracy	10
2	Wyl	korzystane technologie	11
	2.1	Popularne technologie webowe - HTML, CSS i TypeScript	11
	2.2	Biblioteki Chart.js i MathJax	11
	2.3	Język Python	11
	2.4	Framework Tauri	11
3	Pod	stawy teorytyczne	12
	3.1	Zagadnienia matematyki wyższej	12
	3.2	Falowa natura materii	14
	3.3	Równanie Schrödingera	14
	3.4	Znajdowanie równania funkcji falowej	15
4	Bud	lowa i struktura aplikacji	16
	4.1	Struktura aplikacji	16
	4.2	Interfejs	16
	4.3	Typescript i manipulacja DOM	16
	4.4	Obliczenia fizyczne w Pythonie	16
	4.5	Interfejs pomiędzy TypeScriptem i Pythonem	16
	4.6	Wdrożenie i dystrybucja aplikacji	16
	4.7	Problemy, ograniczenia i możliwości rozwoju	16
5	Inte	erfejs aplikacji	17
	5.1	Ekran główny	17
	5.2	Interaktywna wizualizacja	17
	5 3	Transkryncia	17

6	Podsumowanie i wnioski	18
7	Bibliografia	19

1 Wstęp

Stworzenie teorii mechaniki kwantowej w 1925 r.[przypis?] okazało się podstawą dzisiejszej cywilizacji[przypis]. Zawdzięczamy jej m.in. tranzystory tworzące komputery, mikroskopy tunelowe o niebywałej precyzji oraz reaktory jądrowe, bez których ciężko wobrazić sobie dzisiejszą energetykę[przypis]. Mimo to jest to bardzo nieintuicyjny i przez większośc ludzi niezrozumiały dział fizyki[przypis]. Na temat ten napisane zostały liczne publikacje[przypis], jednak profesjonalny język i matematyka wyższa mogą sprawić dużo trudności w zrozumieniu nawet podstawowych konceptów tej teorii.

1.1 Cel i motywacja pracy

Celem pracy jest stworzenie aplikacji, która ma ułatwić naukę zagadnień z zakresu mechaniki kwantowej. Zagadnienia przedstawiane są w interaktywny celem podtrzymania uwagi i zainteresowania tym nietrywialnym tematem. Osiągnięte to zostało poprzez wykorzystanie licznych symulacji, na których efekt końcowy bezpośredni wpływ ma użytkownik, jednocześnie stosując samouczek, który te efekty odpowiednio tłumaczy.

Osobiście temat mechaniki kwantowej uważam za niezwykle ciekawy, więc napisanie tej pracy motywowane jest chęcią poszerzenia swojej wiedzy w jakotym obszarze, jak i zastosowaniu nabytej wiedzy informatycznej w stworzeniu praktycznego narzędzia. Za interesujące również uważam symulację funkcji falowej w przeciwieństwie do przypatrywania się statycznym jej wykresom na papierze czy w plikach pdf. Aplikacja kierowana jest do osób chcących nauczyć się wstępnych zagadnień mechaniki kwantowej, jednak bez konieczności sięgania po profesjonalną literaturę. Do pełnego zrozumienia wszystkich zagadnień potrzebna jest znajomość matematyki wyższej, jednak nawet bez tej wiedzy użytkownik może wynieść z aplikacji dużo nowych informacji. Może ona być więc użyteczna zarówno dla osób nie będących ściśle związanych z naukami matematycznymi i fizycznymi, jak i studentów kierunków fizycznych?.

1.2 Tematyka i struktura pracy

Aplikacja przytacza kontekst historyczny dziedziny fizyki jaką jest mechanika kwantowa jak i tłumaczy falowo korpuskularną naturę cząstek. Główna częśc jednak skupia się na typowych rozwiązaniach równania Schrödingera niezależnego od czasu, a dokładniej:

- Cząstki swobodnej
- Nieskończonej studni potencjału
- Skończonej studni potencjału
- Progu potencjału
- Bariery potencjału

Wytłumaczone są też zjawiska tunelowe i skwantowanych stanów energetycznych jako konsekwencja dotychczas przyswojonych zagadnień. Jest to często stosowana kolejność wprowadzania do tych zagadnień[przypis?], ponieważ każdy kolejny przypadek bazuje na poprzednim, wprowadzając jednak stopniowo coraz to nowsze elementy.

W rozdziale drugim opisane zostały zastosowane technologie, charakterystyka ich działania oraz wytłumaczone zostało czym motywowany był wybór akurat ich do stworzenia aplikacji.

W rozdziale trzecim szerzej wyjaśniłem(forma osobowa czy utrzymać bezosobową narrację?) dokładny zakres zagadnień zawartych w aplikacji oraz uzasadniłem powód upraszczania niektórych z nich i poświęcanie większej uwagi na pozostałe.

Rozdział czwarty skupia się na technicznych aspektach budowy aplikacji, omawia szczegóły implementacji wymaganych rozwiązań i problemy z tym związane. Omówione również zostały ograniczenia zastosowanych technologii, jak i otwartość aplikacji na rozwój.

W rozdziale piątym zaprezentowane są zrzuty ekranu z działania apliakcji, wytłumaczona zostaje budowa i działanie interfejsu oraz jak spełnione zostało wstępne wymaganie aplikacji, czyli ułatwianie nauki.

2 Wykorzystane technologie

- 2.1 Popularne technologie webowe HTML, CSS i Type-Script
- 2.2 Biblioteki Chart.js i MathJax
- 2.3 Język Python
- 2.4 Framework Tauri

Była opcja WebAssembly ale jest niedorpacowane(napisać szczegóły) + vite + npm

3 Podstawy teorytyczne

3.1 Zagadnienia matematyki wyższej

Niewątpliwie matematykę, a szczególnie rachunek różniczkowy, można nazwać językiem fizyki. Do opisu zawartych w pracy zagadnień fizycznych, wymagana jest pewna znajomość zadagnień matematyki wyższej.

Liczby zespolone są nadzbiorem liczb rzeczywistych, wzbogacone o jednostkę urojoną *i* definiowaną jako:

$$i^2 = -1$$

Dowolną liczbę zespoloną możemy więc zapisać w postaci algebraicznej, będącej sumą liczb rzeczywistej i urojonej tj. takiej będącej rzeczywistą wielokrotnością jednostki urojonej:

$$z = a + bi$$

gdzie
$$z \in \mathbb{C}$$
, $a \in \mathbb{R}$, $b \in \mathbb{R}$

Do graficznego opisu liczby zespolonej poza osią rzeczywistą, potrzebna jest dodatkowa, pionowa oś urojona. Liczba zespolona będzie punktem o współrzędnych a i b w kartezjańskim układzie współrzędnym. Moduł definiowany jako odległość liczby z od liczby 0, będącej środkiem układu współrzędnych, jest więc definiowana poprzez zastosowanie twierdzenia Pitagorasa:

$$|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$$

gdzie:
$$z = a + bi$$

 $z \in \mathbb{C}, a \in \mathbb{R}, b \in \mathbb{R}$

Inną postacią liczby zespolonej jest postać wykładnicza, przedstawiana jako:

$$z = |z|e^{i\phi}$$

gdzie: $z \in \mathbb{C}$

e – podstawa logarytmu naturalnego

i – jednostka urojona

 ϕ – kąt pomiędzy osią części rzeczywistej, a ramieniem poprowadzonym ze środka układu współrzędnych do liczby z

Szczegóły funkcji falowej ψ wytłumaczone są w dalszej części pracy, jednak na szczególną uwagę zasługuje wartość kwadratu jej modułu, określająca gęstość prawdopobieństwa znalezienia cząstki w danym położeniu. Oznacza to, że prawdopobieństwo znalezienia cząstki w obszarze $[x_1, x_2]$ będziemy wyznaczać jako:

$$P(X) = \int_{x_2}^{x_1} |\psi(x)|^2 dx$$

gdzie:

X – zdarzenie losowe, że cząstka znajduje się w obszarze

 x_1, x_2 – początek i koniec obszaru

Równanie różniczkowe to równanie funkcyjne zawierające pochodne nieznanej funkcji. Znajdowanie rozwiązań takich równań znacząco wykracza poza wiedzę wymaganą do zrozumienia omawianych zagadnień fizycznych, więc nie będzie temu przywiązywana szczególna uwaga. Wybrany zakres zagadnień wymaga jedynie zapamiętania rozwiązań dwóch rodzajów równań:

$$f(x)'' + f(x) = 0 \iff f(x) = A\cos x + B\sin x$$

 $f(x)'' + K^2 f(x) = 0 \iff f(x) = A\cos(Kx) + B\sin(Kx)$

gdzie:

f(x) i f(x)'' – funkcja i jej pochodna względem zmiennej x

 $K \in \mathbb{C}$

 $A \in \mathbb{R}, B \in \mathbb{R}$ – stałe wyznaczane z warunków początkowych albo brzegowych

Warto zaznaczyć, że pomimo tego że zagadnienia te są niezbędne do pełnego zrozumienia mechaniki kwantowej, to nie są wymagane do zdobycia pewnej teorytycznej wiedzy na jej temat, nawet jeśli mocno nieintuicyjnej.

3.2 Falowa natura materii

Wyjaśnione przez Alberta Einsteina zjawisko fotoelektryczne ukazało, że światło zachowuje się nie tylko jak fala, ale też jak cząstką. Nośnik światła przekazywał energię porcjami – kwantami przez co wprowadzone zostało pojęcie fotonu jako cząstki światła.

Jako konsekwencja tego odkrycia Louis de Broglie zapostulował, że cząstki materii, takie jak elektron, muszą podzielać falowe zachowanie fotonów. Korzystając z pracy Einsteina określił długość tych fal, zwanych falami materii, wzorem:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

gdzie:

λ – długość fali materii cząstki

h – stała Plancka

p – ped cząstki

Dzięki falom materii możemy wyjaśnić m.in. sposób rozchodzenia się elektronów np. przez siatkę dyfrakcyjną, co jest niemożliwe przy przyjęciu elektronów jako kul lub punktów w przestrzeni.

Dokładniejszego opisu tych fal dokonał Erwin Schrödinger proponując równanie funkcji falowej ψ o zespolonym zbiorze wartości.

3.3 Równanie Schrödingera

Funkcja falowa stanowi fundament zagadnień poruszanych w aplikacji. Wynika to z faktu, że jest ona niezbędna do opisu ruchu dowolnej cząstki. Erwin Schrödinger zawarł funkcje falową w równaniu nazwanym od jego nazwiska równaniem Schrödingera. Jeżeli skupimy się na odizolowanych układach fizycznych tj. takich, które nie oddziaływują z otoczeniem, rozwiązać należy równanie Schrödingera niezależne od czasu o postaci:

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

gdzie:

ħ − zredukowana stała Plancka

 $\psi(x)$ – fukcja falowa w położeniu x

E – energia całkowita ciała

V(x) – potencjał w położeniu x

m – masa ciała

Wartość funkcji falowej $\psi(x)$ nie posiada fizycznej interpretacji, do tego potrzebny jest kwadrat jej modułu, który określa gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w położeniu x.

3.4 Znajdowanie równania funkcji falowej

Warunki brzegowe:

- Skończona wartość ψ
- Ciągłość ψ
- Ciągłość pochodnej $\frac{d\psi}{dx}$ (Przy skończonych potencjałach)

4 Budowa i struktura aplikacji

4.1 Struktura aplikacji

domyślne ustawienie Tauri, zasoby, pliki html, css, typescript, python

4.2 Interfejs

html + css, BEM, struktura stron

4.3 Typescript i manipulacja DOM

4.4 Obliczenia fizyczne w Pythonie

complex, numpy i potencjalny sympy

4.5 Interfejs pomiędzy TypeScriptem i Pythonem

4.6 Wdrożenie i dystrybucja aplikacji

o budowie aplikacji, pakowanych zasobach, interpreterze pythona, platformach

4.7 Problemy, ograniczenia i możliwości rozwoju

- 5 Interfejs aplikacji
- 5.1 Ekran główny
- 5.2 Interaktywna wizualizacja
- 5.3 Transkrypcja

6 Podsumowanie i wnioski

7 Bibliografia

- [1] M.R. Wehre, H.A. Enge, J.A. Richards, *Wstep do fizyki atomowej*, Państwowe Wydawnictwo naukowe, Warszawa 1983
- [2] David Flanagan, JavaScript: The Definitive Guide. Master the World's Most-Used Programming Language. 7th Edition, O'Reilly Media, 2020

Wyrażam zgodę na udostępnienie mojej pracy w czytelniach Biblioteki SGGW w tym w Archiwum Prac Dyplomowych SGGW.
(czytelny podpis autora pracy)