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	ęp	9
	1.1	Cel i motywacja pracy	ç
	1.2	Tematyka i struktura pracy	Ģ
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	12
3	Pod	stawy teorytyczne	13
	3.1	Zagadnienia matematyki wyższej	13
	3.2	Falowa natura materii	15
	3.3	Równanie Schrödingera	15
	3.4	Znajdowanie równania funkcji falowej	16
4	Bud	lowa i struktura aplikacji	19
	4.1	Struktura aplikacji	19
	4.2	Interfejs	19
	4.3	Typescript i manipulacja DOM	19
	4.4	Obliczenia fizyczne w Pythonie	19
	4.5	Interfejs pomiędzy TypeScriptem i Pythonem	20
	4.6	Wdrożenie i dystrybucja aplikacji	20
	4.7	Problemy, ograniczenia i możliwości rozwoju	20
5	Inte	rfejs aplikacji	21
	5.1	Ekran główny	21
	5.2	Interaktywna wizualizacja	21
	5 3	Transkryncia	21

6	Podsumowanie i wnioski	22
7	Bibliografia	23

1 Wstęp

Stworzenie mechaniki kwantowej okazało się niezwykle istotne dla dzisiejszej cywilizacji. Zawdzięczamy jej m.in. tranzystory, mikroskopy tunelowe o niebywałej precyzji oraz reaktory jądrowe, bez których ciężko wyobrazić sobie dzisiejszą energetykę[?]. Mimo to jest to bardzo nieintuicyjny i przez większość ludzi niezrozumiały dział fizyki[?]. Na temat ten napisane zostały liczne publikacje[?], 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 sposób 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 tym 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 podstaw matematyki wyższej, jednak nawet bez tej wiedzy użytkownik może wynieść z aplikacji dużo nowych informacji. Może ona być więc użyteczna nie tylko dla studentów fizyki, ale też osób ciekawiących się tym tematem.

1.2 Tematyka i struktura pracy

Aplikacja przytacza kontekst historyczny dziedziny fizyki jaką jest mechanika kwantowa jak i opisuje korpuskularno-falową naturę cząstek. Główna część jednak skupia się na typowych rozwiązaniach równania Schrödingera niezależnego od czasu, a dokładniej dla:

- 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[?], 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 wyjaśniony został dokładny zakres zagadnień zawartych w aplikacji oraz uzasadniony został 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 aplikacji, 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

Python pomimo, że znacząco wolniejszy od wielu innych języków programowania [3], posiada bogatą kolekcję bibliotek do przetwarzania danych i obliczeń matematycznych m.in. NumPy, SciPy i SymPy. Biblioteki te najczęściej napisane w C lub Fortranie, są już z kolei znacznie szybsze od czystego Pythona[4]. Charakterystyczna jest też jego przejrzysta składnia, zawierająca dużo lukru składniowego[5].

Głównymi powodami, dla których zdecydowałem się na Pythona, jest właśnie dostępność bibliotek, a szczególnie SymPy oraz wbudowana obsługa liczb zespolonych. Co prawda liczby zespolone są dostępne za pośrednictwem biblioteki Math w TypeScript'cie[?], którego i tak używam w aplikacji, jednak przez składnie kod zajmuje znacznie więcej miejsca niż w Pythonie. SymPy z kolei nie został wykorzystany w żadnym miejscu w implementacji aplikacji, więc może się wydać nietypowym argumentem za wyborem języka. SymPy jest biblioteką umożliwiającą obliczenia w matematyce symbolicznej[?], co najważniejsze pozwala na znajdowanie analitycznych rozwiązań dla równań różniczkowych. W mojej opinii umożliwia to łatwiejszy rozwój aplikacji i wzbogacenie jej o bardziej zaawansowane przypadki ruchu cząstki w przestrzeni.

Dostępność Matplotlib i podobnych bibliotek szkicujących umożliwia rysowanie wykresów do wizualizacji danych, wymagając przy tym bardzo małej ilości kodu, co może okazać się niezwykle przydatne przy sprawdzaniu poprawności implementacji obliczeń bardziej złożonych wzorów matematycznych. Przy pisaniu pracy niejednokrotnie z takiej możliwości skorzystałem, na co najczęściej potrzebne były 3-4 linie kodu.

2.4 Framework Tauri

Była opcja WebAssembly ale jest niedopracowane(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 zagadnień matematyki wyższej.

Liczby zespolone są nadzbiorem liczb rzeczywistych, wzbogaconym o jednostkę urojoną i [?]definiowaną jako:

$$i^2 = -1$$
.

Dowolną liczbę zespoloną możemy więc zapisać w postaci algebraicznej, będącej sumą części rzeczywistej i urojonej, tj. 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 może być przedstawiona jako punkt o współrzędnych a i b w kartezjańskim układzie współrzędnym. Moduł liczby z definiowany jako odległość tego punktu od środka układu współrzędnych, można więc obliczyć stosując 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 prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w danym położeniu. Oznacza to, że prawdopodobieństwo 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 do tego przywiązywana szczególna uwaga. Wybrany zakres zagadnień wymaga jedynie zapamiętania rozwiązania jednego rodzaju równań:

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

gdzie:

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

 $K \in \mathbb{C}$,

 $A \in \mathbb{C}, B \in \mathbb{C}$ – 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 teoretycznej 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 – pęd 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

Określenie położenia cząstki wymaga od nas rozwiązania równań Schrödingera, w których będziemy mieli określoną funkcję V(x), jednak w celu ułatwienia obliczeń będziemy dzielić zagadnienia na obszary o stałym potencjale. W ten sposób będziemy mieli do rozwiązania kilka równań różniczkowych, z których otrzymamy odpowiednie rozwiązania ogólne. Rozwiązania szczegółowe tych równań spełniać muszą warunki początkowe, mogące wynikać m.in. z normowania gęstości prawdopodobieństwa. Poza warunkami początkowymi, konieczne będzie też spełnienie warunków brzegowych tj. ciągłości $\psi(x)$ oraz, w zagadnieniach bez nieskończonego potencjału, ciągłości jej pochodnej. Ważne jest również, że tylko skończone wartości $\psi(x)$ mają fizyczny sens.

Zanim jednak zajmiemy się bardziej złożonymi przykładami, sprawdźmy jaką postać przyjmuje ψ dla cząstki swobodnej tj. takiej o zerowej energii potencjalnej. Otrzymujemy równanie

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0,$$

gdzie

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}.$$

Rozwiązanie ogólne ma więc postać

$$\psi(x) = Ae^{ikx},$$

gdzie stałą A można wyznaczyć jeśli chciałoby się znormalizować gęstość prawdopodobieństwa $|\psi|^2$, na określonym obszarze. Widać równocześnie, że gęstość prawdopodobieństwa jest jednolita w całym takim obszarze.

Zaczynając od przypadku cząstki poruszającej się w nieskończonej studni potencjału o szerokości a, dzielimy zagadnienie na trzy obszary. Otrzymujemy obszar I, gdzie $x \in (-\infty, -\frac{a}{2}>$, obszar II, gdzie $x \in (-\infty, -\frac{a}{2}>$, obszar II, gdzie $x \in (-\frac{a}{2}, \frac{a}{2})$ oraz obszar III, gdzie $x \in (-\frac{a}{2}, +\infty)$. W obszarach I i III potencjał jest nieskończony, więc jeśli $\psi \neq 0$ to $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ musi być nieskończone, jednak

nie ma to fizycznego sensu, więc ψ musi być równe 0 w tych obszarach. Dla obszaru II otrzymujemy równanie

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0,$$

gdzie:

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}.$$

Rozwiązanie ogólne przyjmuje więc postać

$$\psi = A\sin(kx) + B\cos(kx)$$
. Czemu inne niż dla cząstki swobodnej?

Ciągłość ψ pomiędzy obszarami jest możliwa tylko jeśli funkcja ta będzie równa 0 na granicach studni, co jest możliwe tylko jeśli A=0 lub B=0, a szerokość studni a jest całkowitą wielokrotnością długości tej fali. Zależność tę można zapisać jako

$$ka = n\pi$$
, gdzie $n \in \{1, 2, 3...\}$.

Rozwiązaniem jest więc

$$\psi = Asin(kx) \text{ dla } n \in \{2,4,6...\},$$

 $\psi = Bcos(kx) \text{ dla } n \in \{1,3,5...\},$

gdzie A i B można wyznaczyć, w celu znormalizowania gęstości prawdopodobieństwa $|\psi|^2$, jako

$$A = B = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

W przypadku studni skończonej postępujemy bardzo podobnie dzieląc zagadnienie na trzy obszary, jednak przyjmujemy, że potencjał wynosi 0 dla obszarów I i III oraz $-V_0$ dla obszaru II. Jako W oznaczymy energię wiązania tj. dodatnią wartość wymaganą do uwolnienia cząstki z studni. W obszarze II równanie Schrödingera przyjmie tą samą postać, jednak tym razem

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - W)},$$

dzięki czemu otrzymamy to samo, co wcześniej rozwiązanie ogólne

$$\psi_{II} = A\sin(kx) + B\cos(kx)$$
.

Dla obszarów I i III równanie zapiszemy jako

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \gamma^2 \psi = 0,$$

gdzie

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mW},$$

co daje rozwiązanie ogólne

$$\psi_{I,III} = Ce^{\gamma x} + De^{-\gamma x}$$

Celem znalezienia dozwolonych wartości *k* dopasowujemy na granicach obszarów pochodne logarytmiczne:

$$\frac{1}{\psi_I}\frac{d\psi_I}{dx} = \frac{1}{\psi_{II}}\frac{d\psi_{II}}{dx} \quad \mathbf{w} \quad x = -\frac{a}{2}$$

oraz

$$\frac{1}{\psi_I I} \frac{d\psi_I I}{dx} = \frac{1}{\psi_{III}} \frac{d\psi_{III}}{dx} \quad \mathbf{w} \quad x = \frac{a}{2}.$$

Z obydwu równań otrzymujemy te same wnioski:

$$\gamma = k \operatorname{ctg}\left(-\frac{ka}{2}\right)$$
 dla $B = 0$,
 $\gamma = -k \operatorname{tg}\left(-\frac{ka}{2}\right)$ dla $A = 0$.

Są to warunki konieczne do spełnienia, aby otrzymać wzór poprawny funkcji ψ . Zarówno we wzorach na k jak i γ znajduje się wartość energii wiązania W, więc zagadnienie sprowadza się do znalezienia takich wartości W, aby powyższe warunki były spełnione. Nie jest to problem dający się w łatwy sposób rozwiązać analitycznie, jednak pokazuje, że dla skończonej studni też istnieją pewne dyskretne stany energetyczne cząstki. W rozdziale czwartym szerzej opisałem znajdowanie tych wartości metodą numeryczną.

Progiem potencjału nazwiemy...

Jako ostatni omawiany jest przypadek bariery potencjału...

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

Implementacja obliczeń zagadnień cząstki swobodnej(rysunek), nieskończonej studni potencjału(rysunek) i progu potencjału, jest trywialnym zagadnieniem i nie wymaga dłuższego tłumaczenia.

Sytuacja jest już odmienna dla pozostałych zagadnień, zaczynając od skończonej studnii potencjału. Istnieją w niej bowiem, tak jak w studni nieskończonej, skwantowane stany energii dla cząstki związanej, jednak wyznaczenie ich nie wyraża się prostym wzorem. Wiadomo, że $\psi(x)$ wyraża się wzorem: $\psi_1(x) = Ce^{\gamma x}$

$$\psi_2(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$$

$$\psi_3(x) = De^{-\gamma x}$$

gdzie indeksy opisują obszar, którego dotyczy wzór funkcji. Stałe A, B, C i D wyznaczane są z warunków brzegowych, jednak do obliczenia γ potrzebna jest wartość k.

Ze względu na szybkość początkowo chciałe zastosować metodą Newtona, jednak eksperymentalnie stwierdziłem, że przez charakter funkcji, znalezienie miejsca zerowego tą metodą jest bardzo wolne. Znacznie lepsze efekty przyniosła metoda bisekcji i ona wykorzystywana jest w ostatecznej implementacji.

4.5 Interfejs pomiędzy TypeScriptem i Pythonem

Języki programowania tak odmienne jak TypeScript i Python uruchamiane są w zupełnie innych środowiskach. Framework Tauri daje tutaj wyjątkową możliwość obsługując Type-Scriptu przy użyciu WebView[?] i Pythona wykorzystująć lokalnie zainstalowany interpreter[?].

Problemem jest jednak przesyłanie danych między tymi językami, o czym nie myślano przy ich tworzeniu. Zastosowałem więc serializację danych do formatu JSON, który jest tekstową reprezentacją obiektu w TypeScript'cie. Wyniki obliczeń fizycznych są więc serializowane(rysunek), wysyłane jako wyjście w powłoce systemowej i przekazywane przez Tauri do skryptu napisanego w TypeScript'cie(rysunek).

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. ISBN 83-01-02200-0
- [2] David Flanagan, JavaScript: The Definitive Guide. Master the World's Most-Used Programming Language. 7th Edition, O'Reilly Media, 2020. ISBN 978-14-919-5198-9
- [3] Wes McKinney, *Python for Data Analysis, str. 3* O'Reilly Media, 2012. ISBN 078-1-449-31979-3
- [4] Wes McKinney, *Python for Data Analysis, str. 2* O'Reilly Media, 2012. ISBN 078-1-449-31979-3
- [5] Wes McKinney, *Python for Data Analysis, str. 418* O'Reilly Media, 2012. ISBN 078-1-449-31979-3

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