

# Komputerowe modelowanie zjawisk fizycznych

Ryszard Kutner

*Zakład Dydaktyki Fizyki*

*Instytut Fizyki Doświadczalnej, Wydział Fizyki  
Uniwersytet Warszawski*

# **IX FESTIWAL NAUKI**

**WARSZAWA 2005**

***BRAK INWESTYCJI W NAUKĘ I  
EDUKACJĘ TO INWESTYCJA W  
IGNORANCJĘ***

Nauczanie, uczenie się oraz  
prowadzenie badań naukowych  
można oprzeć na komputerowym  
modelowaniu czyli symulacjach  
komputerowych

# Spis symulacji komputerowych

- **Fizyka kwantowa: cząstka w studni**  
Łukasz Kuźnicki
- **Statystyki kwantowe: rozkład Fermiego-Diraca**  
Wojciech Weseli, Monika Gall
- **Kondensacja Bosego-Einsteina**  
Marcin Regulski, Dariusz Żebrowski
- **Proces ostygnięcia ciał**  
Monika Gall, Adam Galant
- **Gaz rzeczywisty**  
Łukasz Malinowski
- **Ruchy Browna**  
Wojciech Weseli, Jarosław Hurkała

- **Silnik Carnota**

**Jaroslav Hurkała, Monika Gall**

- **Ruch peryhelium Merkurego**

**Mirosław Maciejczyk**



Monika Gall  
Ryszard Kutner  
Jerzy Ginter

# komputerem w kosmos



ZamKor



# **Termodynamika statystyczna pełni rolę pomostu między światem makroskopowym a mikroskopowym**

**Podjęcie ma charakter interdyscyplinarny:**

- **dydaktyki fizyki**
- **fizyka komputerowa**
- **termodynamika statystyczna**

# Ruchy Browna

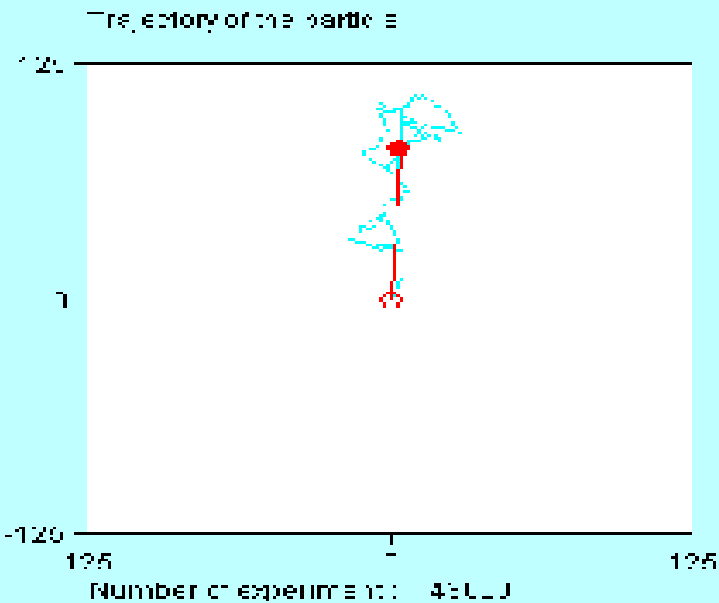
START STOP RESET



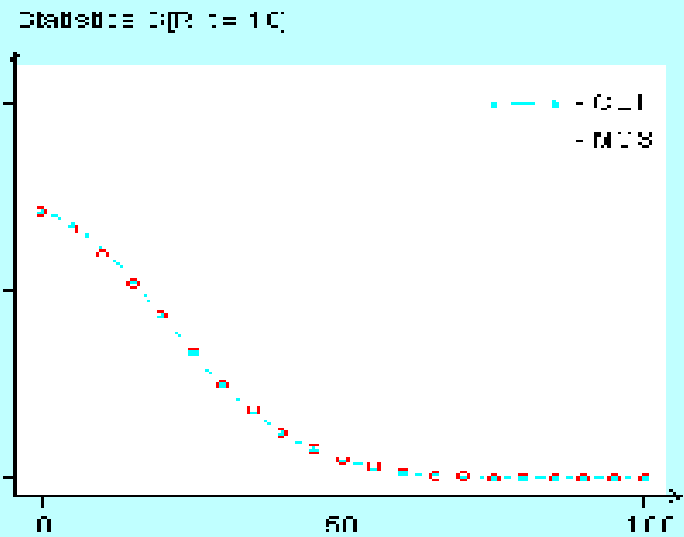
Number of experiments (100 1000000): 100000 Number of particle steps (10 100) n: 50

Distribution of single displacements:  Delta  Gauss  Poisson  Student

Snapshot picture after each (1 - 100000): 100 experiments. Delay (ms): 50



- x1
- x2
- x4



R(n = 50):  On  Off Change of the figure:  MSU vs. time

Time t: 5 15 25 35 45

# Statystyki kwantowe: rozkład Fermiego-Diraca

START STOP RESET



Number of MCS.p. (500 10000): 2000

Averaging (100 500): 200

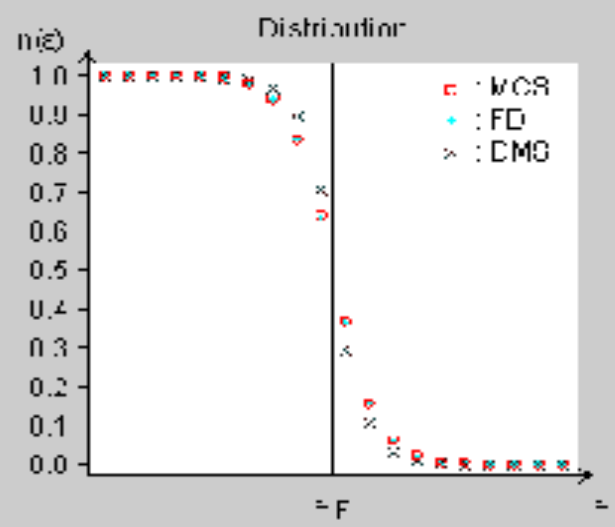
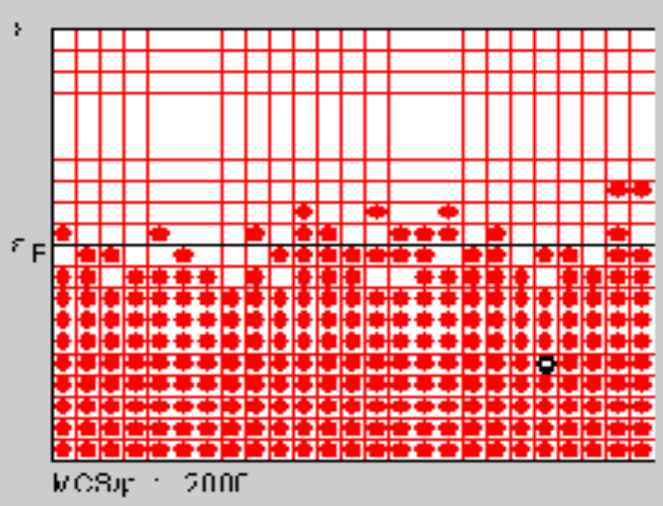
Relative-discreteness:  $\Delta = 1.11$

0.1 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

$\langle \epsilon \rangle = 0.133$   $\langle \epsilon^2 \rangle = 0.304$   $\langle \epsilon^3 \rangle = 0.232$

Ensemble:  GCF  CF Delay (ms):

0 10 20



**R.Kutner, R.Przeniosło, M.Kwiatkowski:  
Quantum statistics and discreteness.  
Differences between the canonical and grand  
canonical ensembles for a fermionic lattice gas,  
Annalen der Physik 4 (1995) 646-667**

# Założenia modelu mikroskopowego

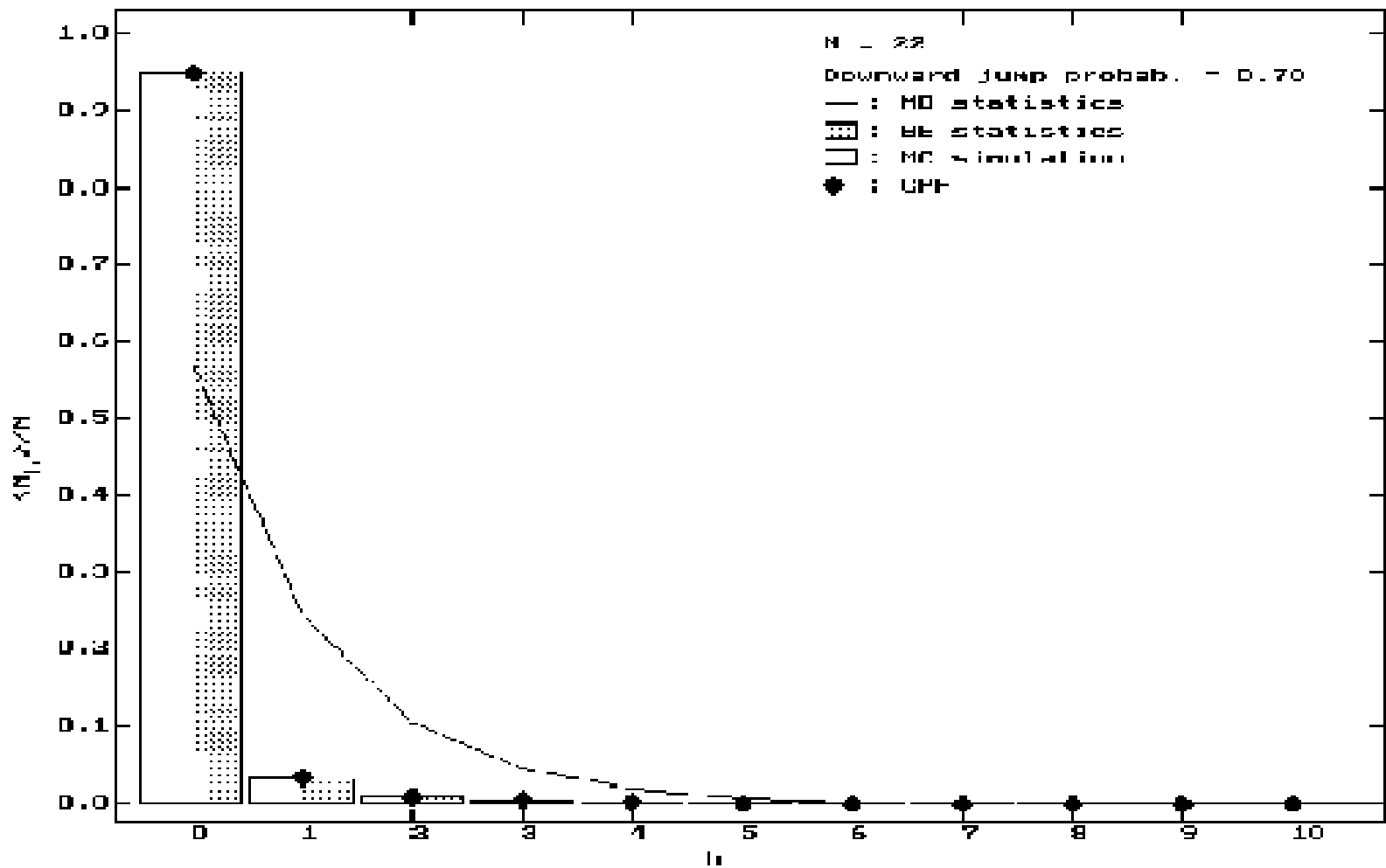
- Mamy do czynienia z modelem gazu sieciowego, przy czym komórki sieci reprezentują jednocząstkowe stany nieoddziałujących fermionów znajdujących się w potencjale jednowymiarowego oscylatora harmonicznego
- Obowiązuje zakaz Pauliego
- Układ jest w kontakcie z rezerwuarem cieplnym a przeskoki fermionów pomiędzy stanami mają charakter termicznie aktywowany
- Badamy dwa przypadki:
  - (a) gdy liczba fermionów może fluktuować,
  - (b) gdy liczba fermionów jest ustalona

Celem doświadczenia numerycznego jest wyznaczenie średniego obsadzenia każdego stanu kwantowego czyli znalezienie statystyk kwantowych

# ZASADNICZY WNIOSEK

- Powodem odstępstw od statystyki Fermiego-Diraca są korelacje typu cząstka-dziura jakie pojawiają się gdy liczba fermionów w układzie jest ustalona

# Kondensacija Bosego-Einsteina



Ryszard Kutner, Marcin Regulski:  
Bose-Einstein condensation shown by Monte  
Carlo simulation,  
Computer Physics Communications 121-  
122 (1999) 586-590

# Założenia modelu mikroskopowego

- **Rozważamy nieoddziałujące bozony znajdujące się w potencjale trójwymiarowego oscylatora harmonicznego**
- **Zakładamy, że całkowita liczba bozonów jest ustalona**
- **Układ bozonów znajduje się w kontakcie z rezerwuarem cieplnym a przeskoki bozonów pomiędzy poszczególnymi stanami mają charakter termicznie aktywowany**

# Cel doświadczenia numerycznego:

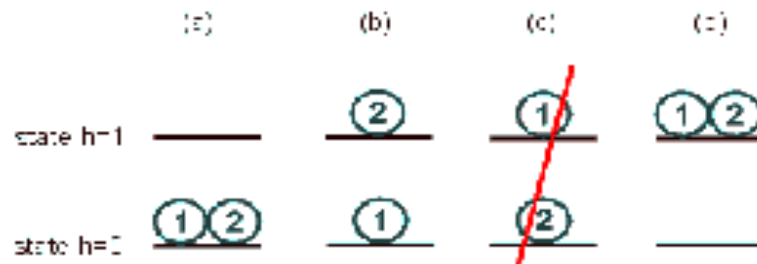
- **Symulacja kondensacji Bosego-Einsteina na drodze czysto statystycznej a nie kwantowo-mechanicznej**

# Zasadniczy element algorytmu: imitacja kwantowej nierozróżnialności bozonów za pomocą zasady zachowania kolejności cząstek

## Dwie cząstki i dwa stany jednocząstkowe

How to mimic QU of identical particles ?

When we do not explicitly use a wave function we are able to positively answer for this question



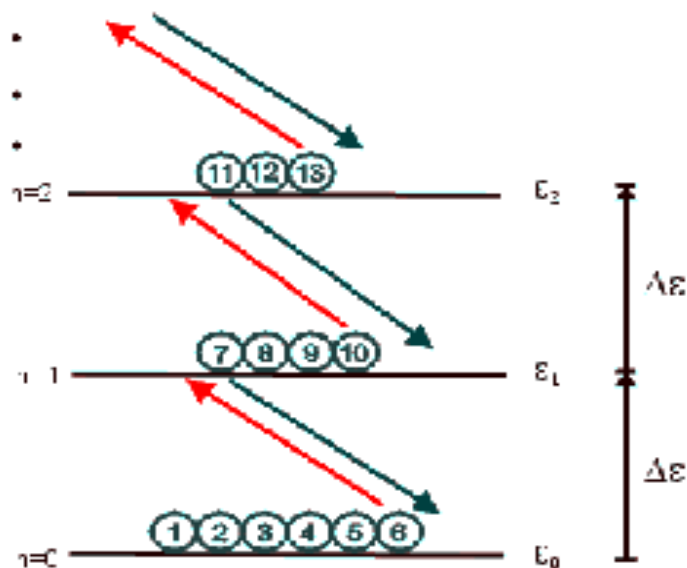
Conservation principle:

SEQUENCE OF PARTICLES IS PRESERVED

# Bozony w potencjale 1d oscylatora harmonicznego

- Tylko cząstka o najwyższym numerze w danym stanie może dokonać przeskoku

- BE statistics for one-dimensional harmonic oscillator

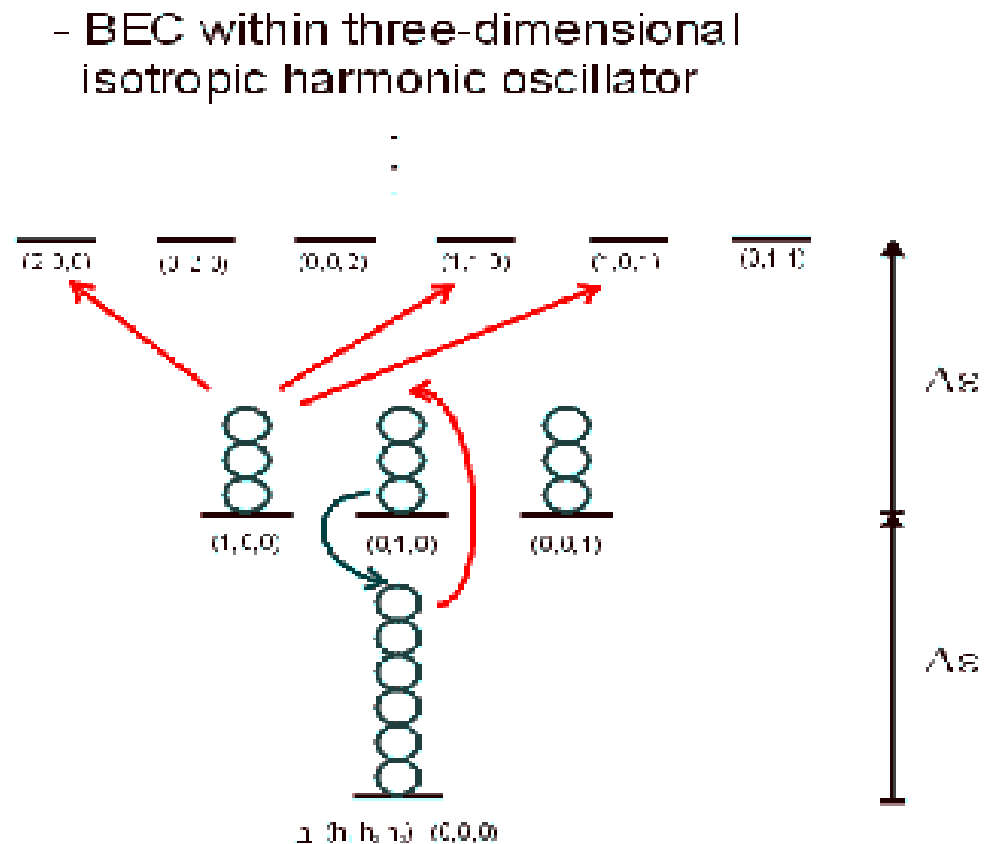


Basic step towards BEC:

"BOTTLENECK" GATE  
FROM THE GROUND STATE

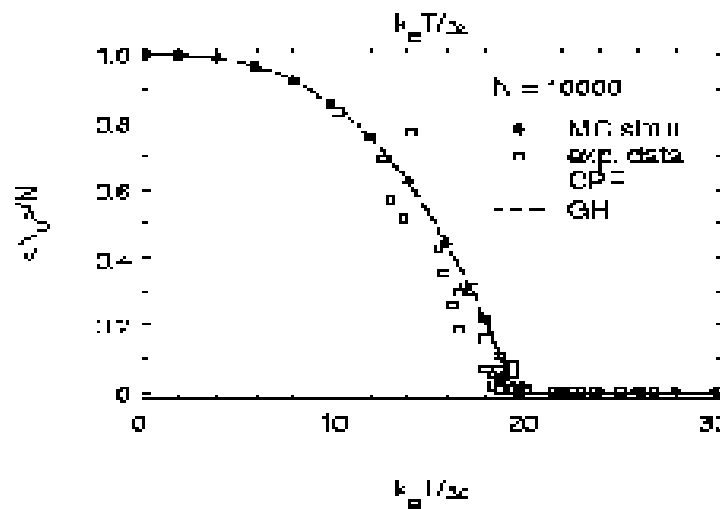
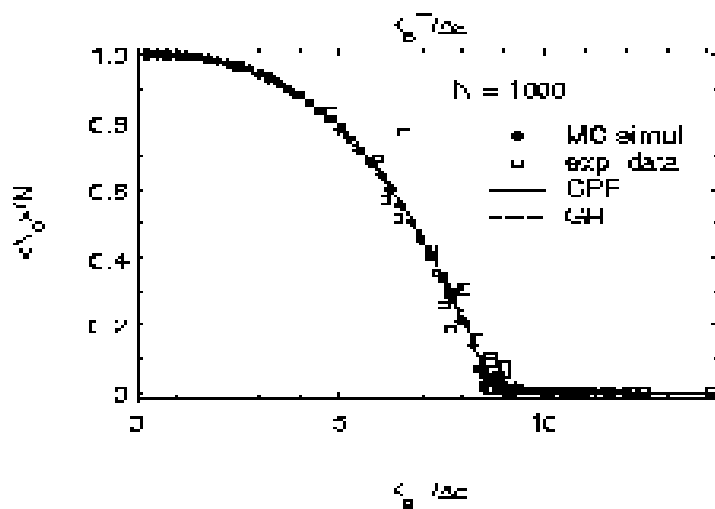
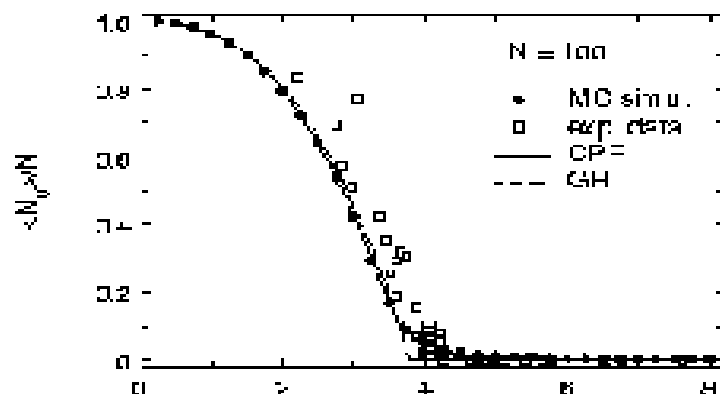
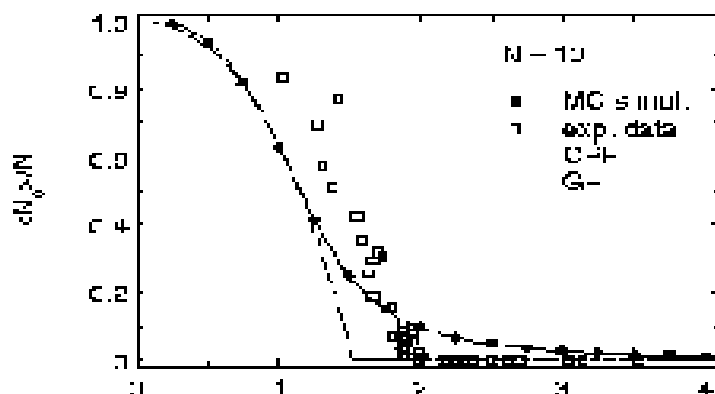
# Bozony w potencjale 3d oscylatora harmonicznego

Tylko górna cząstka w danym stanie może dokonać przeskoku

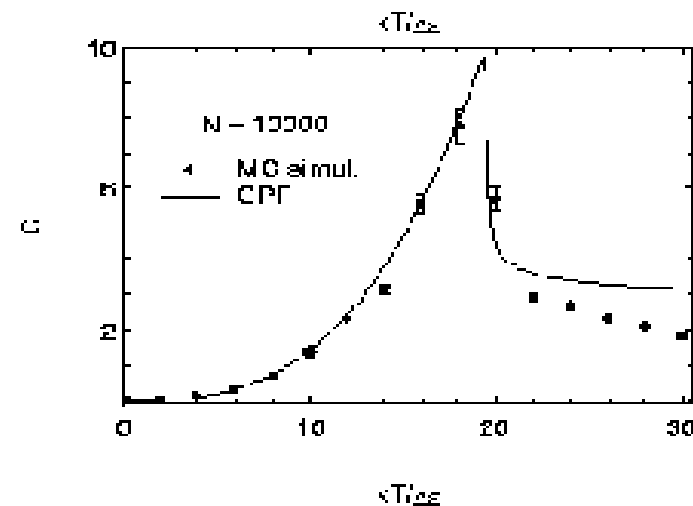
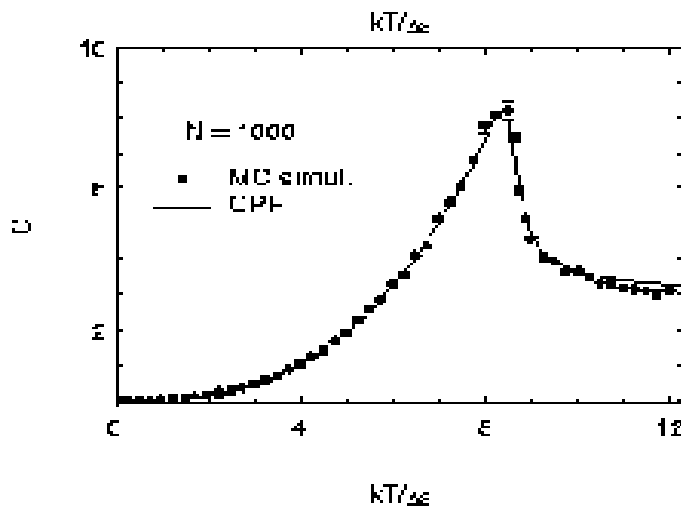
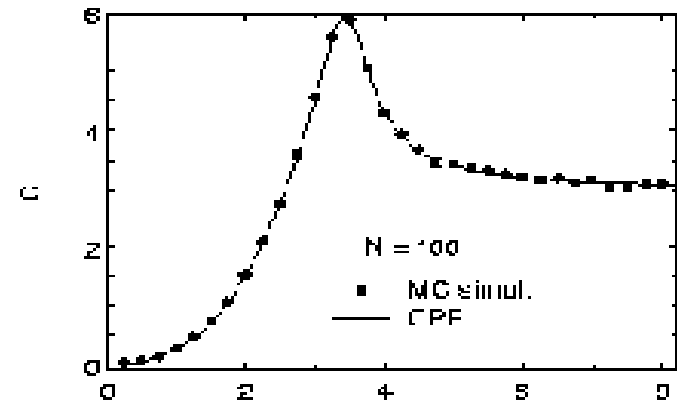
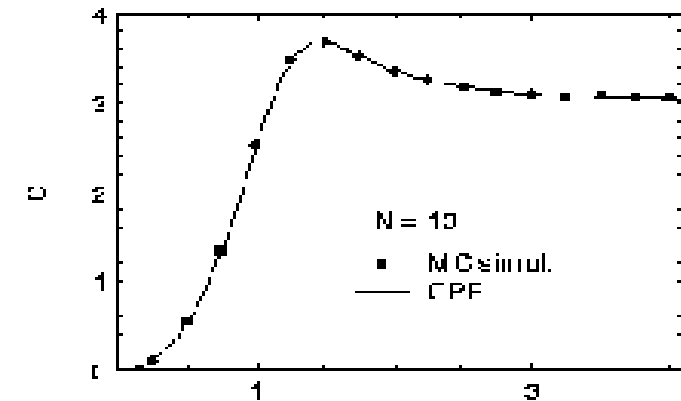


# Najważniejsze wyniki

## Obsadzenie stanu podstawowego



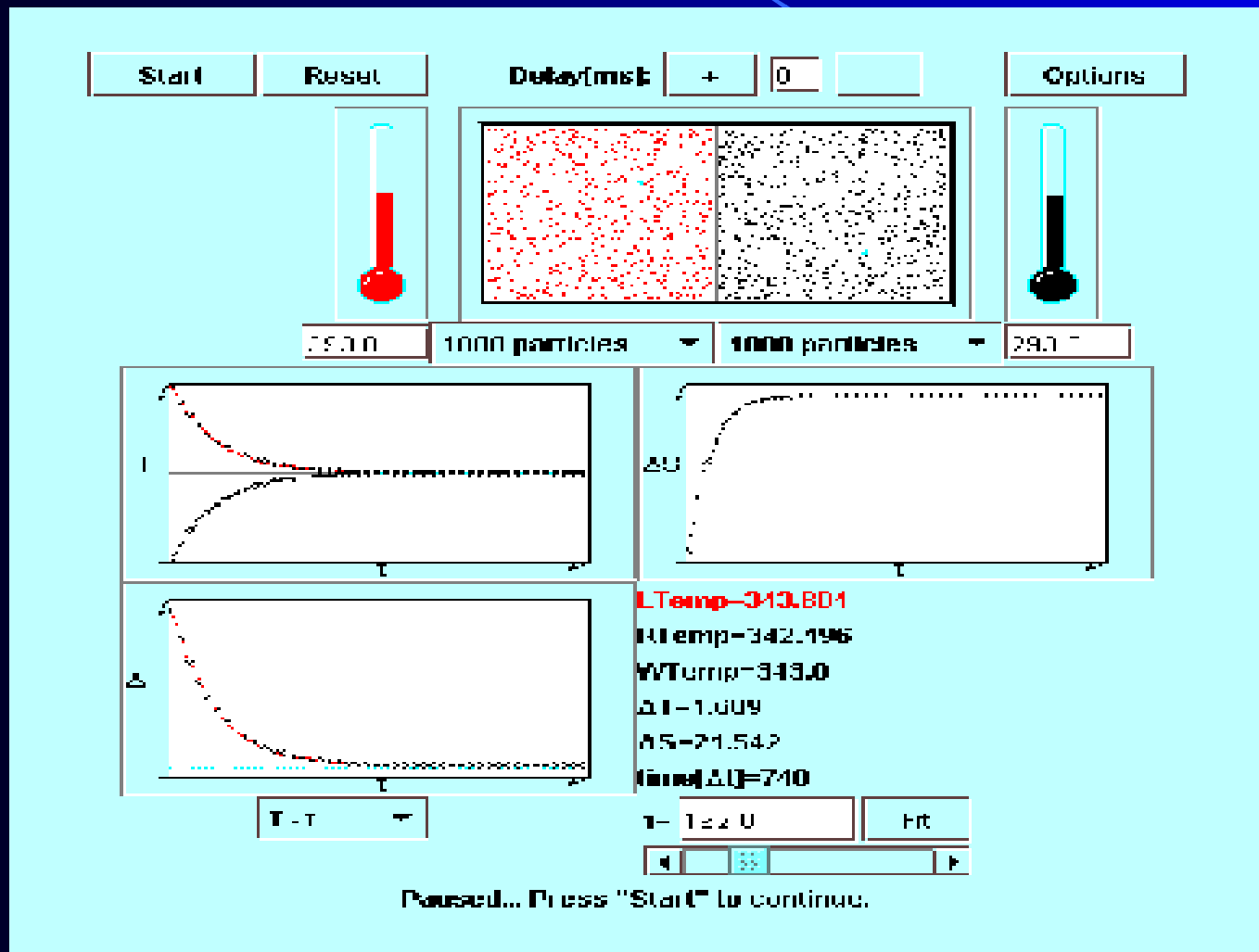
# Ciepło właściwe: przemiana typu $\lambda$



# ZASADNICZY WNIOSEK

- Główną przyczyną kondensacji Bosego-Einsteina jest kwantowa nierozróżnialność bozonów, którą można imitować za pomocą zasady zachowania odpowiedniego porządku cząstek klasycznych

# Procesy nieodwracalne Fouriera- Onsagera: przekaz ciepła przez ściankę diatermiczną



A.Galant, R.Kutner, A.Majerowski:  
Heat Transfer, Newton's Law of  
Cooling and the Law of Entropy  
Increase Simulated by the Real-Time  
Computer Experiment in Java,  
Lecture Notes in Computer  
Science 2657 (2003) 46-53

# Założenia teorii Fouriera- Onsagera procesów nieodwracalnych

- **Szybkość zmiany temperatury jest proporcjonalna do różnicy temperatur**

# Założenia modelu mikroskopowego

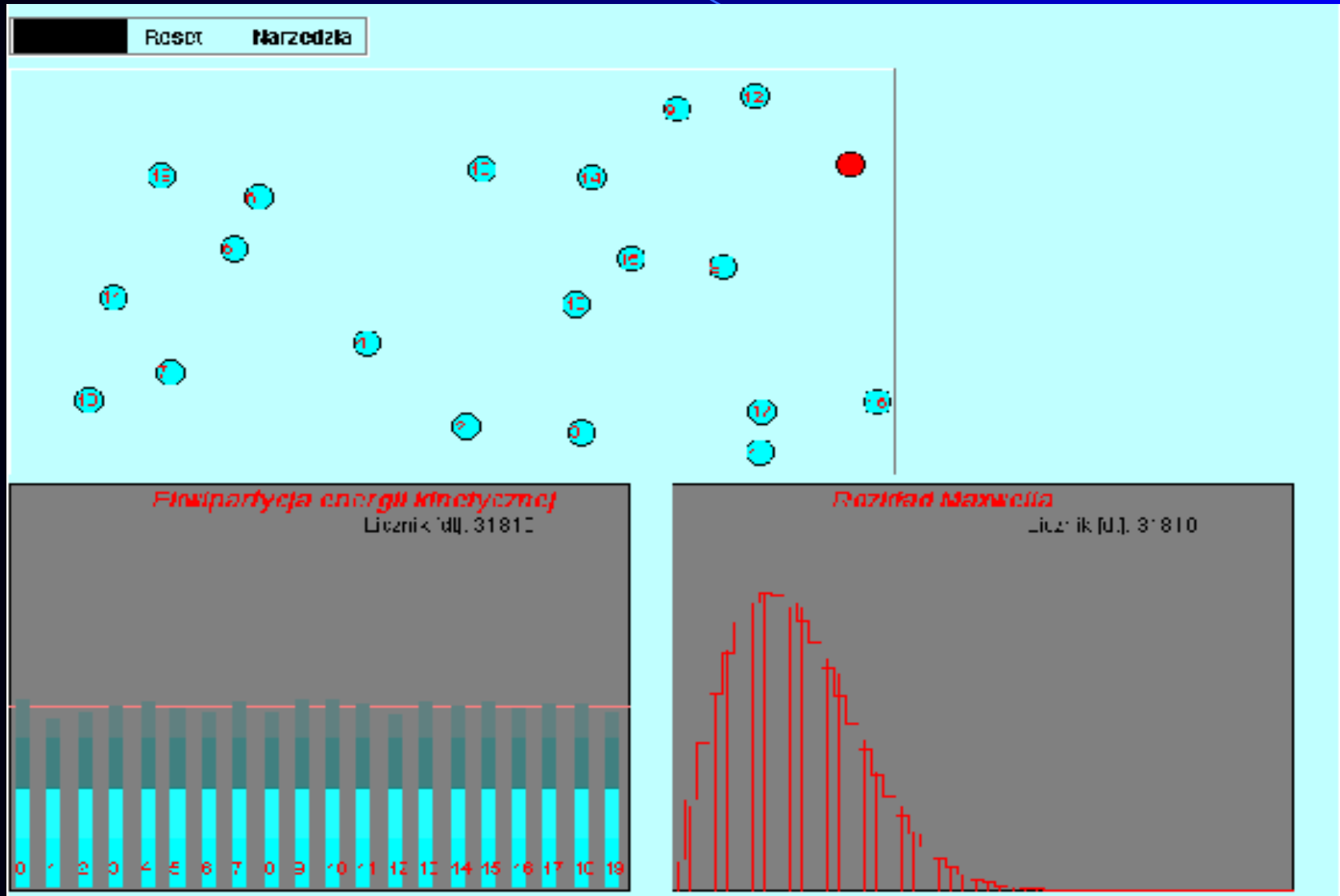
- Dyskretyzacja czasu
- Oddziaływanie atomów gazu doskonałego ze sobą jedynie poprzez neutralną ściankę diatermiczną
- Przekaz energii przez ściankę diatermiczną bazuje na lokalnej zasadzie ekwipartycji energii
- Przybliżenie lokalnej zmiany temperatury za pomocą procesu izotermicznego i adiabatycznego (analogon podejścia Ito)
- Szorstkość wszystkich ścianek
- Układ jako całość jest izolowany od otoczenia

Celem doświadczenia  
numerycznego jest  
wyprowadzenie z modelu  
mikroskopowego  
makroskopowych  
własności przewidywanych  
przez teorię Fouriera-  
Onsagera

# ZASADNICZY WNIOSEK

- **Rezygnacja z chaosu molekularnego, lub ogólniej rzecz biorąc z ergodyczności prowadzi do odstępstw od teorii Fouriera-Onsagera**

# Gaz rzeczywisty



# Założenia modelu mikroskopowego

- Mamy do czynienia z dwoma rodzajami gazu zamkniętego w izolowanym pojemniku:
  - (a) gazem oddziałujących twardych rdzeni, przy czym bierzemy pod uwagę tylko oddziaływania dwuciałowe,
  - (b) gazem doskonałym (składającym się z nieoddziałujących atomów)

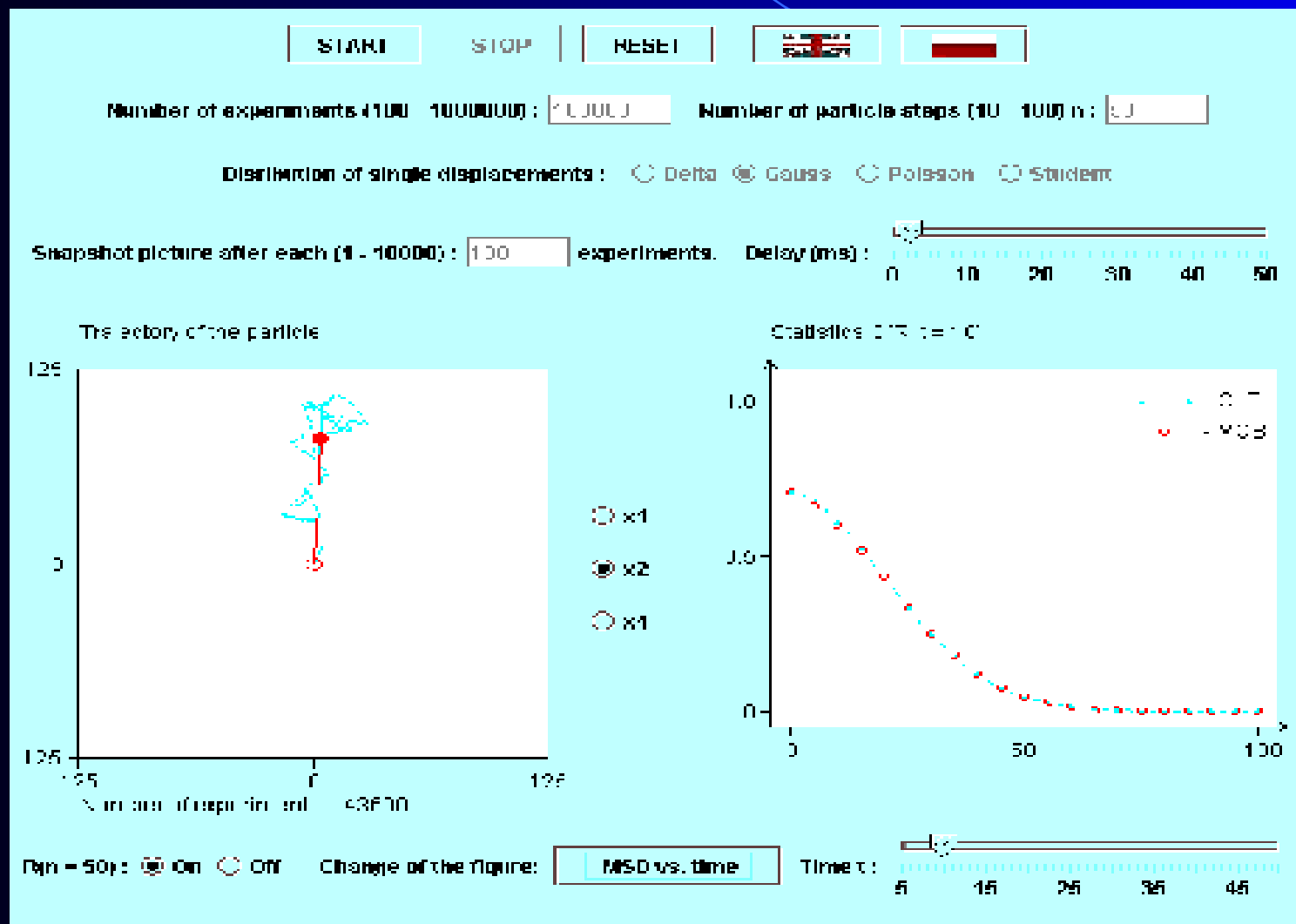
# Zasadniczym celem doświadczenia numerycznego jest:

- **Sprawdzenie zasady ekwipartycji energii kinetycznej**
- **Zbudowanie rozkładu Maxwella**
- **Zbadanie odstępstw od prawa Boyle'a i Mariotte'a**

# ZASADNICZY WNIOSEK

- **Gaz twardych rdzeni jest modelem wystarczającym do badania zasadniczych własności gazów rzeczywistych i idealnych**

# Ruchy Browna – Centralne Twierdzenie Graniczne



# Założenia modelu stochastycznego

- **Pojedyncze przemieszczenia cząsteczki posiadają skończoną wariancję a poza tym ich rozkład prawdopodobieństwa jest dowolny**
- **Pojedyncze przemieszczenia cząsteczki są statystycznie niezależne**
- **Przestrzeń jest jednorodna i izotropowa**
- **Czas jest dyskretny i jednorodny**

# Celem doświadczenia numerycznego jest:

(a) znalezienie zależności wariancji sumarycznego przemieszczenia cząsteczki od czasu

(b) znalezienie rozkładu prawdopodobieństwa jakiemu podlegają sumaryczne przemieszczenia cząsteczki dla długich czasów

# ZASADNICZE WNIOSKI

- Niezależnie od tego jakiemu rozkładowi prawdopodobieństwa podlegają pojedyncze przemieszczenia cząsteczki, spełnione są następujące własności:
  - (a) wariancja sumarycznego przemieszczenia cząsteczki jest liniową funkcją czasu dla długich czasów
  - (b) sumaryczne przemieszczenia cząsteczki podlegają, dla długich czasów, rozkładowi Gaussa
- Własności (a) i (b) stanowią tezę Centralnego Twierdzenia Granicznego

# PODSUMOWANIE

Jeżeli jakieś zjawisko umiemy opisać słowami to potrafimy je zalgorytmizować zatem, algorytmizacja fizyki jest możliwa.

A więc, jest możliwe podejście do fizyki od strony doświadczeń numerycznych.

Tym samym jest możliwe nauczanie i uczenie się fizyki poprzez doświadczenia numeryczne czyli symulacje komputerowe

Oznacza to, że fizyka może być łatwa i przyjemna