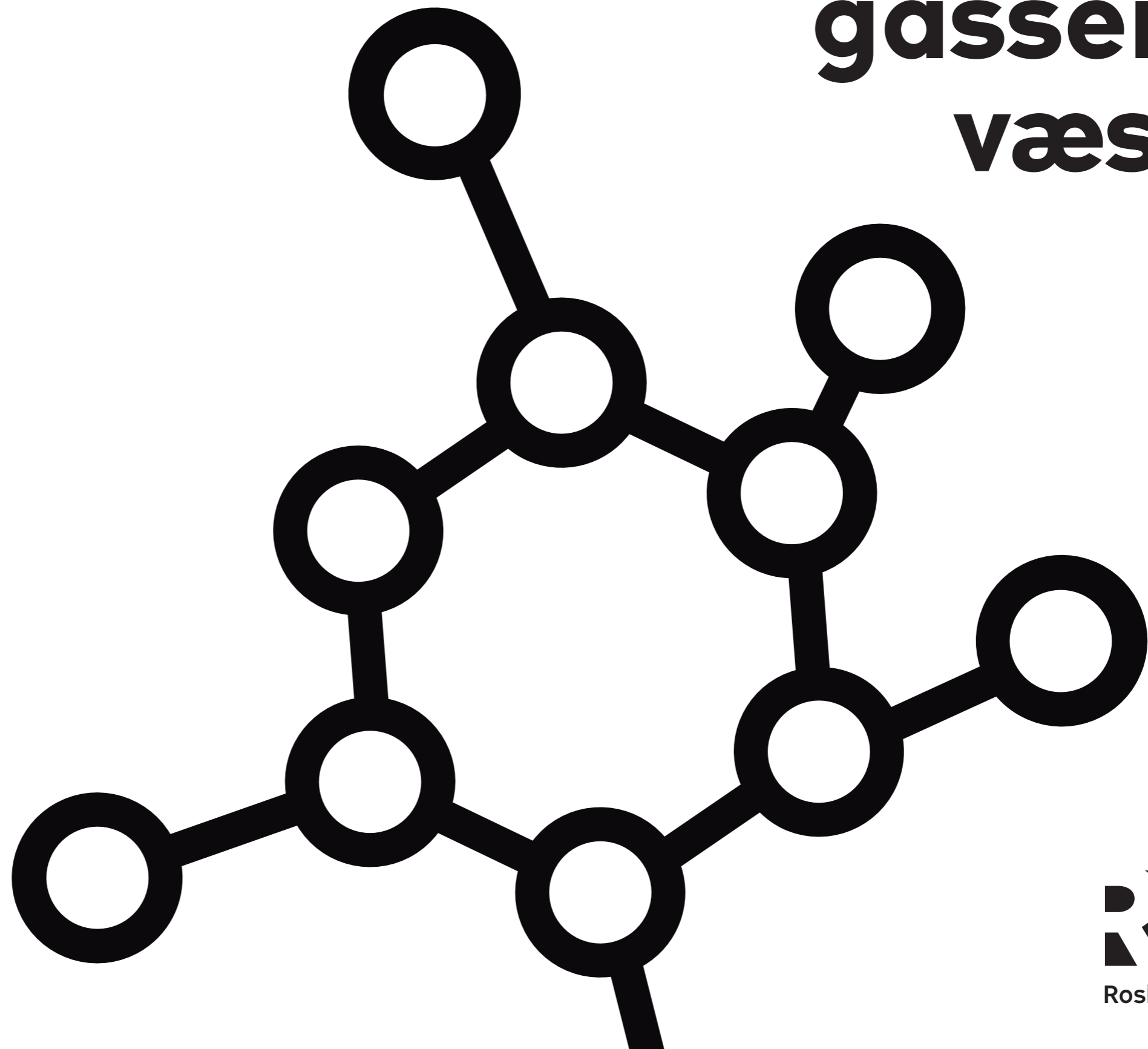


# Simulering af gasser og væsker



# FYSIK

## UNDERVISNINGSPAKKE

# Simulering af gasser og væsker

Materialet giver jer mulighed for at lave simuleringer direkte på RUC's super-computer med dens enorme regnekraft, som ellers kun bliver brugt af forskere og studerende i Fysik på RUC. Vi kigger på idealgasser og idealgasloven og under hvilke omstændigheder, idealgasser er en god tilnærmelse til virkeligheden. Derudover ser vi på, hvordan man modellerer mange atomers interaktioner og dynamik med molecular dynamics, og hvad forskerne konkret simulerer på RUC.

Materialet er udviklet i samarbejde mellem forskere fra RUC og lærere fra STX og HTX således, at det er den nyeste forskning, der ligger til grund - og så det passer ind i læreplanen for fysik.

| Undervisningspakkens indhold: |  |
|-------------------------------|--|
| FILM:                         | Computersimulering i fysik                             |
| ARTIKEL:                      | Computersimulering i fysik                             |
| OPGAVESÆT:                    | Simulering af gasser og væsker på RUC's supercomputer  |
| SRP/SOP-ØVELSE PÅ RUC:        | Computersimulering af gasser og væsker                 |
| WORKSHOP PÅ RUC:              | Computersimulering af gasser og væsker                 |
| OPLÆG - FORSKEREN FORTÆLLER:  | Hvad er en glas?                                       |
| KARRIEREPROFIL:               | Rasmus Godiksen, kandidat i Fysik og Matematik fra RUC |

### Der arbejdes med følgende emner i pakken:

- Computersimulering og databehandling
- Tilstandsformer
- Ideal-gas loven
- Ædelgasser
- Faser og faseovergange
- Model/virkelighed
- Makroskopiske egenskaber ved stof

### Download undervisningspakken

[ruc.dk/undervisningspakke-simulering](http://ruc.dk/undervisningspakke-simulering)

### Tilmelding og afholdelse

Informationer om tilmelding kan ses under de enkelte elementer. Har du yderligere spørgsmål kan du henvende dig til projektkoordinator Dorthe Vedel på [vedel@ruc.dk](mailto:vedel@ruc.dk)

### Find flere tilbud

og se alle undervisningspakkerne fra Roskilde Universitet på [www.ruc.dk/gym](http://www.ruc.dk/gym)



# Sådan bruger du materialet:

Gymnasiepakken er udarbejdet til gymnasieskolen og kan frit downloades på [www.ruc.dk/undervisningspakke-simulering](http://www.ruc.dk/undervisningspakke-simulering). Artikel, film og opgavesæt bruges med fordel i sammenhæng og er oplagt til brug i problemorienteret projektlæring og tværfaglige forløb.

## Film

Filmen er 6 minutter lang og oplagt som central indføring til at arbejde med materialet. Filmen giver en forklaring på, hvorfor fysikere på RUC har bygget en af Danmarks hurtigste supercomputere, og hvordan I har mulighed for selv at lave simuleringer på computeren. Den giver desuden indblik i forskernes verden og er med til at give et fagligt grundlag til opgaveløsningen.

## Artikel

Artiklen giver et dybere indblik i, hvordan fysikforskere på RUC arbejder med simulering i arbejdet med at forstå, hvordan stoffer opfører sig på atomart niveau. Materialet er skrevet af RUC-forskere til brug i gymnasieskolen. Materialet kan bruges både som lektie og til uddybende spørgsmål.

## Opgavesæt

I opgavesættet får I mulighed for at arbejde med ædelgasser og forholde jer til idealgasloven. I får selv mulighed for at lave simuleringer på RUC's supercomputer, som ellers kun bruges af forskere og studerende på RUC. Opgavesættet løses bedst, når man har set filmen og læst artiklen.

## SRP/SOP-øvelse på RUC

Vi giver en lille gruppe elever mulighed for at komme på RUC og lave simuleringer på RUC's supercomputer sammen med vores forskere - til brug i deres SRP/SOP projekt.

## Workshop på RUC

Efter at have arbejdet med undervisningspakken "Simulering af gasser og væsker?" har I klassevis mulighed for at besøge RUC og afslutte forløbet med en workshop sammen med forskerne på RUC. I får lov til at lave simuleringer og arbejde på den supercomputer, forskerne bruger til tunge beregninger. Gennem workshoppen opnås en forståelse af, hvad der sker ved faseovergange, på atomart niveau - og man får også indblik i og afprøver isomorf teorien, der er en teori for væskers opførsel, der er udviklet på Roskilde Universitet.

## Oplæg - forskeren fortæller

Ved Nat-dag på RUC kan I klassevis tilmelde jer oplægget: "Hvad er en glas?" og høre forskeren fortælle om forskningen i tilstandsformer. Oplægget er oplagt som en intro til et forløb om tilstandsformer og faseovergange og giver desuden et indblik i forskernes verden, og hvordan der arbejdes med fysik i virkeligheden.

## Karrierelæring

På [ruc.dk/karriereprofiler](http://ruc.dk/karriereprofiler) kan I finde en række film og historier om kandidater fra RUC, og om hvordan de har brugt deres uddannelse i deres arbejdsliv. Vi følger bl.a. Rasmus Godiksen, som laver matematiske modeller og risikoanalyser i en bank - og Ditte Gundermann, som bruger materialefysik i sit arbejde med at udvikle skibsmaling. Begge er uddannet på RUC med fysik som det ene fag.

## Besøg RUC

Ved besøg på RUC har I mulighed for at møde studerende, få rundvisning på campus og laboratorier samt høre mere om forskningen i fysik. I kan klassevis besøge RUC ved Nat-dag: [www.nat-dag.ruc.dk](http://www.nat-dag.ruc.dk) og gennem undervisningspakkens Workshop. Desuden har eleverne mulighed for at besøge Roskilde Universitet ved Åbent Hus: [ruc.dk/arrangementer/aabent-hus-bachelor](http://ruc.dk/arrangementer/aabent-hus-bachelor), eller hvis de ønsker at lave SRP/SOP-øvelser på RUC: [ruc.dk/srp-sop](http://ruc.dk/srp-sop)

## Supplerende materiale

Hvis I vil arbejde yderligere med emnet, kan vi anbefale følgende:

- Artikel: Thermalization calorimetry: A simple method for investigating glass transition and crystallization of super-cooled liquids: [forskning.ruc.dk/da/publications/thermalization-calorimetry-a-simple-method-for-investigating-glas](http://forskning.ruc.dk/da/publications/thermalization-calorimetry-a-simple-method-for-investigating-glas)
- Film: Klimaasfalt og rullemodstand [www.youtube.com/watch?v=XYg-0b0P48WQ](http://www.youtube.com/watch?v=XYg-0b0P48WQ)
- Podcast: NATURLIGVIS - en podcast om naturvidenskab: Hvad er fysik? [www.buzzsprout.com/236555/997245-pa-ca-1-minut-hvad-er-fysik](http://www.buzzsprout.com/236555/997245-pa-ca-1-minut-hvad-er-fysik)
- Artikel: Grafikkort sætter Newton på speed, Aktuel Naturvidenskab (jan 2013): [https://docs.google.com/document/d/1BxP6qXaUAMa-PO5uURAbP9x2jghJyOj9XF\\_9R-RiQjd0/edit?usp=sharing](https://docs.google.com/document/d/1BxP6qXaUAMa-PO5uURAbP9x2jghJyOj9XF_9R-RiQjd0/edit?usp=sharing)

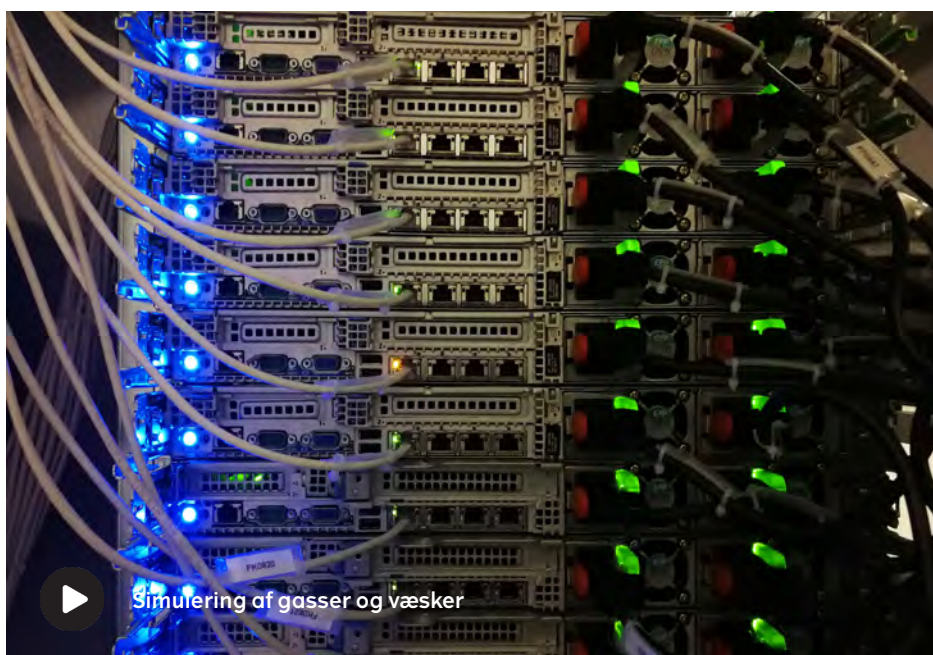


# Computersimulering i fysik

- hvorfor fysikere på Roskilde Universitet har bygget en af Danmarks hurtigste supercomputere

På Roskilde Universitet arbejder fysikeren Thomas Schröder og hans kollegaer med at forstå, hvordan stoffer opfører sig på atomart niveau. For at komme det nærmere bruger Thomas og hans kollegaer Roskilde Universitets supercomputer, der består af en masse high-end gamer PC'ere og Molecular Dynamics softwaren RUMD (Roskilde University Molecular Dynamics), som forskerne har udviklet.

Thomas forklarer om, hvordan han bruger supercomputeren i sin forskning, og også hvordan eleverne selv kan få adgang til supercomputeren. Filmen er 6 minutter lang og oplagt som indføring til at arbejde med materialet, herunder artiklen og opgavesættet der hører med til gymnasiepakken.



Udarbejdet af:



**Thomas Schröder**  
Professor i fysik  
Roskilde Universitet

Forsker i dynamikken i uordnede systemer, herunder: Viskøse (sejfflydende) væsker, frekvensafhængig ledningsevne i glasser samt såkaldte "random walks" på fraktale strukturer. Udvikler teori og laver simuleringer på supercomputer.

Filmen er udarbejdet af firmaet Undervisningsfysik v. Søren Storm.

Filmen er en del af RUC's undervisningspakke: "Simulering af gasser og væsker", som findes på [www.ruc.dk/undervisningspakke-simulering](http://www.ruc.dk/undervisningspakke-simulering)

Pakken består af en faglig film, en artikel, et opgavesæt, en SRP/SOP-øvelse, en workshop, et oplæg og en karriereprofil.

Kig



Åbent Hus



Uddannelse



Karriere



# Computersimulering i fysik

- hvorfor fysikere på Roskilde Universitet har bygget en af Danmarks hurtigste supercomputere



Figur 1: Her ses nogle af de PC'ere, der udgør supercomputeren på Roskilde Universitet

Computersimulering spiller en stadig større rolle i naturvidenskab. Fx blev Nobelprisen i kemi i 2013 givet til Karplus, Levitt og Warshel for deres arbejde med at udvikle metoder til at simulere proteiner og enzymer.

I artiklen her vil vi fortælle om, hvordan man kan simulere atomer og molekyler, og hvorfor vi på RUC har bygget en supercomputer, som er en af Danmarks hurtigste. Vi kommer også til at se på, hvorfor den er baseret på grafikkort, der jo normalt bruges til gaming.

## Tyktflydende væsker og simuleringer, der tager en lille evighed

På RUC forsker vi bl.a. i, hvordan atomer og molekyler bevæger sig, i det man kalder for tyktflydende eller viskøse væsker. Hvad det er, kommer vi ind på om lidt, men for at forstå nødvendigheden af supercomputeren, skal man forstå, hvor omfattende simuleringerne er. De længste simuleringer vi sætter i gang, ville tage mere end 4 år at gennemføre på en normal computer. På vores supercomputer tager den samme opgave 4 måneder.

Supercomputeren er ikke en enkelt stor computer, men 30 kraftige PC'ere, der hver har 3 kraftige grafikkort. Tilsammen udgør PC'erne det, man kalder for et cluster. Hver simulering køres på et enkelt grafikkort, så vi kan lave mange simuleringer, der undersøger fx flere forskellige temperaturer og tryk på samme tid. Den voldsomme regnekraft på supercomputeren kommer også dig til gode, for i opgaverne, der hører med til artiklen, kan du selv prøve at lave simuleringer på RUC's supercomputer over nettet.

Et grafik-kort (GPU) som kan lave 10 millioner millioner ( $10^{13}$ ) beregninger per sekund. Dem er der 3 af i hver computer, og med 30 computere er der altså i alt 90 grafikkort i supercomputeren. Grafikkortene bliver løbende udskiftet til nyere modeller.



### Udarbejdet af:



**Thomas Schröder**  
Lektor i fysik  
Roskilde Universitet

Bruger computerbaserede modeller til at udvikle og teste teorier for materialers egenskaber.



**Nick Bailey**  
Lektor i fysik  
Roskilde Universitet

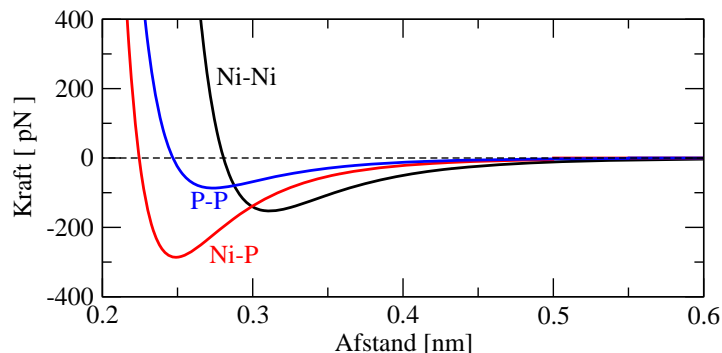
Udvikler og tester teorier for materialer, herunder væsker og glas, ved brug af supercomputer.

- Til denne artikel og om samme emne hører en film, et opgavesæt, en SRP/SOP-øvelse, en workshop, et oplæg og en karriereprofil. Se [ruc.dk/undervisningspakke-simulering](http://ruc.dk/undervisningspakke-simulering)
- Læs mere om materialeforskning på Roskilde Universitet på [www.ruc.dk/glas-og-tid](http://www.ruc.dk/glas-og-tid)
- Lær mere om dine karrieremuligheder inden for fysik ved at se filmen om Rasmus Godiksen, en kandidat fra RUC, som arbejder med simuleringer i virkeligheden. Se [www.ruc.dk/karriereprofiler](http://www.ruc.dk/karriereprofiler)



## Modeller

Det der simuleres, er altid en *model*, dvs. en matematisk beskrivelse af, hvordan atomerne og molekylerne påvirker hinanden i væsken. På figur 3 ser du en sådan model. Den beskriver de kræfter, der er mellem en blanding af to slags atomer, her specifikt for en blanding af nikkelatomer og fosforatomer. På figuren angiver den røde kurve (Ni-P) den kraft (målt i piconewton), et nikkelatom påvirkes af fra et fosforatom, som funktion af afstanden mellem de to atomer. Tilsvarende angiver Ni-Ni og P-P kræfterne mellem atomer af samme type. Der hvor kræfterne er 0, sker der hverken tiltrækning eller frastødning. Ved negative værdier for kraften, sker der i modellen en tiltrækning mellem atomerne. Ved positive værdier for kraften sker der en frastødning. Som man ser er der ved små afstande, positive værdier for kræfterne (eksempelvis under en afstand på 0.22 nm for Ni-P). Positive værdier betyder, at atomerne frastøder hinanden. Ved længere afstande er kræfterne negative, hvilket vil sige, at atomerne tiltrækker hinanden i modellen. Man kalder modellen for en Lennard-Jones-model.



Figur 3. Nikkel-Fosfor modellen. Angivelse af den kraft 3 forskellige par af atomer, Ni-Ni, P-P og Ni-P, kan påvirkes af i modellen. Den største tiltrækningskraft ses her mellem Ni-P, altså mellem Nikkel og Fosfor (rød linje).

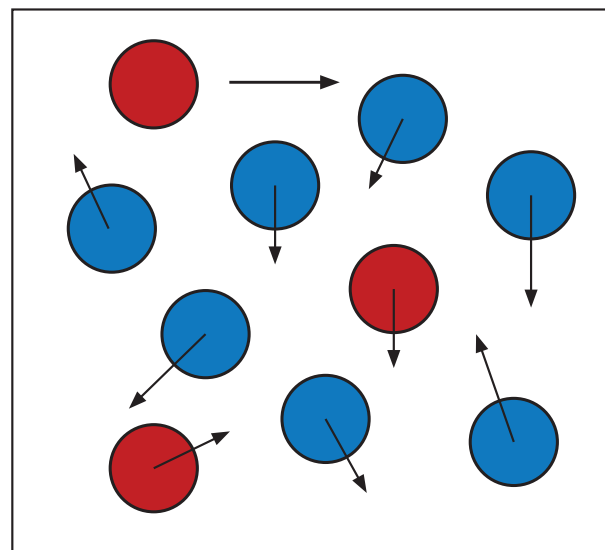
## Molecular Dynamics

Når vi nu har modellen på plads, kan vi begynde simuleringen. Vi bruger på Roskilde Universitets supercomputer den metode, der kaldes "Molecular Dynamics", og computeren kører faktisk vores helt eget Molecular Dynamics software, vi kalder Roskilde University Molecular Dynamics (RUMD).

Metoden bag Molecular Dynamics starter med, at man placerer alle de atomer, der skal indgå i simuleringen i en virtuel boks. Hvert atom får en position (x, y og z) og en hastighed.

Ud fra positionerne, og den model vi har defineret for interaktionen mellem atomerne, kan vi beregne den samlede kraft, der påvirker hvert enkelt atom. Newtons anden lov siger, at  $F = m \cdot a$ , og ud fra ligningen kan vi beregne accelerationen for de enkelte atomer,  $a = \frac{F}{m}$ . Accelerationen er jo ændringen af hastigheden per tid,  $a = \frac{dv}{dt}$ , dvs. vi kan bruge accelerationen til at beregne, hvad hastigheden er når der er gået et lille stykke tid "dt". Når vi skal forklare computeren det, skriver vi ligningen:  $v_{ny} = v_{gammel} + a \cdot dt$ . Hastighed er jo ændring af position per tid, og beregningen for hastigheden på x-aksen vil derfor lyde,  $v = \frac{dx}{dt}$ . Vi kan nu bruge hastigheden til at beregne den nye position på x-aksen:  $x_{ny} = x_{gammel} + v \cdot dt$ . Når vi har fundet de nye positioner, kan vi finde de tilsvarende nye kræfter og starte forfra i

Overordnet algoritme for Molecular Dynamics software:



Figur 4. Opsummering af algoritmen i RUMD.

- 1) Beregn alle kræfter mellem atomer der er tæt nok på hinanden.
- 2) Beregn acceleration for hvert atom ud fra Newton's anden lov:  $F = m \cdot a$
- 3) Beregn nye hastigheder ud fra definitionen af acceleration:  $\frac{dv}{dt} = a$
- 4) Beregn nye positioner ud fra definitionen af hastighed:  $\frac{dr}{dt} = v$
- 5) Skift tidsskridt, og gå til punkt 1 så længe simuleringen skal køre.



proceduren. Hver gang vi har taget runden fra at beregne kræfter til at opdatere hastigheder og positioner, siger vi, at vi har taget et tidskridt af længden "dt". For at simuleringen skal være præcis, skal "dt" være et lille tidsrum. Det betyder, at vi skal tage rigtig mange tidskridt, og det er medvirkende til at sådanne simuleringer kan kræve rigtig meget computerkraft.

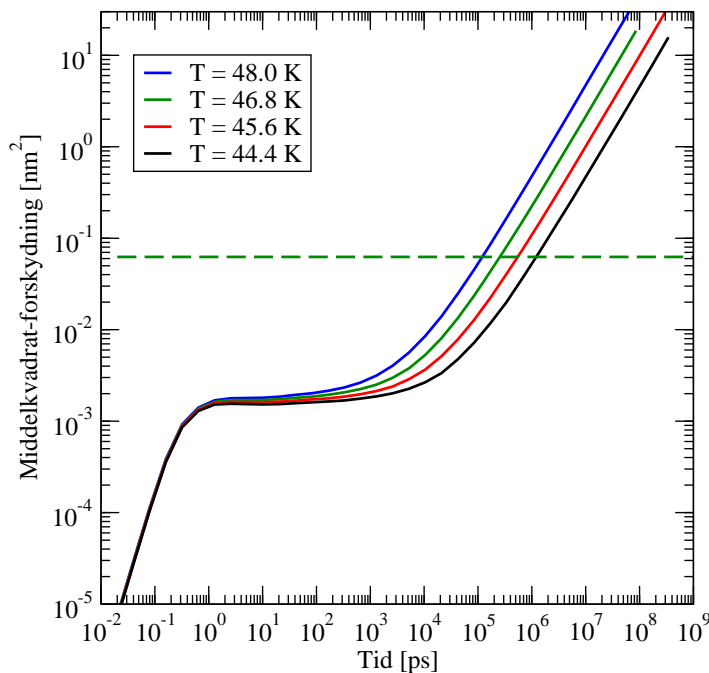
### Et kig ind i forskningslaboratoriet

På figur 5 kan du se et eksempel på et af de resultater, der kommer ud af vores computer simuleringer. Grafen viser resultater for nikkelfosfor-modellen ved fire forskellige temperaturer. Ved den laveste temperatur har simuleringen taget 4 måneder at gennemføre på supercomputeren.

Plottet på figuren er det, man kalder middelvadrat-forskydningen, som funktion af tiden i et dobbelt-logaritmisk plot. Middelvadrat-forskydningen er et mål for, hvor langt atomerne i gennemsnit har bevæget sig som funktion af den tid, der er gået. Mere konkret spørger man hvert atom "hvor langt har du bevæget dig", sætter det i anden potens, og til sidst tager man gennemsnittet af det tal for alle atomer i simuleringen.

Ud fra resultatet kan vi svare på, hvor lang tid der går, før atomerne i gennemsnit har bevæget sig en afstand, der svarer til deres egen diameter (markeret med den grønne stiplede linje i figur 5). Vi kan se, at når vi sænker temperaturen med 7.5% (fra 48.0 K til 44.4 K), vokser tiden det tager at flytte sig den afstand med mere end en faktor 10. Resultatet er karakteristisk for det, vi kalder viskøse væsker; en lille sænkning i temperaturen leder til, at atomerne bevæger sig **meget** langsommere. Hvor langsomt atomerne bevæger sig, og dermed hvor langsomt væsken flyder, måles med dens viskositet. Et eksempel på en viskøs væske fra hverdagen er honning; hvis du placerer honning i køleskabet bliver det langt mere tyktflydende, eller viskøst. Kold honning er så viskøst, at man ikke ser det flyde med det blotte øje, men lægger du et glas honning på siden i køleskabet, og venter længe nok, vil det flyde ud og danne en ny vandret honningoverflade. Det vil bare tage lang tid.

Andre eksempler på viskøse væsker er karamel og bitumen. Bitumen er det sorte materiale i asfalt, som de små sten er klistret ind i. Så uden at tænke over det har du sikkert gået eller cyklet på en viskøs væske i dag. Der findes rigtigt mange viskøse væsker, og vores forskning går ud på at forstå, hvorfor de opfører sig, som de gør. Ifølge Nobelpristager i fysik P. W. Anderson er dette et af de store uløste problemer i fysikken.



Figur 5. Middelvadratforskydningen for nikkelfosfor modellen, simuleret ved 4 forskellige temperaturer. Som det ses er der stor forskel i den tid (1. akse) det tager at bevæge sig samme afstand (2. akse).



## Hvorfor nikkel-fosfor modellen?

Grunden til, at vi simulerer nikkel-fosfor-modellen, er faktisk ikke, at vi er specielt interesserede i blandinger af nikkel og fosfor. Hvis vi var ude efter at bestemme fx viskositeten af en nikkel-fosfor blanding, vil det stadig være hurtigere og mere præcist at måle det i laboratoriet.

Når vi alligevel simulerer den blanding af atomer, er det fordi det er en af de simpleste modeller, som opfører sig som en viskøs væske. Det, at modellen er simpel, er en fordel, når vi skal simulere den, men også når vi selv skal analysere og forsøge at forstå, hvad det er, resultaterne viser, altså hvad det er, der sker i simuleringen.

På figur 6 kan du se en graf, hvor vi analyserer **formen** på middelvadrat-forskydningen. Som på Figur 5 har vi langs 1. akse tiden, og op ad 2. akse middelvadrat-forskydningen.

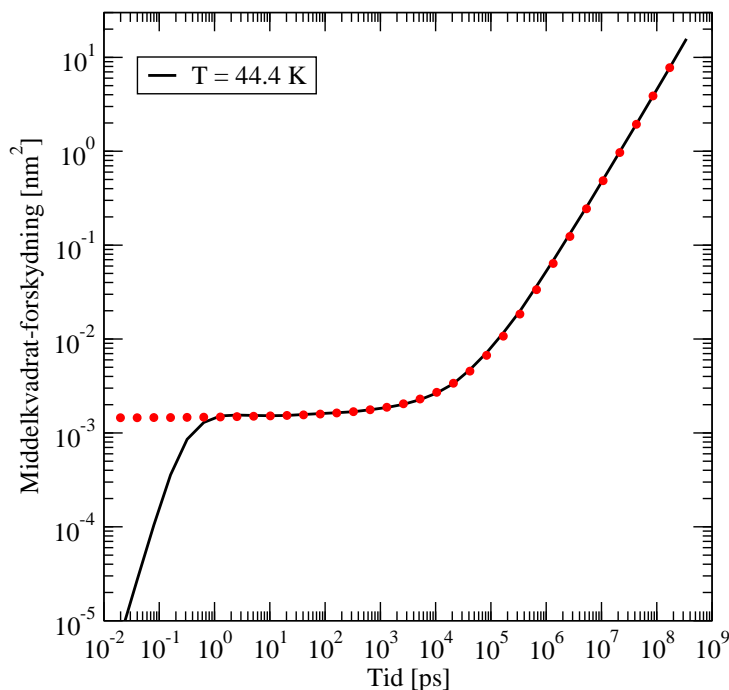
De røde cirkler er vores teoretiske hypotese for, hvordan formen ser ud, og det viser sig at passe rigtig godt med simuleringen (undtaget ved de korteste tider, hvor det ikke er meningen, det skal passe).

Hypotesen (de røde cirkler) bliver altså bekræftet af simuleringerne, og vi når derfor et lille stykke videre i vejen mod at løse de viskøse væskers gåde. Det er faktisk oftest sådan, vi bruger simuleringer, nemlig til at teste teorier og hypoteser. Filosofien er, at hvis vores teorier og hypoteser skal gælde generelt for viskøse væsker, så skal de også gælde for vores virtuelle modelvæsker, der kun lever i computeren. Sidste ende skal vores teorier og hypoteser selvfølgelig også testes med rigtige væsker i laboratoriet. Det gør vi i samarbejde med de af vores kollegaer, som er eksperimentalfysikere.

## Så er det din tur til at starte en simulation på supercomputeren

Til artiklen her hører et opgavesæt hvor du skal arbejde med forskellige blandinger af gasser. For at løse opgaverne, skal du bruge vores supercomputer. Her kan du prøve at sætte simulationer over og efter nogle minutter vil du modtage resultaterne direkte i browseren. Du kan selv definere parametre som temperatur og densitet (antal atomer per volumen) og meget andet. Grunden til, at du i opgavesættet kommer til at arbejde med gasser og ikke viskøse væsker, er, at det er hurtigere at simulere gasser, og dermed muligt at bestille en simulering og modtage data fra supercomputeren, inden for få minutter.

Rigtig god fornøjelse med arbejdet!



Figur 6. Middelvadrat-forskydningen for den laveste temperatur sammenlignet med vores teoretiske hypotese.





## Du kan læse Fysik på Roskilde Universitet

### Sådan er studiet

På Roskilde Universitet er [Fysik](#) og [Physics](#) en del af den [Naturvidenskabelige Bachelor](#). Det første år bliver du trænet i centrale naturvidenskabelige teorier, metoder og modeller på højeste niveau. På andet og tredje år specialiserer du dig i to fag. Det giver dig et stærkt fundament og gør dig til en dygtig fysiker, der samtidig kan tænke på tværs af de naturvidenskabelige fag.

### Fysik eller Physics kan læses i kombination med ét af flg. fag:

#### Fysik

- Environmental Biology
- Filosofi og Videnskabsteori
- Kemi

Se mere om kombinationsmulighederne på [ruc.dk/bachelor/fysik](http://ruc.dk/bachelor/fysik)

#### Physics

- Chemistry
- Computer Science
- Datalogi
- Mathematics
- Molecular Biology

Se mere om kombinationsmulighederne på: [ruc.dk/bachelor/physics](http://ruc.dk/bachelor/physics)

På kandidatuddannelsen kan du læse [Physics and Scientific Modelling](#).

### Sådan er din hverdag

Fra start til slut i studiet er du tæt på forskerne. Gennem dine projekt- og kursusvalg arbejder du videnskabeligt og kan være med til at skabe innovative løsninger på virkelighedens problemer. Dit projektarbejde kan måske indgå som en del af et større forskningsprojekt, eller du kan samarbejde med eksterne virksomheder og organisationer, hvis du har lyst til det.

På hvert semester arbejder du halvdelen af tiden med kurser inden for det naturvidenskabelige område. Nogle kurser er obligatoriske og giver dig den nødvendige faglige ballast. Men der er også kurser, du selv vælger efter interesse. Den anden halvdel af tiden arbejder du med et projekt.

Projektarbejdsformen skærper din evne til at analysere og samarbejde, og du kan samtidig fordybe dig i det, du finder fagligt interessant. Karrieremæssigt lærer du således at mestre en række af de færdigheder, erhvervslivet efterspørger allermost; evnen til at projektlede, samarbejde, kommunikere, nytænke og løse komplekse problemer.

Kig



Åbent Hus



Uddannelse



Karriere



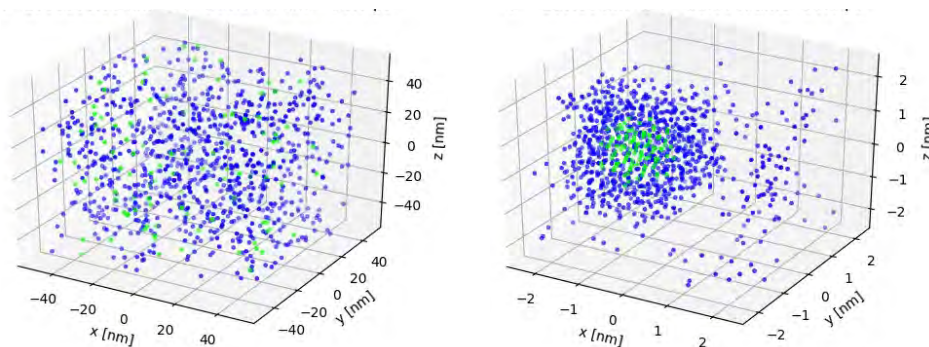
# Simulering af gasser og væsker på RUC's supercomputer

I denne opgave skal I bruge GPU clusteret på Roskilde Universitet til at lave simuleringer af jeres helt egen blanding af ædelgas-atomer. Som I nok husker, er ædelgasserne de grundstoffer, der ligger længst til højre i det periodiske system, nemlig: He, Ne, Ar, Kr, Xe og Ra.

Et ædelgas-atom vekselvirker meget svagt med andre atomer – det forklarer, hvorfor de ikke danner molekyler, og derfor er det forholdsvis let at modellere dem.

Simuleringerne på supercomputeren sættes i gang over nettet. Som input til simuleringerne skal I tage nogle valg: Antal atomer og hvilke atomer der er tale om, hvilken densitet simuleringen skal køre med, og hvilket temperaturinterval simuleringen køres over.

Når simuleringerne er færdige, får I en figur, som viser trykket som funktion af temperatur og et par videoer, som viser atomernes bevægelser ved henholdsvis den højeste og den laveste temperatur.



Figur 1: Et eksempel fra den He-Ne (helium-neon) blanding, der bruges i en såkaldt He-Ne laser. Til venstre er der lavt tryk og stuetemperatur. Til højre er der højt tryk og lav temperatur (10 K).

## Udarbejdet af:



**Thomas Schröder**  
Professor i fysik  
Roskilde Universitet

Forsker i dynamikken i uordnede systemer, herunder: Viskøse (sejtflydende) væsker, frekvensafhængig ledningsevne i glasser samt såkaldte "random walks" på fraktale strukturer. Udvikler teori og laver simuleringer på supercomputer.



**Nick Bailey**  
Lektor i fysik  
Roskilde Universitet

Udvikler og tester teorier for materialer, herunder væsker og glas, ved brug af supercomputer.

- Opgaverne løses med udgangspunkt i artiklen: "Computer-simulering i fysik - hvorfor fysikere på Roskilde Universitet har bygget en af Danmarks hurtigste supercomputere" og filmen "Computersimulering af gasser og væsker", som begge findes på <https://ruc.dk/undervisningspakke-simulering>
- Læs mere om materialeforskning på Roskilde Universitet på [www.ruc.dk/glas-og-tid](http://www.ruc.dk/glas-og-tid)
- Lær mere om dine karrieremuligheder inden for fysik ved at se filmen om Rasmus Godiksen, kandidat fra RUC, som arbejder med simulering og modellering i virkeligheden. Se <https://ruc.dk/karriereprofil-rasmus-godiksen>



## Opgave 1: Find en realistisk densitet til simuleringen

Før I kan indtaste rimelige og realistiske værdier i simuleringen, besvares de følgende 3 spørgsmål.

1. Hvor mange atomer er der i en liter væske?

*Hint: Tænk på vægten af en liter (fx vand) og massen af et typisk atom. Bemærk: Der findes ikke et præcist svar til dette spørgsmål - der er tale om en størrelsesorden (altså indenfor en faktor ti).*

2. Hvor mange atomer er der i en liter gas?

Som hjælp anbefaler vi, at man bruger idealgasloven. Den version I kender, ser nok sådan ud:  $pV=nRT$ , hvor  $P$  er trykket,  $V$  er volumen,  $n$  er antal mol i gassen,  $R$  er gaskonstanten og  $T$  er temperaturen (den absolutte temperatur, målt i Kelvin).

Da vi er mere interesserede i antal atomer ( $N$ ) og ikke antal mol ( $n$ ), giver det mening at huske, at Avogadros tal  $N_A$  er antal atomer i et mol af et stof. Derfor kan vi sige at  $N=nN_A$ , altså, at antallet af atomer er lig med, hvor mange mol af stoffet der er ganget med, hvor mange atomer der er per mol.

Med ligningen, kan vi sætte  $n=N/N_A$  i den idealgaslov du normalt bruger, hvilket giver os:

$$pV = N/N_A RT = N (R/N_A) T.$$

Forholdet i parenteser  $R/N_A$  har et andet navn, nemlig Boltzmanns konstant:  $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ . På denne måde kommer vi frem til "fysikerens version" af idealgasloven:

$$pV = Nk_B T$$

3. Hvor mange atomer er der i en kubik-nanometer gas?

*Hint: Brug svaret fra spørgsmål B og definitionen på en kubik-nanometer.*

## Opgave 2: Sæt en simulering over

Find hjemmesiden [euclid.ruc.dk/gas](http://euclid.ruc.dk/gas) og følg vejledningen her, for at starte en simulering:

1. Indtast antal atomer af He, Ne, Ar, Kr, Xe og Ra. For at holde simuleringstiden rimelig kort bør I ikke vælge meget mere end ca. tusind atomer i alt. (GPUerne kan ellers klare op til et par millioner).
2. Indtast en densitet som antal atomer per kubik-nanometer, baseret på, hvad I har regnet i øvelsen ovenfor.
3. Indtast en start-temperatur og en slut-temperatur. Der køres 10 simuleringer i alt, ved 10 temperaturer fra start til sluttemperaturen. Simuleringen starter altid med den højeste temperatur og køles derefter til den laveste temperatur.
4. Navngiv jeres simulering.
5. Klik på "Send til simulering". Simuleringen sendes nu til supercomputeren på RUC.
6. Linket "Gå til resultatsiden", fører jer over til den side, hvor resultaterne fra simuleringen bliver lagt op, når de er klar. Hele processen tager et par minutter, og tingene bliver vist i takt med, at data kommer fra supercomputeren. Det kan være nødvendigt at trykke refresh/reload på din browser.

Simuleringen starter med den højeste temperatur og køles så ned i 10 trin.

Resultaterne består af:

- En lille video af både den første og den sidste simulering (ved hhv. den højeste og den laveste temperatur).
- En figur, hvor man ser trykket som funktion af temperaturen.

De relevante filer vises ved toppen og kan downloades: Videoerne som .mp4 filer, data for trykket som .dat fil og figuren som en .png fil. De parametre, I har brugt, findes i filen simuleringsparametre.txt. De kan også være smarte at gemme som note på opsætningen.

## Opgave 3: Undersøgelse af ædelgasblandinger

1. Find en densitet og et temperatur-interval, hvor idealgasloven gælder.

Hvis vi isolerer trykket  $p$  i idealgasloven, får vi

$$p = (N/V) k_B T$$

hvor  $N/V$  er antal atomer/molekyler per volumen, også kaldet densiteten  $\rho$  (rho). Ligningen viser, at et plot af trykket 'p' som funktion af temperaturen 'T', skal være en ret linie der går gennem (0,0) - hvis ideal-gas loven gælder. Denne linje er af computeren automatisk lagt ind på p,T-plottet.

*Hint: Hvis I ser klumper af atomer, er det et tegn på, at gassen begynder at kondensere til en væske, så kan man ikke forvente, at idealgas-loven gælder. Tænk over om I skal hæve eller sænke densiteten.*

2. Når I har fundet en densitet og et temperaturområde, hvor idealgasloven gælder, så find et område, hvor gassen begynder at kondensere.



## Ekstraopgave til særligt interesserede

Som I har set, gælder idealgas-ligningen ikke altid – den er en god approksimation til virkeligheden ved lave densiteter. Fysikere har gennem tiderne arbejdet på at kunne beskrive gasser og væsker mere præcist. En af de ligninger, man har foreslået, er den såkaldte Van der Waals ligning. For en given gas, ved konstant densitet, forudsiges trykket med denne ligning:  $p = A T - B$ , hvor A og B er konstanter.

I kan læse mere om Van der Waals ligning på hjemmesiden: <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Kinetic/waal.html>. (Bemærk, at på hjemmesiden er Van der Waals ligningen opskrevet på en lidt anden måde, ud fra hvilken man udleder, hvordan A og B afhænger af densiteten).

Prøv at finde et område (densitet og temperatur-interval), hvor Van der Waals ligningen gælder, men hvor idealgasloven ikke gælder. Ved at downloade filen 'isochore.dat' fra listen af filer i jeres egen simulering, kan I få data for tryk og temperatur, som I så kan fitte til en ret linje. Er der områder, hvor den ikke fitter pænt?

## Du kan læse Fysik på Roskilde Universitet

### Sådan er studiet

På Roskilde Universitet er [Fysik](#) og [Physics](#) en del af den [Naturvidenskabelige Bachelor](#). Det første år bliver du trænet i centrale naturvidenskabelige teorier, metoder og modeller på højeste niveau. På andet og tredje år specialiserer du dig i to fag. Det giver dig et stærkt fundament og gør dig til en dygtig fysiker, der samtidig kan tænke på tværs af de naturvidenskabelige fag.

### Fysik eller Physics kan læses i kombination med ét af flg. fag:

#### Fysik

- Environmental Biology
- Filosofi og Videnskabsteori
- Kemi

Se mere om kombinationsmulighederne på [ruc.dk/bachelor/fysik](http://ruc.dk/bachelor/fysik)

#### Physics

- Chemistry
- Computer Science
- Datalogi
- Mathematics
- Molecular Biology

Se mere om kombinationsmulighederne på: [ruc.dk/bachelor/physics](http://ruc.dk/bachelor/physics)

På kandidatuddannelsen kan du læse [Physics and Scientific Modelling](#).

### Sådan er din hverdag

Fra start til slut i studiet er du tæt på forskerne. Gennem dine projekt- og kursusvalg arbejder du videnskabeligt og kan være med til at skabe innovative løsninger på virkelighedens problemer. Dit projektarbejde kan måske indgå som en del af et større forskningsprojekt, eller du kan samarbejde med eksterne virksomheder og organisationer, hvis du har lyst til det.

På hvert semester arbejder du halvdelen af tiden med kurser inden for det naturvidenskabelige område. Nogle kurser er obligatoriske og giver dig den nødvendige faglige ballast. Men der er også kurser, du selv vælger efter interesse. Den anden halvdel af tiden arbejder du med et projekt.

Projektarbejdsformen skærper din evne til at analysere og samarbejde, og du kan samtidig fordybe dig i det, du finder fagligt interessant. Karrieremæssigt lærer du således at mestre en række af de færdigheder, erhvervslivet efterspørger allermost; evnen til at projektledere, samarbejde, kommunikere, nytænke og løse komplekse problemer.

Kig



Åbent Hus



Uddannelse



Karriere



# Computersimulering af gasser og væsker

**Vi inviterer indenfor hos Fysik på RUC og giver dig mulighed for at lave dine egne simuleringer på en af Danmarks hurtigste supercomputere. Sammen med andre gymnasieelever med interesse for fysik laver du simuleringer, som kan bruges i dit SRP/SOP-projekt. Vores øvelser lægger op til, at du arbejder med din egen faglige vinkel.**

I øvelsen arbejdes der med Molecular Dynamics, specifikt med det software der kaldes RUMD, der er udviklet på Roskilde Universitet. Eleven kommer til at opnå indsigt i, hvilke typer af spørgsmål, forskerne typisk leder efter svar på, og i computersimulering af atomer og molekyler - og kommer retur til gymnasiet med resultater fra en eller flere simuleringer i RUMD.

## Hvad kommer du igennem på dagen?

Du får mulighed for selv at lave simuleringer på en af Danmarks hurtigste computere. Du definerer på forhånd hvilket

system, der skal simuleres på dagen, altså hvilke blandinger af atomer/molekyler, temperaturer, tryk og densiteter, der skal en tur gennem RUMD (Roskilde University Molecular Dynamics) og supercomputeren. Vinklen skal være forberedt af dig før fremmøde til SRP/SOP-øvelsen på RUC, så der på forhånd ligger en idé om, hvad der skal undersøges med RUMD og hvorfor.

Vi ser desuden i SRP/SOP-øvelsen nærmere på de simuleringsmetoder, forskerne på Roskilde Universitet anvender i deres forskning, og du kommer til at lære om, hvorfor vi anvender computersimulering, ligesom vi ser på, hvilke indsigter, vi kan få ud af en computersimulering.

## Udarbejdet af:



**Thomas Schröder**  
Lektor i fysik  
Roskilde Universitet

Bruger computerbaserede modeller til at udvikle og teste teorier for materialers egenskaber.



**Nick Bailey**  
Lektor i fysik  
Roskilde Universitet

Udvikler og tester teorier for materialer, herunder væsker og glas, ved brug af supercomputer.

## Målgruppe

For dig som skal skrive studieretningsprojekt (SRP) eller studieområdeprojekt (SOP) i 3.G med fysik som det ene fag.

## Tilmelding

Tilmeldingsfrist og ansøgningsformular finder du på [www.ruc.dk/srp-sop](http://www.ruc.dk/srp-sop).

Pladserne bliver fordelt efter først-til-mølle princippet. Hvis der er mange tilmeldinger, prioriterer vi elever med ABB-niveau i naturfaglige fag.

## Varighed

1 dag

## Antal elever

6 pr. hold

## Hvornår

Afholdes 2 gange årligt: Februar og november. Tilmeldingsfrist og dato for afholdelse annonceres på [www.ruc.dk/srp-sop](http://www.ruc.dk/srp-sop).



## Eksempler

Ædelgasser og blandinger af disse  
 Små molekyler  
 Metaller (fx Cu, Ni, Au, Ag)

## Vinkler

- Hvornår omdannes en gas til væske? (Undersøgelse af fasediagrammer)
- Hvordan fungerer en varmepumpe (Termodynamiske kreds-processer)
- Hvad styrer atomernes tendens til at kondensere fra gas til væske?

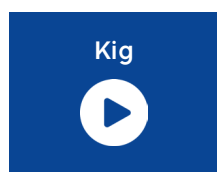
## Relevante kombinationsfag

Kemi  
 Matematik  
 Samfundsfag  
 Historie

## Litteratur til forberedelse og yderligere viden

Til download på <https://ruc.dk/undervisningspakke-simulering>

Inden øvelsesdagen forventes du at have læst artiklen og set filmen fra RUC's undervisningspakke i Fysik: "Simulering af gasser og væsker".



# Computersimulering af gasser og væsker

Computerbaserede simuleringer er afgørende i moderne forskning. Simuleringer giver unikke muligheder for at teste teorier og komme nærmere forklaringer på, hvordan atomer og molekyler opfører sig ved fænomener, der normalt er skjult for os.

I denne workshop får I mulighed for selv at lave simuleringer på en af Danmarks hurtigste computere. Udover at arbejde med simuleringsmetoder, og finde ud af hvad 3D-computer-spil har med simuleringerne at gøre, kommer I på workshoppens to dele til at arbejde med:

- Hvornår omdannes en gas til væske og omvendt? Hver gruppe (2 personer) simulerer ved en bestemt densitet, og tilsammen finder deltagerne på workshoppen det såkaldte gas-væske fasediagram – altså et slags 'landkort' over, hvornår systemet er en gas, hvornår det er en væske - og hvornår det er en blanding.
- Test af "Isomorf-teorien". Isomorf-teorien er en teori for væskers opførsel, som vi har udviklet på Roskilde Universitet. Ved hjælp af simuleringer, tester vi, hvilken del af fasediagrammet teorien gælder for.

## Udarbejdet af:



**Thomas Schröder**  
Professor i fysik  
Roskilde Universitet

Forsker i dynamikken i uordnede systemer, herunder: Viskøse (sejtflydende) væsker, frekvensafhængig ledningsevne i glasser samt såkaldte "random walks" på fraktale strukturer. Udvikler teori og laver simuleringer på supercomputer.



**Nick Bailey**  
Lektor i fysik  
Roskilde Universitet

Udvikler og tester teorier for materialer, herunder væsker og glas, ved brug af supercomputer.

## Målgruppe

Elever på matematiske-/naturvidenskabelige linjer på HTX, STX, EUX og HF med fysik på A-niveau.

## Forberedelse inden besøget

I skal have arbejdet med RUC's undervisningsakke "Simulering af gasser og væsker", herunder set filmen, læst artiklen og arbejdet med opgaverne, inden besøget på RUC.

## Praktisk

Workshoppen vil vare 6 timer inkl. en frokostpause på RUC. I kan spise jeres medbragte mad eller købe i RUC's kantine.

## Tilmelding

Klassevis til projektkoordinator Dorthe Vedel, [vedel@ruc.dk](mailto:vedel@ruc.dk), med ønske om foretrukken ugedag og dato for besøget på RUC.

## Karrierelæring

På RUC møder I en RUC-studerende, som fortæller om uddannelse og studieliv. Desuden kan I på [ruc.dk](http://ruc.dk) sammen med gymnasiepakken "Simulering af gasser og væsker" finde film om RUC-kandidater i fysik, som arbejder med simulering og modellering.



## Program for dagen

- 9.00** Velkommen + foredrag: "Computersimulering af gasser og væsker"
  - 9.45** Simuleringer i grupper af 2 personer: "Byg et fasediagram"
  - 11.30** Opsamling på resultater for fasediagram
  - 12.00** Frokostpause og rundvisning
  - 12.50** RUC som studiested
  - 13.15** Foredrag: Introduktion til Isomorf-teorien
  - 13.45** Simuleringer i grupper af 2 personer: "Test af Isomorf-teorien"
  - 15.15** Opsamling og afslutning
- 

Kig



Åbent Hus



Uddannelse



Karriere





# Hvad er en glas?

Vand fryser til is ved 0 grader celsius og ændrer pludselig sine egenskaber fra at være flydende til at blive fast og krystallinsk. En glas har ikke en sådan overgang til en krystallinsk fase. Dannelsen af en glas sker derimod gradvist ved, at den opvarmede væske bliver mere og mere sejflydende og til sidst synes fast. Glasser findes mange steder, også blandt ting du putter i munden.

Ved det, der kaldes glasovergangen, kan man for væsker observere fænomenet viskoelasticitet. Et viskoelastisk stof vil være fast, når der måles over korte tider, men flydende over lange tider.

For mange væsker er det muligt at underafkøle dem altså således, at væsken forbliver flydende under frysepunktet. Køles de tilstrækkeligt, vil de dog på et tidspunkt glasne.



## Udarbejdet af:



**Tage Christensen**  
Lektor i fysik  
Roskilde Universitet

Udvikler og arbejder med eksperimentelle metoder til at måle væsker og glassers mekaniske og termiske egenskaber, fx ved at bruge piezoelektriske transducere.

## Målgruppe

Elever på matematiske-/naturvidenskabelige linjer på HTX, STX, EUX og HF med fysik på B-niveau.

## Max antal deltagere

60

## Forberedelse inden besøget

Eleverne forventes at have set filmen "Eksperiment og simulering" og læst artiklen "Flydende eller fast".

## Tilmelding

I kan tilmelde jer oplægget, når Naturvidenskab på RUC inviterer indenfor ved Nat-dag på RUC. Arrangementet afholdes i marts og september, og I tilmelder jer klassevis på [Nat-dag.ruc.dk](http://Nat-dag.ruc.dk). I kan høre en række faglige oplæg inden for Fysik, Kemi, Matematik, Datalogi, Biotek og Biologi - og kan således selv sammensætte et program, der passer til jeres behov og ønsker.

## Kontakt

Ved spørgsmål om tilmelding og afholdelse kontakt projektkoordinator Dorthe Vedel, [vedel@ruc.dk](mailto:vedel@ruc.dk). Spørgsmål vedrørende det faglige skal rettes til oplægsholder.

## Varighed

45 minutter

Kig



Åbent Hus



Uddannelse



Karriere



# Rasmus Godiksen – kandidat i fysik og matematik

## Quant i Dansk Bank Cand. scient. i fysik og matematik fra Roskilde Universitet

Se filmen om Rasmus, som bruger matematiske modeller til at beregne risici på finansielle transaktioner; altså de kontrakter, som banken har med deres kunder.

Han fortæller om sit arbejde som quant, at det er faktisk ikke så usædvanligt, at fysikere arbejder som quant'er, fordi man som fysiker har lært at modellere - altså at beskrive verden med matematik. Hans hverdag består især af 3 ting: Modellering, finansiering og IT.

Du kan høre om, hvilke kompetencer fra sin uddannelse han særligt bruger i sit arbejdsliv, og om hvordan han kan lide at se resultater - både i sit arbejde i banken, men også i sit civile liv.

Se filmen på [ruc.dk/karriereprofil-rasmus-godiksen](http://ruc.dk/karriereprofil-rasmus-godiksen)

Du kan se flere karriereprofiler på [www.ruc.dk/karriereprofiler](http://www.ruc.dk/karriereprofiler). Vi følger bl.a. også Ditte Gundermann, som er senior engineer hos Hempel a/s og arbejder med materialefysik. Begge er uddannet på RUC med fysik som det ene fag. Filmene er en del af RUC's undervisningspakke: "Simulering af gasser og væsker", som findes på [www.ruc.dk/undervisningspakke-simulering](http://www.ruc.dk/undervisningspakke-simulering)



## Karriere

På [www.ruc.dk/karriereprofiler](http://www.ruc.dk/karriereprofiler) kan du finde en række film og historier om kandidater fra RUC, som fortæller om, hvordan de har brugt deres uddannelse i arbejdslivet.

Lær mere om fysikuddannelsen på [www.ruc.dk/fysik-paa-roskilde-universitet](http://www.ruc.dk/fysik-paa-roskilde-universitet)

Du kan møde forskerne på Fysik og i de andre naturvidenskabelige fag på Nat-dag på RUC, som afholdes to gange årligt.

Se mere på [www.nat-dag.ruc.dk](http://www.nat-dag.ruc.dk)

Kig



Åbent Hus



Uddannelse



Karriere

