



Problem Fermiego – Pasty – Ulama

Dr hab. Ryszard KUTNER

Rozwiązanie zadania M 517.

Zauważmy, że jeśli $z \leq 1/2$, to

$$f\left(\frac{x+y}{2}, \frac{x+y}{2}, z\right) \geq f(x, y, z).$$

Istotnie, nierówność

$$\begin{aligned} &\left(\frac{x+y}{2}\right)^2 + \left(\frac{x+y}{2}\right)z + \\ &+ \left(\frac{x+y}{2}\right)z - 2\left(\frac{x+y}{2}\right)^2 z \geq \\ &\geq xy + xz + yz - 2xyz \end{aligned}$$

jest równoważna z

$$\left(\frac{x+y}{2}\right)^2 (1-2z) \geq xy(1-2z),$$

a przy założeniu, że $1-2z \geq 0$,

wystarczy, by

$$\left(\frac{x+y}{2}\right)^2 \geq xy,$$

co jest już oczywiste.

Ustalmy teraz liczby x, y, z . Jedna z nich (ze względu na symetrię można przyjąć, że jest to z) nie przekracza $1/2$. Mamy więc

$$f\left(\frac{x+y}{2}, \frac{x+y}{2}, z\right) \geq f(x, y, z).$$

Teraz również $\frac{x+y}{2} \leq \frac{1}{2}$. Możemy więc powtórzyć powyższą operację, biorąc tym razem najmniejszy i największy argument funkcji f . W rezultacie otrzymamy trzy ciągi: (a_n) , (b_n) , (c_n) , takie, że $f(a_n, b_n, c_n) \geq f(x, y, z)$, ponadto

$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \lim_{n \rightarrow \infty} b_n = \lim_{n \rightarrow \infty} c_n = \frac{1}{3}$,
bo (oznaczając $m_n = \min(a_n, b_n, c_n)$,
 $M_n = \max(a_n, b_n, c_n)$) mamy z jednej strony stałą $a_n + b_n + c_n = 1$, z drugiej $M_{n+1} - m_{n+1} \leq \frac{1}{2}(M_n - m_n)$, czyli $M_n - m_n \rightarrow 0$.

Ostatecznie, ze względu na ciągłość funkcji f ,

$$\frac{7}{27} = f\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right) \geq f(x, y, z),$$

czego należało dowieść.



Rozwiązanie zadania M 518.

Niech T_n oznacza średnią liczbę rzutów, potrzebną do zakończenia eksperymentu z n monetami.

Oczywiście

$$T_0 = 0, T_1 - 1 = \frac{1}{2}T_1 + \frac{1}{2}T_0,$$

bowiem pierwszy rzut daje z prawdopodobieństwem $1/2$ reszkę – wtedy eksperyment jest zakończony, i z prawdopodobieństwem $1/2$ orła – wtedy jesteśmy w sytuacji wyjściowej. Zatem $T_1 = 2$. Dalej,

$$T_2 - 1 = \frac{1}{4}T_2 + \frac{1}{2}T_1 + \frac{1}{4}T_0,$$

skąd $T_2 = \frac{5}{2}$, wreszcie

$$T_3 - 1 = \frac{1}{8}T_3 + \frac{3}{8}T_2 + \frac{3}{8}T_1 + \frac{1}{8}T_0,$$

wzrost $T_3 = \frac{23}{4}$.

W latach czterdziestych i na początku lat pięćdziesiątych naszego stulecia pojawiły się pierwsze elektroniczne maszyny cyfrowe, czyli komputery – najpierw ENIAC, a potem UNIVAC I i MANIAC I. Dzięki dużej, jak na owe czasy, szybkości wykonywania obliczeń stworzyły one niebywałą okazję numerycznego badania układów o wielkiej liczbie stopni swobody. Okazja ta została wykorzystana, a wagę prac powstałych w latach pięćdziesiątych, mierzoną ich wpływem na współczesne badania w fizyce czy nawet ogólniej – w naukach przyrodniczych – wprost trudno przecenić. Narodziła się wówczas „fizyka komputerowa”, a dokładniej mówiąc jej najstarsza gałąź, tzw. fizyka symulacyjna.

Podstawowe metody fizyki komputerowej zostały sformułowane w serii publikacji z lat 1953 – 1959. Pierwsza z nich, klasyczna dziś praca N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, W.N. Rosenblutha, A.H. Teller i E. Tellera *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines* („Obliczanie równania stanu z użyciem szybkich maszyn liczących”) zapoczątkowała używanie komputerów do symulowania procesów losowych i wyznaczania metodami Monte Carlo własności termodynamicznych układów wieloatomowych. Do omówienia tej pracy i płynących z niej konsekwencji powrócimy, być może, niebawem – prosty przykład zastosowania elementów metody Monte Carlo zawierała opisana w *Delcie* 9/1986 symulacja ruchów Browna. Tutaj zajmiemy się innym kierunkiem symulacji komputerowych polegającym na numerycznym rozwiązywaniu równań ruchu układów wielocząstkowych – tzw. metodami „dynamiki molekularnej”. Metodę tego typu jako pierwsi zastosowali w 1955 roku E. Fermi, J. Pasta i S. Ulam badając numerycznie nieharmoniczne drgania kilkudziesięciu mas połączonych w łańcuch nieliniowymi sprężynkami (nie spełniającymi prawa Hooke’a). B. Alder i T. Wainwright sformułowali następnie metody pozwalające efektywnie analizować zagadnienia związane z zachowaniem się setek, a nawet tysięcy oddziałujących ze sobą molekuł w gazie, cieczy lub ciele stałym. W pierwszej ich pracy wyniki komputerowej symulacji ruchu atomów sieci krystalicznej przedstawione były w postaci „filmu komputerowego” – serii migawkowych ujęć w kilku następujących po sobie momentach. Wymieniając współtwórców metody dynamiki molekularnej należy wspomnieć G. Vineyarda (badał on własności defektów powstałych w metalach pod wpływem promieniowania) oraz A. Rahmana, który symulował zachowanie się ciekłego azotu, a wyniki ilościowe otrzymane przez niego mogły już być bezpośrednio porównywane z danymi doświadczalnymi. Prześledźmy pokrótce rozumowanie Fermiego, Pasty i Ulama.

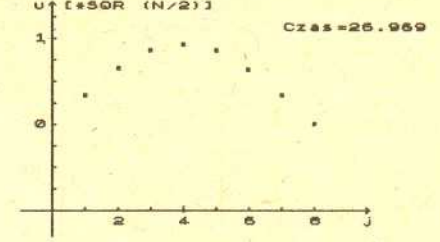
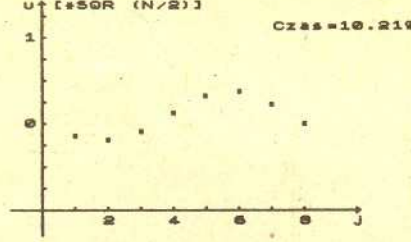
Sformułowanie problemu Fermiego – Pasty – Ulama (FPU)

Dobrze znany był fakt, że drgania układu liniowego – tzn. układu, w którym siły są proporcjonalne do wychyleń z położenia równowagi – można przedstawić jako złożenie drgań harmonicznych o częstościach charakterystycznych dla danego układu, przy czym drgania o różnych częstościach są niezależne, a tym samym nie ma między nimi przepływu energii. Jeżeli początkowo zostanie wzbudzone drganie o ustalonej częstości, to już żadne inne drganie nie powstanie. Najprostszym przykładem jest tu układ mas połączonych w łańcuch sprężynkami, których naprężenia są proporcjonalne do zmian ich długości. E. Fermi, J. Pasta i S. Ulam chcieli sprawdzić na drodze numerycznej (inaczej nie było to możliwe), jak wpływa na zachowanie się takiego układu wprowadzenie dodatkowego, nieliniowego oddziaływania. Do owego czasu przyjmowano bowiem na wiarę, że energia powinna się podzielić równomiernie między drgania o różnych częstościach, czyli stopnie swobody (zasada ekwipartycji energii). Pojawienie się pierwszych komputerów stworzyło od razu szansę zweryfikowania tego założenia.


```

30 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
40 REM * PASTY-ULAMA *
50 DIM w(32): REM Prędkość fali
60 DIM v(32): REM Położenie
70 DIM u(32): REM Wychylenie
80 DIM x(32): REM Potencjał
90 DIM t=54: REM Czas
100 LET dt=1/2: REM Elementarny
110 LET r = Numer kolejnego czasu
120 LET M=1: REM Masa
130 LET N=8: REM Liczba atomów
140 LET K=1: REM Stała
150 LET s=1: REM Sprężystość Hooke'a
160 LET alfa=1/4: REM Współczynnik
170 LET tau=2*N*SQR(M*s/K): REM Liczba krótko-
180 LET tau/dt = Liczba kroków
190 LET st=4: REM at - Czynniki
200 LET skalu=1: REM Skala
210 LET skalu=1: REM Skala
220 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
230 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
240 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
250 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
260 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
270 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
280 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
290 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
300 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
310 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
320 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
330 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
340 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
350 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
360 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
370 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
380 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
390 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
400 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
410 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
420 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
430 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
440 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
450 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
460 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
470 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
480 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
490 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
500 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
510 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
520 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
530 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
540 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
550 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
560 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
570 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
580 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
590 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
600 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
610 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
620 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
630 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
640 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
650 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
660 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
670 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
680 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
690 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
700 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
710 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
720 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
730 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
740 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
750 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
760 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
770 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
780 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
790 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
800 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
810 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
820 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
830 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
840 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
850 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
860 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
870 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
880 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
890 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
900 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
910 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
920 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
930 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
940 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
950 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
960 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
970 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
980 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
990 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****
1000 REM *****PROGRAM FERMIEGO*****

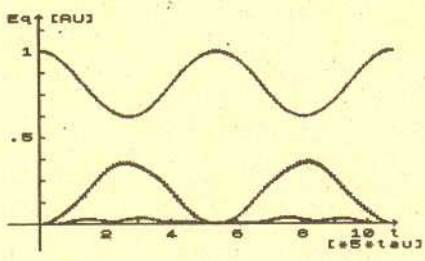
```



Rys.2c

Rys.2d

Są to przykładowe stany osiągnięte przez nasz drgający łańcuch. Na osi poziomej odłożone zostały położenia równowagi mas, a na pionowej ich wychylenia – w ten sposób, dla zwiększenia czytelności, drgania podłużne przedstawiamy jako fale poprzeczne. Jak widać (rys.2a), początkowo została wzbudzona fala (mod) o największej możliwej długości $\lambda_1 = 2sN$ i okresie $T_1 = 2N\sqrt{ms/k}$ (właśnie T_1 przyjęliśmy w naszych obliczeniach za jednostkę czasu). W miarę upływu czasu wzbudzają się także dalsze mody – oczywiście kosztem energii pierwszego: drugi (rys.2c) o długości fali $\lambda_2 = sN$ i okresie $T_2 = N\sqrt{ms/k}$ oraz trzeci o $\lambda_3 = \frac{2}{3}sN$ i $T_3 = \frac{2}{3}N\sqrt{ms/k}$. Po uruchomieniu pierwszego programu można zaobserwować, jak płynnie przechodzą w siebie poszczególne mody. Najważniejsze jest jednak spostrzeżenie, że po upływie zaledwie 27 jednostek czasu układ powraca do stanu wyjściowego (rys.2d). Innymi słowy, energia zgromadzona początkowo w modzie pierwszym nie rozkłada się równomiernie na inne mody (stopnie swobody), jakby to wynikało z zasady ekwipartycji energii, lecz „przelewa” się rytmicznie między nimi, aby po upływie stosunkowo krótkiego czasu powrócić całkowicie do modu początkowego. Obserwację tę potwierdzają wyniki obliczeń programu drugiego (rys.3).



Rys.3

Tym razem na osi poziomej odłożono czas, a na pionowej całkowitą energię danego modu (uwzględniono tylko trzy pierwsze).

Początkowo, jak to przewiduje zasada ekwipartycji, całkowita energia pierwszego modu – E_1 maleje, natomiast drugiego – E_2 i trzeciego – E_3 rośnie. Jednakże już po upływie kilkunastu jednostek czasu rozpoczyna się proces odwrotny, który właśnie po blisko dwudziestu siedmiu jednostkach czasu z bardzo dobrym przybliżeniem prowadzi do powrotu układu do stanu wyjściowego, po czym wszystko zaczyna się od początku. To właśnie ten nieoczekiwany powrót został odkryty przez Fermiego, Pastę i Ulama dając początek fizyce symulacyjnej.

Od tamtej pory problem FPU był szczegółowo badany. N. Saito ze współpracownikami odkrył, na przykład, progowy charakter zjawiska powrotu. Innymi słowy, nie jest aż tak źle z zasadą ekwipartycji, bowiem dostarczenie układowi dużej ilości energii (powyżej pewnego progu) powoduje, że zachowuje się on już „jak należy”. Ogólnie mówiąc, problem FPU zwrócił uwagę na zagadnienia nieliniowe w fizyce. Badania ruszyły pełną parą i zostały uwieńczone sukcesem w postaci numerycznego odkrycia solitonu, ale to już historia, którą opowiem w następnym artykule.

Na zakończenie pragnę zauważyć, że zamieszczone programy dobrze nadają się do samodzielnego eksperymentowania. Szczególnie interesujące byłoby ćwiczenie polegające na wykreśleniu przez nasz mikrokomputer trajektorii zakreślonej przez wybraną masę w przestrzeni fazowej – na poziomej osi odkładamy położenie, a na pionowej pęd w tej samej chwili. Jak będzie wyglądała taka trajektoria w zależności od wartości energii całkowitej, dostarczonej układowi na początku? Szczególnie program drugi nadaje się dobrze do takiej modyfikacji, gdyż już w obecnej postaci oblicza zarówno położenia, jak i prędkości wszystkich mas tworzących nasz łańcuch.