УДК 534:517.9

Наталія Сомик,
студентка факультету математики, фізики
і комп'ютерних наук
Вінницького державного педагогічного університету
імені Михайла Коцюбинського,
Сергій Бак,
докт. фіз.-мат. наук, професор,
професор кафедри математики та інформатики
Вінницького державного педагогічного університету
імені Михайла Коцюбинського,
Галина Ковтонюк,
канд. пед. наук, доцент,
доцент кафедри математики та інформатики
Вінницького державного педагогічного університету
імені Михайла Коцюбинського

ЗАДАЧА І ПАРАДОКС ФЕРМІ-ПАСТИ-УЛАМА

Анотація. *У статті висвітлено передумови і формулювання задачі Фермі-Пасти-Улама, наведено результати чисельних розрахунків задачі Фермі-Пасти-Улама на комп'ютері «MANIAC I», аналіз яких привів до так званого парадоксу Фермі-Пасти-Улама, наведено теоретичне пояснення виникнення парадоксу.*

Ключові слова: *задача Фермі-Пасти-Улама, парадокс Фермі-Пасти-Улама, рівняння Кортевега-де Фріза, термалізація енергії, солітон.*

Abstract. *The article reflects the prerequisites and formulation of the Fermi-Pasta-Ulam problem, presents the results of numerical calculations of the Fermi-Pasta-Ulam problem on the MANIAC I, the analysis of which led to the so-called Fermi-Pasta-Ulam paradox, provides a theoretical explanation for the emergence of the paradox.*

Keywords: *Fermi-Pasta-Ulam problem, Fermi-Pasta-Ulam paradox, Korteweg-de Vries equation, energy thermalization, soliton.*

Вступ. На початку 1950-х американський суперкомп'ютер «MANIAC I» (англ.: Mathematical Analyzer, Numerical Integrator and Computer, or Mathematical Analyzer, Numerator, Integrator and Computer, дослівно: математичний аналізатор, числовий інтегратор та комп'ютер, або математичний аналізатор, нумератор, інтегратор та комп'ютер) був щойно завершений і був готовий розв'язувати важливі та актуальні на той час задачі. В цей період під час одного зі своїх кількох візитів до Лос-Аламоської наукової лабораторії (штат Нью-Мексико) видатний фізик *Енріко Фермі* приєднався до математика *Станіслава Улама* (учень Стефана Банаха) та інформатика *Джона Пасти* в пошуках відповідних задач. Кожен з них визнавав, що «MANIAC I» може відповісти на запитання, які представляють великий інтерес для математики та фізики, але яке з них заслуговує негайної уваги? Після роздумів над цим питанням Фермі припустив, що було б дуже повчальним чисельно інтегрувати рівняння руху для розумно вибраного, одновимірного, гармонійного ланцюга зв’язаних важок (рис. 1), слабко збурених нелінійними силами. Зокрема, він зазначив, що ніхто не може точно передбачити форму такого ланцюга після закінчення кількох сотень гармонійних періодів. Згодом вони мали намір використати цю модель для відповіді на різноманітні складні питання, пов’язані з необоротною статистичною механікою, але початкові дослідження мали на меті лише перевірити найпростіші та найпоширеніші твердження рівноважної статистичної механіки, такі як рівномірний розподіл енергії, ергодичність тощо. [5]

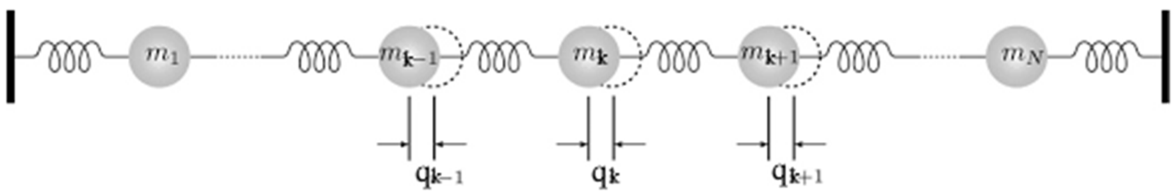

Рис. 1. Ланцюг зв’язаних важок

Постановка задачі Фермі-Пасти-Улама. Після довгих роздумів Е. Фермі, С. Улам і Дж. Паста вирішили чисельно інтегрувати слабко нелінійний одновимірний ланцюжок рухомих важок із фіксованими кінцями, що має гамільтоніан (визначає повну енергію)

$$H = \sum_{k=1}^{N} \frac{p_k^2}{2} + \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{N}\left(q_{k+1} - q_k\right)^2 + \frac{\alpha}{3}\sum_{k=0}^{N}\left(q_{k+1} - q_k\right)^3, \qquad (1)$$

де q_k та p_k – координата (відхилення від положення рівноваги) та імпульс k-ї частинки (важки) відповідно, причому $q_0 \equiv q_{N+1} \equiv 0$, α – малий параметр нелінійного зв’язку. Маса m частинки і стала гармонічної пружинки K були усунуті стандартним канонічним перетворенням і зміною масштабу часу. Одночасно вони також розглядали ланцюжки частинок, гамільтоніани яких мали квартичний або розірваний лінійний зв'язок, а також кубічну нелінійність, явно описану вище.

Створивши початкове коливання, вчені хотіли дослідити, як дана початкова мода (коливання із заданою частотою) буде розподілятися по всіх інших модах. Вони сподівалися, що вдасться досягнути ефекту *теплової рівноваги* або *термалізації енергії*, тобто енергія зрештою рівномірно розподілиться між модами (вздовж усієї хвилі).

В загальному випадку рух ланцюга важок, який розглядали Фермі, Паста та Улам, описувався системою звичайних диференціальних рівнянь

$$m\ddot{q}_k = U'\left(q_{k+1} - q_k\right) - U'\left(q_k - q_{k-1}\right), \quad k = \overline{1, N}, \tag{2}$$

де $q_k = q_k\left(t\right)$ – відхилення від положення рівноваги k-ї важки в момент часу t, m – маса важки. Вони розглядали потенціали $U(r)$ вигляду

$$U(r) = \frac{\gamma}{2}r^2 + \frac{\alpha}{3}r^3$$

та

$$U(r) = \frac{\gamma}{2}r^2 + \frac{\beta}{4}r^4.$$

Пізніше системи Фермі–Пасти–Улама (ФПУ) з такими потенціалами назвали α -модель та β -модель ФПУ відповідно.

Парадокс Фермі-Пасти-Улама. Спочатку, як і всі хороші науковці, які мають нову ідею, Фермі, Паста та Улам почали шукати когось, хто б виконав справжню роботу. Тут їм надзвичайно пощастило знайти *Мері Цингу*, яка запрограмувала динаміку, забезпечила її точність і надала графіки результатів. Зауважимо, що для того, щоб відновити історичну справедливість щодо її вкладу в дослідження систем ФПУ, останнім часом в задачі і системах ФПУ вказують в кінці також і прізвище Цингу.

Фермі, Паста та Улам очікували, що рух їхніх систем зв'язаних осциляторів буде стохастичним*), тоді як їхні комп'ютерні розрахунки показали, що рух є високовпорядкованим, можливо, аналітично розв'язним. Але чи не варто дивуватися тому, що такі досвідчені дослідники могли зробити таке неправильне судження через триста років після Ньютона? Оскільки, враховуючи гамільтоніан ФПУ, хіба динаміка не забезпечує легко застосовний тест, що передбачає прогнозування характеру руху, який виникає? На їх захист давайте швидко визнаємо, що такого тесту не існує, є лише фольклор, підкріплений упередженнями. Класичні механіки часто стверджують, що проблема кількох тіл аналітично розв'язувана, отже, нестохастична, але вони помітно пропускають визначення того, скільки є «мало». Дотримуючись протилежного курсу, статистичні механіки стверджують, що проблема багатьох тіл є стохастичною, але вони помітно упускають наведення доведення. Крім того, цей фольклор суперечить добре встановленим фактам. Пуанкаре десятиліття тому визнав, що гравітаційна проблема трьох тіл є стохастичною. Так само класична теорія збурень не має труднощів у демонстрації систем багатьох тіл, які можна легко розв'язати аналітично. Але зауважимо, що в молодості Фермі опублікував теорему, яка доводить, що система ФПУ є стохастичною!

У 1954 році після проведення розрахунків цієї задачі при $N = 32$ і $N = 64$ на «MANIAC I» очікуваного результату вони не отримали (термалізації енергії не вдавалося досягнути!), але виявили, що перекачування енергії в дві або три моди на початковому етапі розрахунку дійсно відбувається, але потім спостерігається повернення до початкового стану ([4]). Цей парадокс дістав назву *парадоксу Фермі-Пасти-Улама*.

Теоретичне пояснення парадоксу ФПУ. Парадоксом ФПУ зацікавилися кілька математиків і фізиків, серед яких, зокрема, були два американські фізики *Норман Забускі* і *Мартін Крускал*. Останні вирішили продовжити обчислювальні експерименти з моделлю ФПУ. З'ясувалося, що в ланцюжку ФПУ виникають унікальні за своєю природою відокремлені хвилі (пізніше вони їх назвали *солітонами,* від англ. solitary – відокремлений). Саме вони і є причиною того, що термалізація енергії не відбувається.

Впродовж кількох років Забускі і Крускал шукали континуальне наближення до ФПУ. Вони почали з того, що нормалізовані рівняння руху для системи ФПУ з гамільтоніаном (1) можна записати у вигляді

$$\ddot{q}_k = \left(q_{k+1} - 2q_k + q_{k-1}\right) + \alpha\left[\left(q_{k+1} - q_k\right)^2 - \left(q_k - q_{k-1}\right)^2\right],\ \ k = \overline{1,\ N}, \qquad (3)$$

або

$$\ddot{q}_k = \left(q_{k+1} - 2q_k + q_{k-1}\right)\left[1 + \alpha\left(q_{k+1} - q_{k-1}\right)\right],\ \ k = \overline{1,\ N}. \qquad (3')$$

У континуальному наближенні рівняння (3) набуває вигляду

$$q_{tt} = q_{xx} + \varepsilon q_x q_{xx}, \qquad (4)$$

або

$$q_{tt} = \left(1 + \varepsilon q_x\right) q_{xx}. \qquad (4')$$

Але тепер рівняння (4) можна розглядати як звичайне хвильове рівняння, швидкість хвилі якого c залежить від просторової похідної q_x, тобто $c^2 = 1 + \varepsilon q_x$. Типову поведінку, породжену рівнянням (4) для додатних ε, видно на рис. 2, де початковий асиметричний імпульс поширюється вправо, доки його передній фронт не розвине вертикальний фронт ударної хвилі, після чого рівняння (4) втрачає силу.

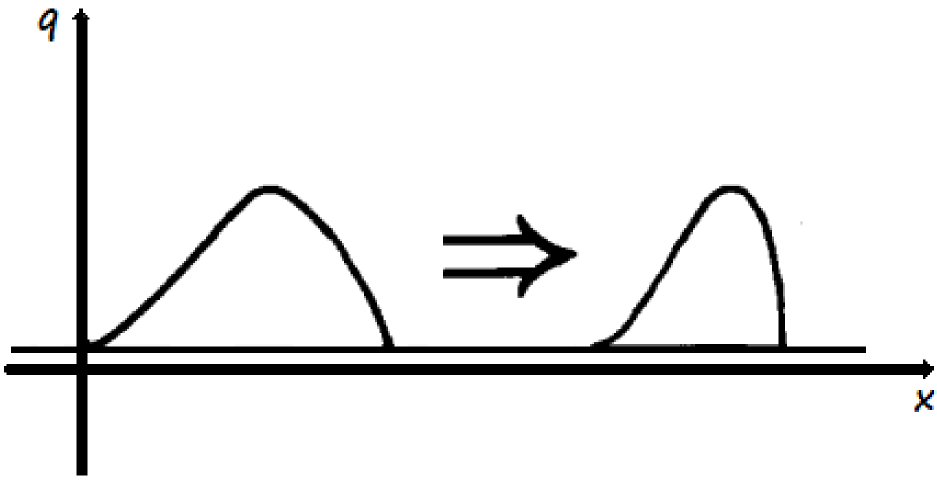

Рис. 2

Тим не менш, перед утворенням стрибка рівняння (4) надає досить розумний опис модальної поведінки ФПУ. Забускі і Крускал таким чином шукали способи уникнути утворення стрибка. У багатьох фізичних системах цьому запобігають шляхом введення дисипації. Справді, її включення призводить до так званого рівняння Бюргерса. Оскільки система ФПУ консервативна, то Забускі і Крускал вирішили для усунення утворення стрибків за допомогою введення дисперсії в рівняння (4):

$$q_{tt} = q_{xx} + \varepsilon q_x q_{xx} + \beta q_{xxx}. \tag{5}$$

Для зручності та простоти на розв'язки вони наклали періодичні граничні умови та обмежились розглядом хвиль, які поширюються лише в одному напрямку з нормованою швидкістю $c = 1$. Після заміни в рівнянні (5) x на $\sigma = x - t$, t на $\tau = \varepsilon t$, q_x на $u = \frac{1}{2} q_x = \frac{1}{2} q_\sigma$, і нехтуючи членами, пропорційними ε^2, вони отримали знамените рівняння Кортевега-де Фріза (КдФ)

$$u_\tau + u u_\sigma + \delta^2 u_{\sigma\sigma\sigma} = 0, \tag{6}$$

яке, як тепер відомо, є цілком інтегровним диференціальним рівнянням з частинними похідними, тобто рівняння (6) можна отримати з гамільтоніана, який є функцією лише його імпульсів.

Далі Забускі і Крускал чисельно проінтегрували рівняння (6) з використанням періодичних граничних умов і одного циклу косинуса як початкової умови ([9]). На їх великий подив, початкова форма косинуса перетворилася на скінченну кількість відносно різких імпульсів (див. рис. 3), які рухалися з різними швидкостями по своєму періодичному шляху, як бігуни на доріжці. Як з'ясувалося, після «зіткнення» імпульси демонстрували нелінійну суперпозицію під час накладення (взаємодії), а потім (після взаємодії) відновлювалися без змін за формою і швидкістю. Майже періодичну поведінку систем ФПУ тепер можна зрозуміти на особливо чіткому, інтуїтивно зрозумілому рівні. Перше повне повторення руху ФПУ відбувається, коли всі імпульси приблизно перекриваються, створюючи майже повернення до початкової форми косинуса. При напівперіоді імпульси накладаються у двох різних групах, утворюючи форму другої гармоніки (частота вдвічі перевищує основну частоту), при третині періоду імпульси накладаються у трьох різних групах і т.д. Для довгохвильових збурень, де можна було б очікувати, що континуальне наближення дасть розумні результати, апроксимація ФПУ за допомогою КдФ забезпечує якісну і кількісну відповідність, залежно від величини, що розглядається. Однак, якщо хтось захоче апроксимувати модальні криві рис. 1.3, ряди Джексона дають результати, які можна порівняти з результатами Забускі і Крускал, або, можливо, кращі за них. Для короткохвильових початкових умов підхід Забускі і Крускал, звичайно, просто незастосовний. Таким чином, щодо проблеми ФПУ, КдФ є дуже геніальним та інтуїтивно зрозумілим, але врешті-решт це не що інше, як ще одне інтегровне наближення.

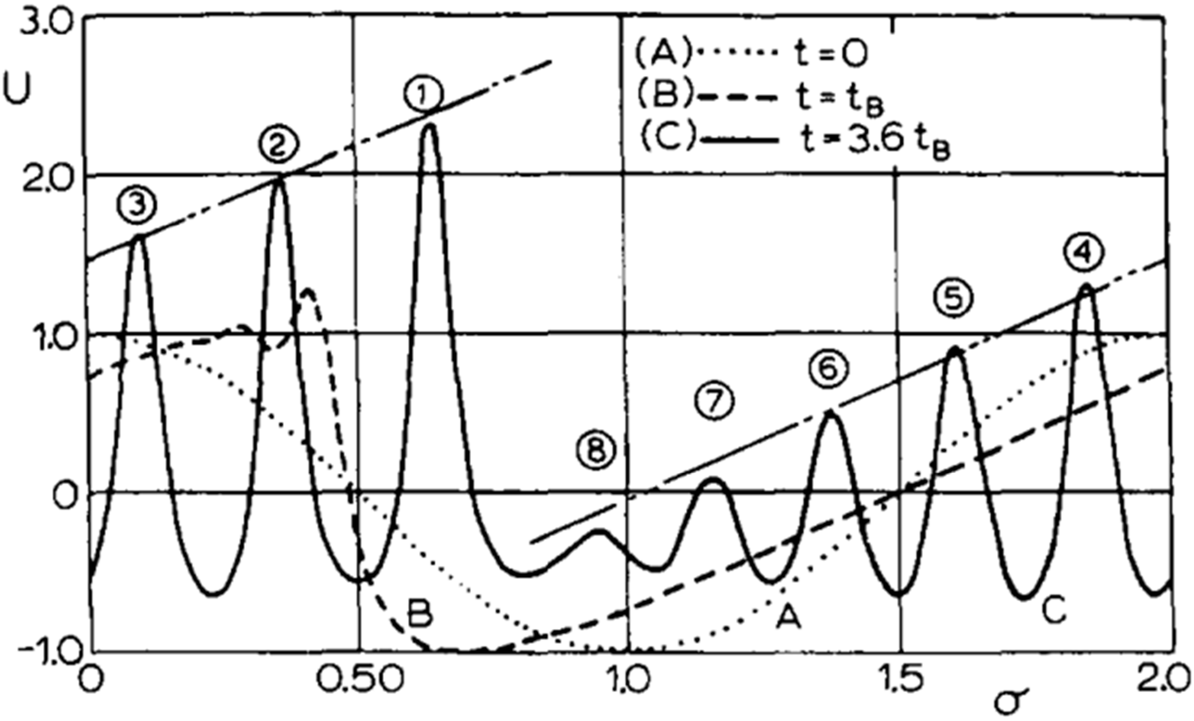

Рис. 3. Чисельний розв’язок рівняння КдФ

Однак у процесі розробки свого пояснення парадоксу ФПУ Забускі і Крускал змогли прийти до розуміння значно більшого класу проблем. Справді, вони були першими, хто перетворив парадокс ФПУ на відкриття, оскільки імпульси, згадані вище, насправді є знаменитими солітонами, які сьогодні виявляються всюди в природі. А рівняння КдФ стало парадигмою для широкого класу цілком інтегровних нелінійних диференціальних рівнянь з частинними похідними. З роками терміни «обернене розсіювання», «пари Лакса», «бризери», «кінки», «пари солітон-антисолітон» тощо стали загальноприйнятими в математичній фізиці, відображаючи лише частину «індустрії», заснованої Забускі і Крускалом. Усі ці питання настільки детально висвітлювалися на незліченних конференціях і в оглядових статтях, що майже нічого не залишалося нерозглянутим. Однак, можливо, є кілька важливих, але часто знехтуваних моментів, які варто згадати. Зокрема, чому солітон настільки всюдисущий і чому він взагалі виникає?

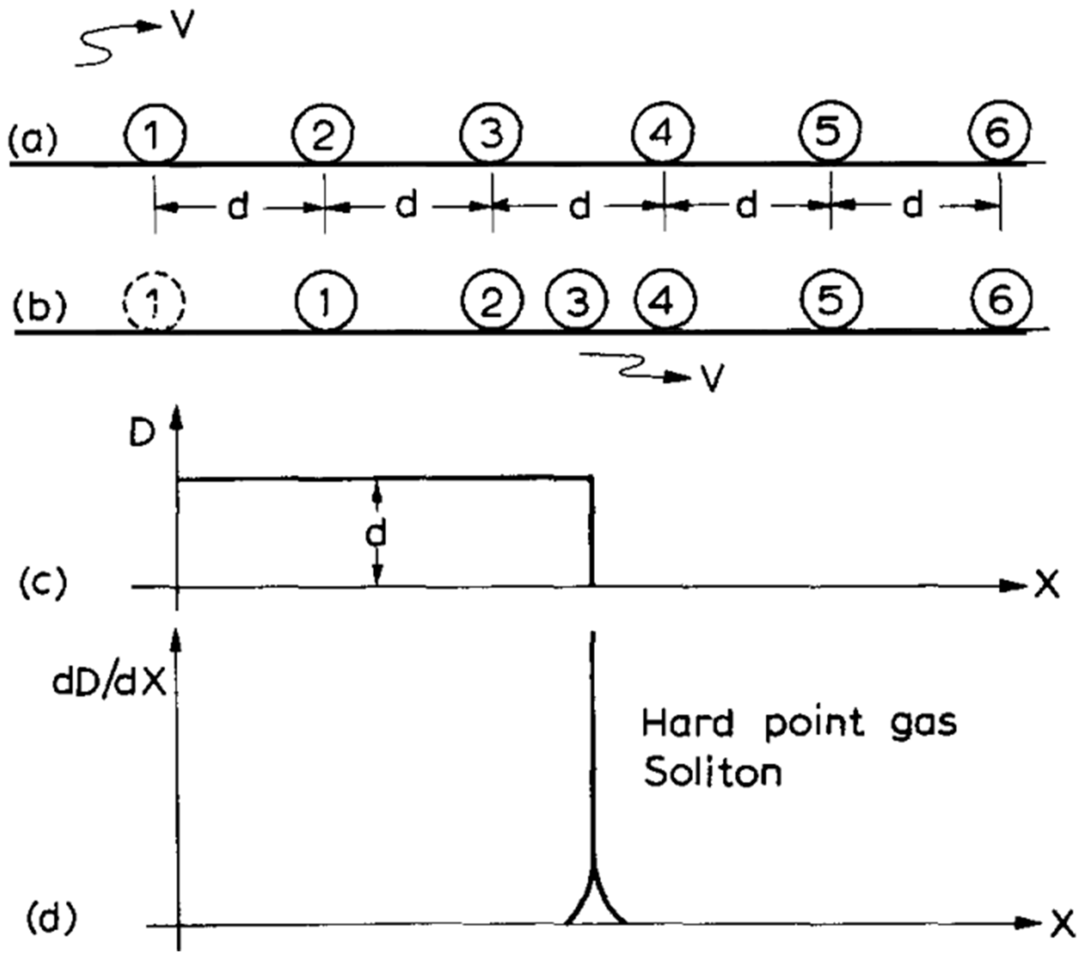

Рис. 4

Щоб дати відповідь на це запитання, розглянемо одновимірний масив рівновіддалених точок рівної маси, що знаходяться в спокої на рис. 4 (*a*), де крайній лівій масі, позначеній цифрою 1, було надано швидкість V праворуч. Після зіткнення з масою 2 маса 1 зупиняється у вихідному положенні 2, а 2 рухається зі швидкістю V вправо; потім 2 зупиняється в положенні 3, коли 3 прямує зі швидкістю V у напрямку 4.

На рис. 4 (*b*) показана остання ситуація для порівняння з рис. 4 (*a*). Можна описати цей рух як прямокутну хвилю, що рухається вправо. Насправді передній край хвилі не вертикальний, а похилий; однак ця невідповідність зникає при великих V і/або малих відстанях між частинками. У позначеннях рівняння (5), прямокутна хвиля $q(x)$, що відповідає рис. 4 (*b*), оказано на рис. 4 (*c*). Нарешті, беручи похідну $u = q_x$, легко отримуємо δ-функцію на рис. 4 (*d*), що розкриває примітивну, архетипову сутність солітона. Дійсно, солітон тут чітко розкривається як жорстка більярдна куля. Без жорсткої взаємодії або принаймні асиметрії в парному потенціалі солітон не може існувати. Аналогія з більярдною кулею пояснює, що цей солітон є локалізованим збуренням лише в одному вимірі, хоча солітони плоскої хвилі можуть існувати у двох і трьох вимірах. Отож, солітон такий же всюдисущий, як і жорсткі взаємодії.

Результати досліджень Енріко Фермі, Джона Пасти і Станіслава Улама дали поштовх для багатьох наступних досліджень систем типу Фермі-Пасти-Улама ([1-3, 7, 10]). До подібних систем також належить повністю інтегровний ланцюг Тоди (див. [8]). Разом з тим ланцюг Тоди є єдиною відомою цілком інтегровною системою типу ФПУ. Для всіх інших подібних систем існуючі результати переважно стосуються точних або наближених часткових їх розв’язків.

І на завершення зауважимо, що у 2015 році групі дослідників у складі: Л. Возелла, М. Онорато, Д. Промент під керівництвом американського математика Ю. Львова було розв’язано проблему ФПУ. В їхній праці [6] наведено строге математичне обґрунтування того, який рівень енергії потрібний для того, щоби утворити одну повну хвилю в ланцюжку зв'язаних важок, які прагнуть до термальної рівноваги. Визначальним в їх методиці є те, що в той момент, коли збігаються шість станів в системі, необхідна поступова передача енергії. Завдяки цьому енергія передається без ефекту повернення. За великої кількості ітерацій моменти збігу шести станів з'являються достатню кількість разів, а тому передається достатня кількість енергії для того, щоб досягти термалізації енергії.

Література:

1. Bak S. M., Kovtonyuk G. M. Existence of solitary traveling waves in Fermi-Pasta-Ulam system on 2D lattice. *Matematychni Studii*. 2018. Vol. 50, № 1. P.75-87.
2. Benettin G., Livi R., Ponno A. The Fermi-Pasta-Ulam Problem: Scaling Laws vs. Initial Conditions. *Journal of Statistical Physics*. 2009. Vol. 135, №5-6. P. 873-893.
3. Butt I. A., Wattis J. A. D. Discrete breathers in a two-dimensional Fermi–Pasta–Ulam lattice. *J. Phys. A. Math. Gen.* 2006. Vol. 39. P. 4955–4984.
4. Fermi E., Pasta J., Ulam S., Tsingou M. Studies of nonliniear problems. *Los Alamos Sci. Lab. Rept*. LA-1940. 1955. Reprinted in *Lect. Appl. Math*. 1974. Vol. 15. 156 p.
5. Ford J. The Fermi-Pasta-Ulam problem: paradox turns discovery. *Physics reports.* 1992. Vol. 213, № 5. P. 271-310.
6. Onorato M., Vozella L., Proment D., Lvov Y. V. Route to Thermalization in the α–Fermi–Pasta–Ulam System. *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A*. 2015. Vol. 112. P. 1–6.
7. Pankov A. Traveling Waves and Periodic Oscillations in Fermi-Pasta-Ulam Lattices. London – Singapore: Imperial College Press, 2005. 196 p.
8. Toda M. Waves in nonlinear lattice. *Suppl. Theory Phys*. 1970. № 45. P. 174–200.
9. Zabusky N. J., Kruskal M. D. Interaction of "solutions" in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. *Phys. Rev. Lett.* 1965. Vol. 15. P. 240-243.
10. Бак С. М. Дискретні нескінченновимірні гамільтонові системи на двовимірній ґратці: дис. ... докт. фіз.-мат. наук: 01.01.02. Вінниця, 2020. 336 с.
11. Золотарюк Я. О. Теорія солітонів (курс лекцій). Київ: Ін-т теор. фізики ім. М. М. Боголюбова, 2009. 102 с.
12. Шека Д. Д. Вступ до фізики солітонів (курс лекцій). Київ: Ін-т теор. фізики ім. М. М. Боголюбова, 2023. [Електронний ресурс]. URL: https://ritm.knu.ua/ua/solitons/ (дата звернення: 28.10.2023).