Das Fermi-Pasta-Ulam-Problem

Proseminar: Theoretische Physik

Von Nimrod Hausser

Gliederung

- Vorbereitung
- Ergebnisse
- Erklärungsversuche
- Fazit
- Ausblick
- Quellen

Vorbereitung

- Historisches
  - Von Enrico Fermi, John R. Pasta, Stanislaw Ulam und Mary Tsingou im Sommer 1953 durchgeführt
  - Am MANIAC I im Los Alamos National Laboratory durchgeführt
  - Ergebnisse im Jahr 1955 veröffentlicht
  - Eine der ersten Computersimulationen in der Physik

Vorbereitung

- Motivation

Fermi expressed often a belief that future fundamental theories in physics may involve non-linear operators and equations, and that it would be useful to attempt practice in the mathematics needed for the understanding of non-linear systems.

–S. Ulam

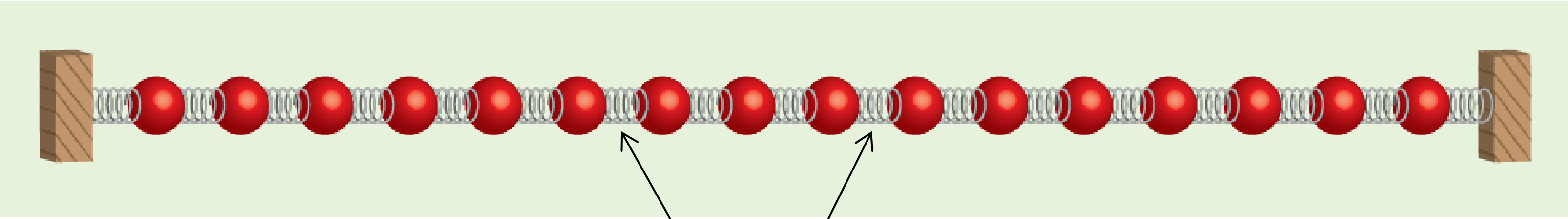
Vorbereitung

- Motivation
  - Modell betrachten, in dem man Thermalisierung beobachten würde
  - Ergodisches Verhalten solcher Systeme untersuchen
  - Ziel: Rate des Auftretens von Gleichverteilung der Energie entlang der Freiheitsgrade untersuchen

⇒ Untersuchung des Langzeitverhaltens

Vorbereitung

- Das Problem
  - Kette aus N Teilchen der Masse M, die mit elastischen Federn gekoppelt sind (1-dimensional)



Nichtlineare
Kopplung!

Vorbereitung

- Das Problem
  - Bewegungsgleichungen:

α–Modell:

$$M\ddot{x}_n = K(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) + \alpha[(x_{n+1} - x_n)^2 - (x_n - x_{n-1})^2]$$

β–Modell:

$$M\ddot{x}_n = K(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) + \beta[(x_{n+1} - x_n)^3 - (x_n - x_{n-1})^3]$$

  - Der Einfachheit halber M=K=1

Vorbereitung

- Bemerkungen zum Modell
  - N=32
  - Feste Enden, d.h. $x_0 = x_{N+1} = 0$
  - Anfangsbedingung: erste Mode ist angeregt
  - α, β klein, aber nicht zu klein

Vorbereitung

- FPU´s Erwartungen
  - Störung der linearen Bewegung

Kette nimmt immer kompliziertere Gestalt an und alle Moden werden wichtig (Gleichverteilung der Energie zwischen den Moden)

Vorbereitung

- FPU´s Erwartungen
  - Nach klassischer statistischer Mechanik gilt im Gleichgewichtszustand eines Systems

$$< E_k >_{Ensemble} = \frac{E}{N} \; \forall k$$

für das harmonische System sowie qualitativ für kleine Störungen eines harmonischen Systems

Vorbereitung

- FPU´s Erwartungen
  - Es war zu der Zeit der allgemeine Glaube, dass Ergodizität hinreichend und notwendig für die Anwendbarkeit der Methoden statistischer Mechanik ist

Vorbereitung

- FPU´s Erwartungen
  - Definition von Ergodizität

Es sei ein hamiltonsches System mit $H = E$ und einem Phasenraum M gegeben. Mit $< f >_{Ensemble}$ bezeichnen wir das Ensemble − Mittel (Mittelung über alle möglichen Zustände) einer dynamischen Variable $f: M \rightarrow \mathbb{R}$. Mit $\{g^t\}_{t\in\mathbb{R}}, g^t: M \rightarrow M$ bezeichnen wir den Fluss, der durch die Bewegungsgleichungen induziert wird und mit x einen Punkt im Phasenraum. Dann heißt das System ergodisch, wenn

$$\bar{f}(t,x) \xrightarrow{t\rightarrow\infty} < f >_{Ensemble} \text{ mit } \bar{f}(t,x) = \frac{1}{t}\int_0^t f(g^s x)ds$$

Vorbereitung

- FPU´s Erwartungen
  - Für jede dynamische Variable f sollte eine typische „Relaxation Time“ τ existieren, die die kleinste Zeit ist für die gilt

$$\bar{f}(t,x) = < f >_E \quad \forall t \geq \tau$$

  - Es gilt: $\tau \xrightarrow{\alpha,\beta \to 0} \infty$

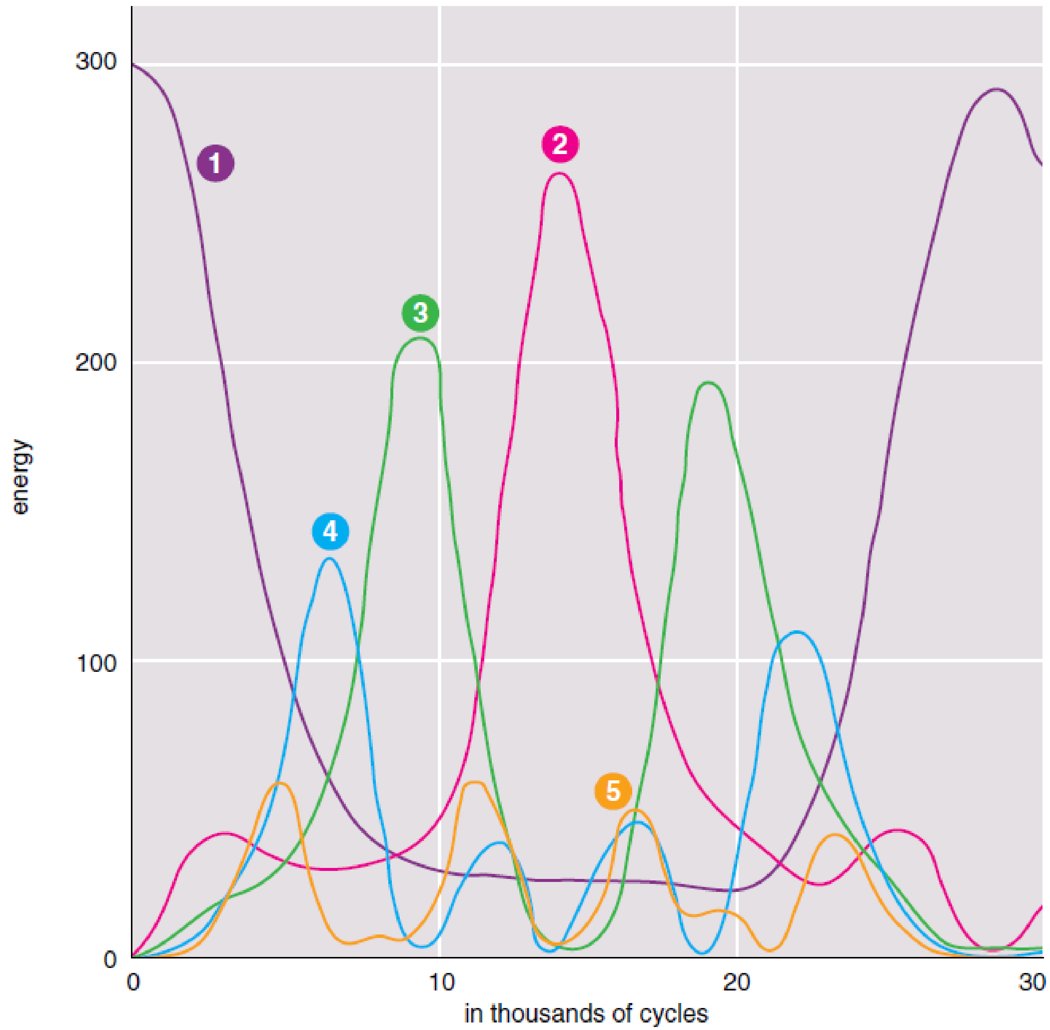
Vorbereitung

- FPU´s Erwartungen
  - FPU´s Anliegen: durch numerisches Lösen der Bewegungsgleichungen die „Relaxation Times" für die zeitgemittelte Energie $\overline{E_k}(t, x)$ der k-ten Mode bestimmen

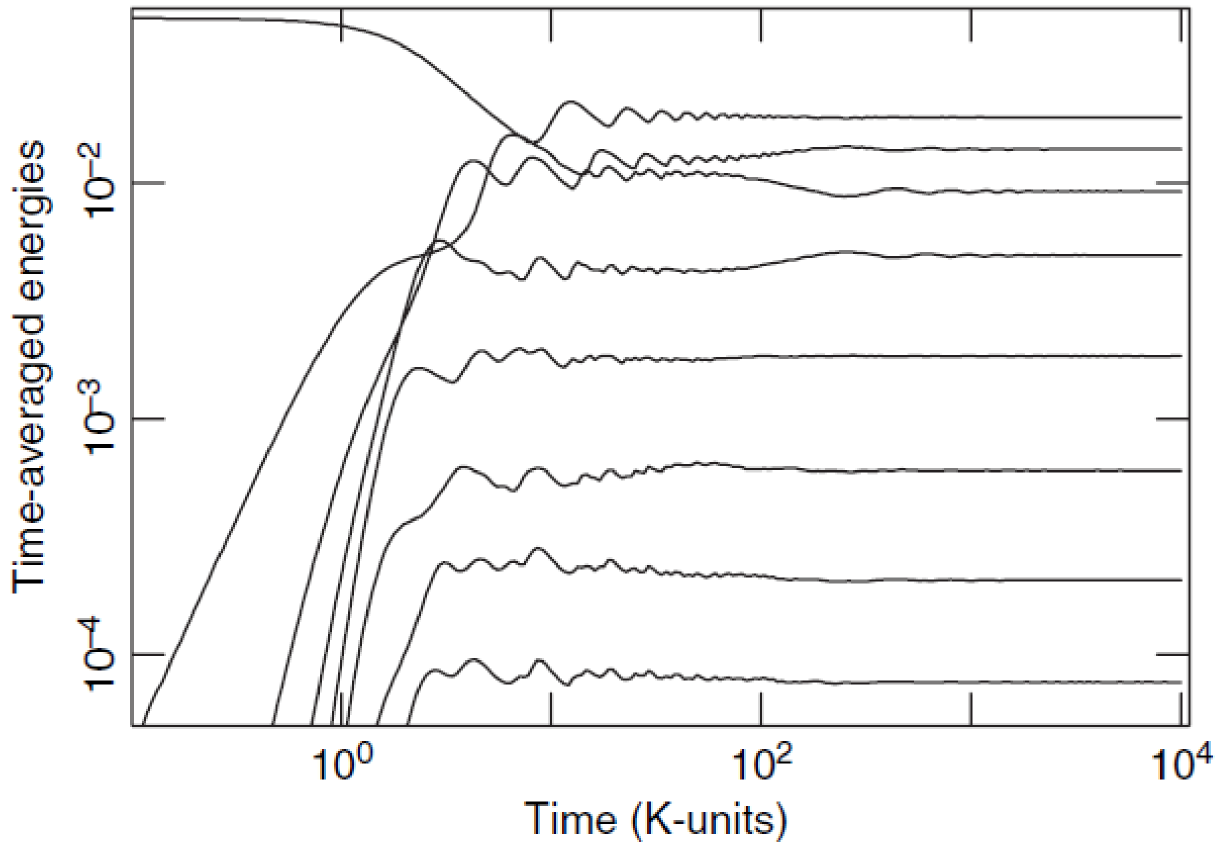
⇒ Kontinuierlicher Fluss der Energie aus der angeregten Mode in höhere Moden und zeitgemittelte Energie aller Moden werden nach einer endlichen Zeit gleich sein!

Ergebnisse

α=0,25,
N=32,
erste Mode
angeregt

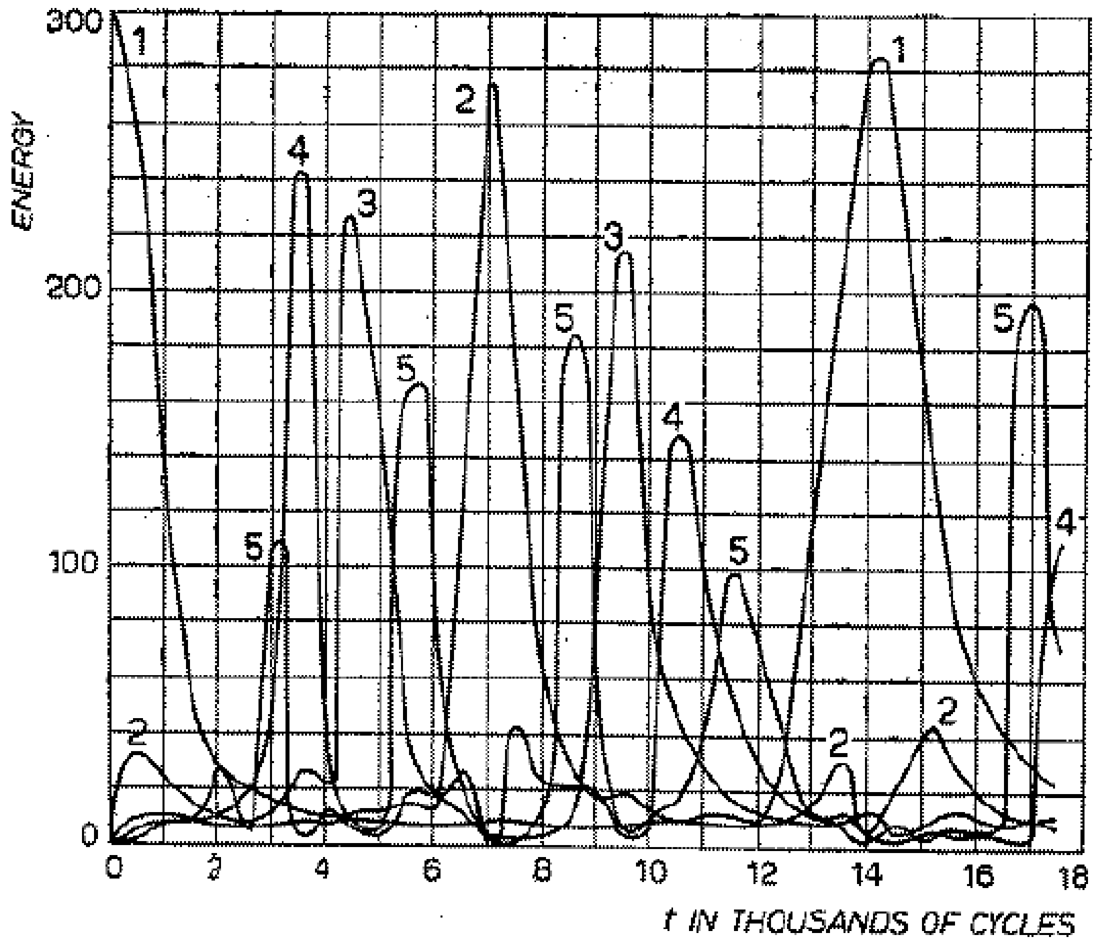


Ergebnisse



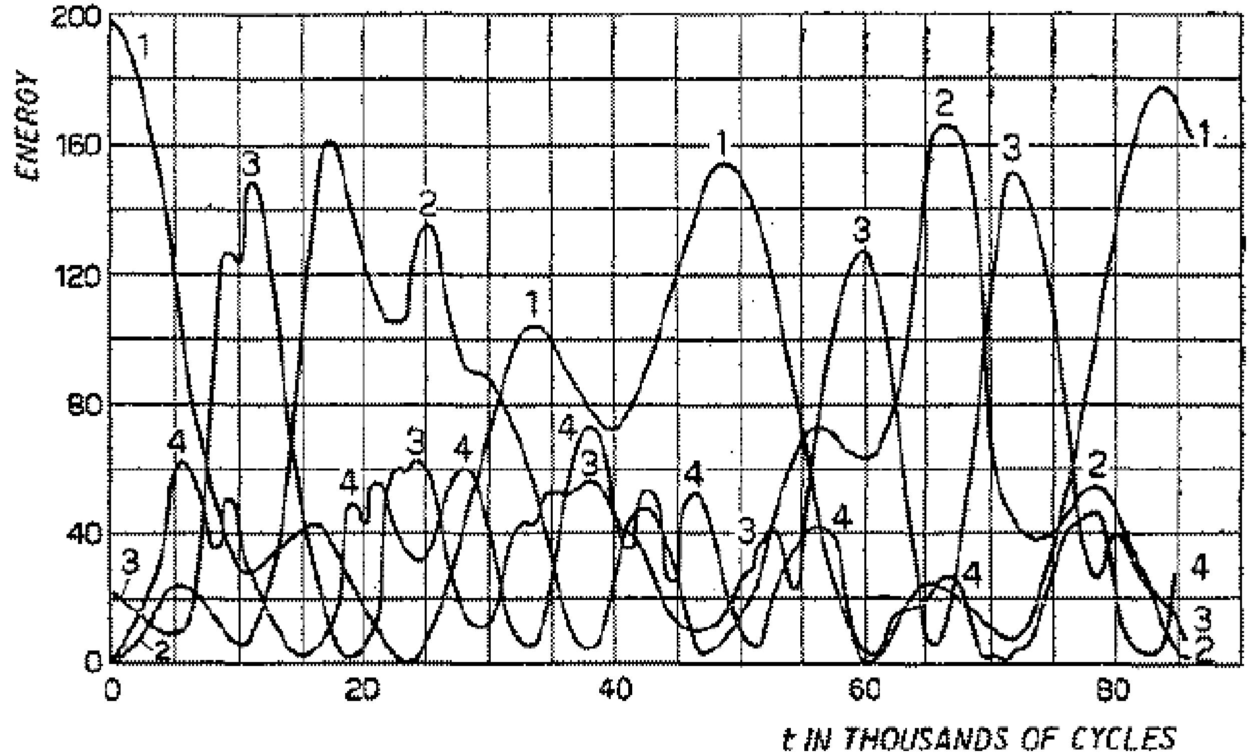
Ergebnisse

$\alpha=1$,
$N=32$,
erste Mode angeregt



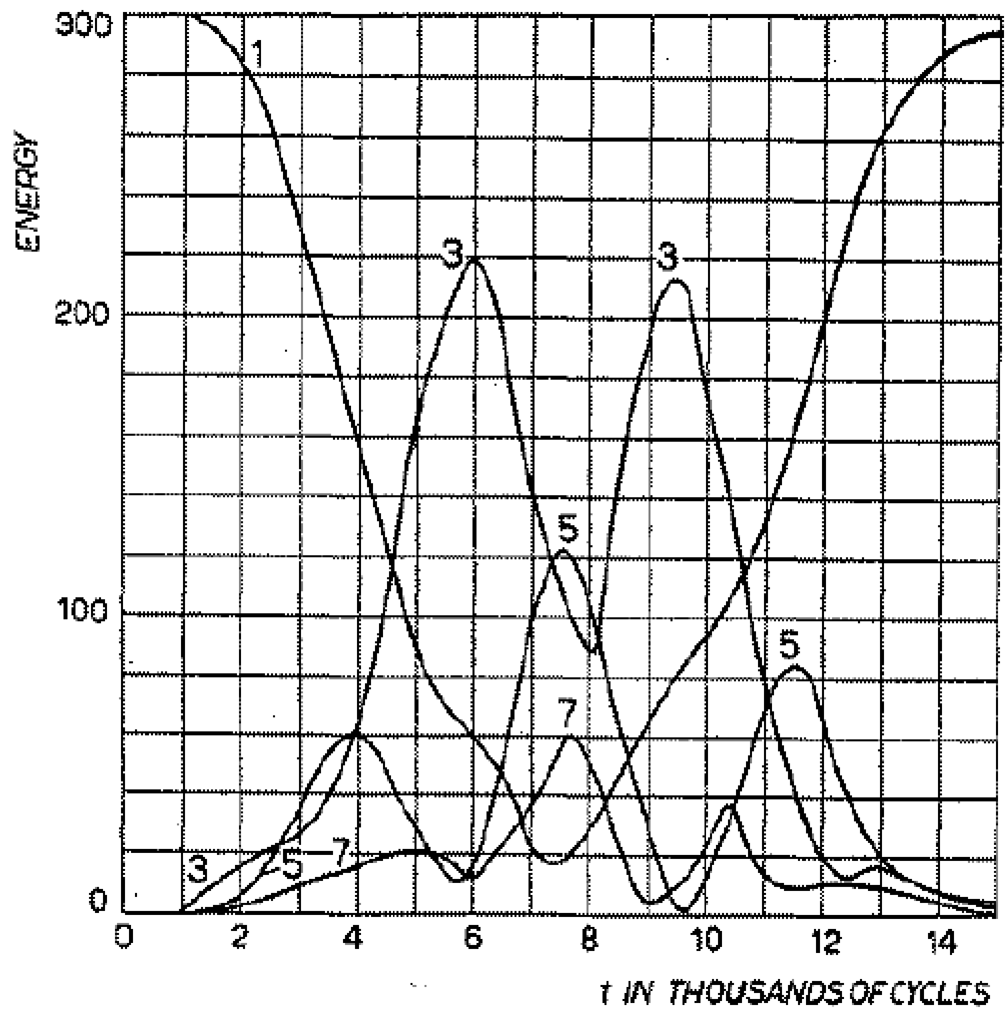
Ergebnisse

α=0,25, N=32, aber Anregung mehrerer niedriger Moden



Ergebnisse

β=8, N=16,
erste Mode
angeregt



Erklärungsversuche

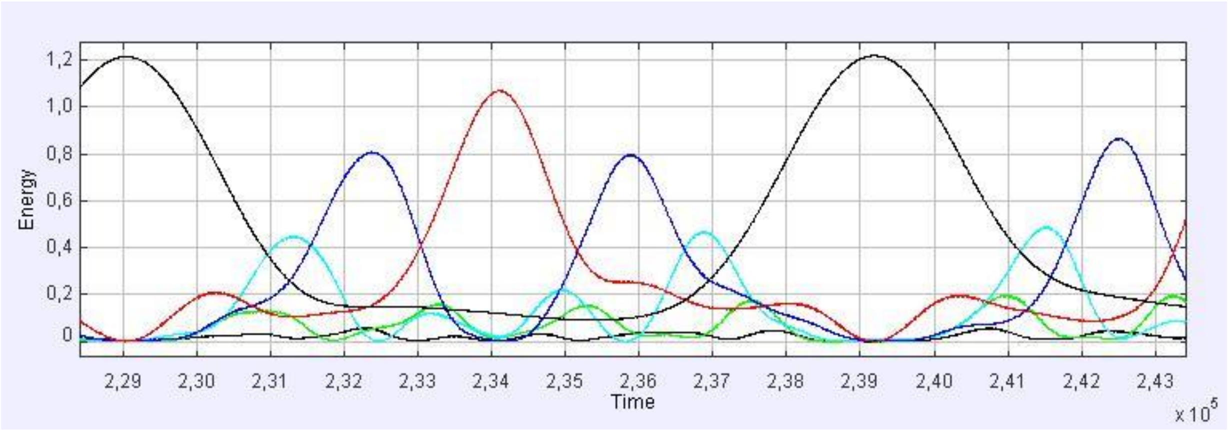
- Korrektheit der Simulation wurde angezweifelt, da Rückfluss der Energie nicht komplett ist

→
- Weitere Simulationen bestätigten das Ergebnis
- Auftreten einer „Superperiode“, in dem der Energierückfluss in die erste Mode mehr als 99% der Anfangsenergie beträgt

→ „Recurrence“ ist Eigenschaft des Systems!

Erklärungsversuche

- „Superperiode“



Erklärungsversuche

- Einfluss numerischer Fehler wurde überprüft

⇒ Umkehrung von Zeit und Geschwindigkeit, also der Dynamik des Systems

⇒ 100% der Energie fließt zurück in erste Mode

⇒ Beweis für die reguläre Dynamik des Systems!

Erklärungsversuche

- Die Korteweg-de Vries Gleichung
  - Differentialgleichung der Form $\frac{\partial u}{\partial t} + 6u\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$
  - $u = u(x,t)$

⇒ Hat Solitonen als Lösung

Erklärungsversuche

- Solitone
  - Lösungen von nicht-linearen Wellengleichungen, also Wellenpakete, die sich durch ein dispersives und nichtlineares Medium bewegt
  - Bei Wechselwirkung von Solitonen findet kein Energieaustausch statt, d. h. die Solitonen bewahren ihre Identität

Erklärungsversuche

- Solitonenlösungen für das FPU-Modell
  - Die Bewegungsgleichung (z. B. für das β-Modell) im thermodynamischen Limit ($N \to \infty$):

$$\frac{\partial^2 x}{\partial^2 t} = \left[1 + \bar{\beta}\left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)^2\right]\frac{\partial^2 x}{\partial z^2} + \frac{a^4}{12}\frac{\partial^4 x}{\partial z^4}$$

$$\mathrm{a} = \frac{\mathrm{L}}{\mathrm{N}} = \mathrm{const}, \qquad \mathrm{x(z,t)} = x_n(t), \qquad z = na, \qquad \bar{\beta} = \frac{3\beta}{N^2}$$

⇒ „Recurrence“ kann mit Hilfe von Solitonen erklärt werden

Erklärungsversuche

- Toda-Gitter
  - Nichtlineares Gitter mit Potenzial $U(z) = \frac{a}{b}e^{-bz} + az$, $ab > 0$ zwischen den benachbarten Teilchen im kontinuierlichen Limit
  - Bewegungsgleichungen für numerische Berechnungen

$$\ddot{x}_n = a[e^{-b(x_n - x_{n-1})} - e^{-b(x_{n+1} - x_n)}]$$

⇨ Lösung für nicht allzu großes b sind auch Solitonen und dieses Modell korrespondiert für $b = -2\alpha$ mit dem α-Modell

Erklärungsversuche

- Kurze Zusammenfassung
  - Die „Recurrence" kann für nicht allzu große Störungen des Systems und für niedrige Anfangsenergien, so wie es FPU zunächst berechnen wollten, mit Hilfe von Solitonen erklärt werden

ABER!

Erklärungsversuche

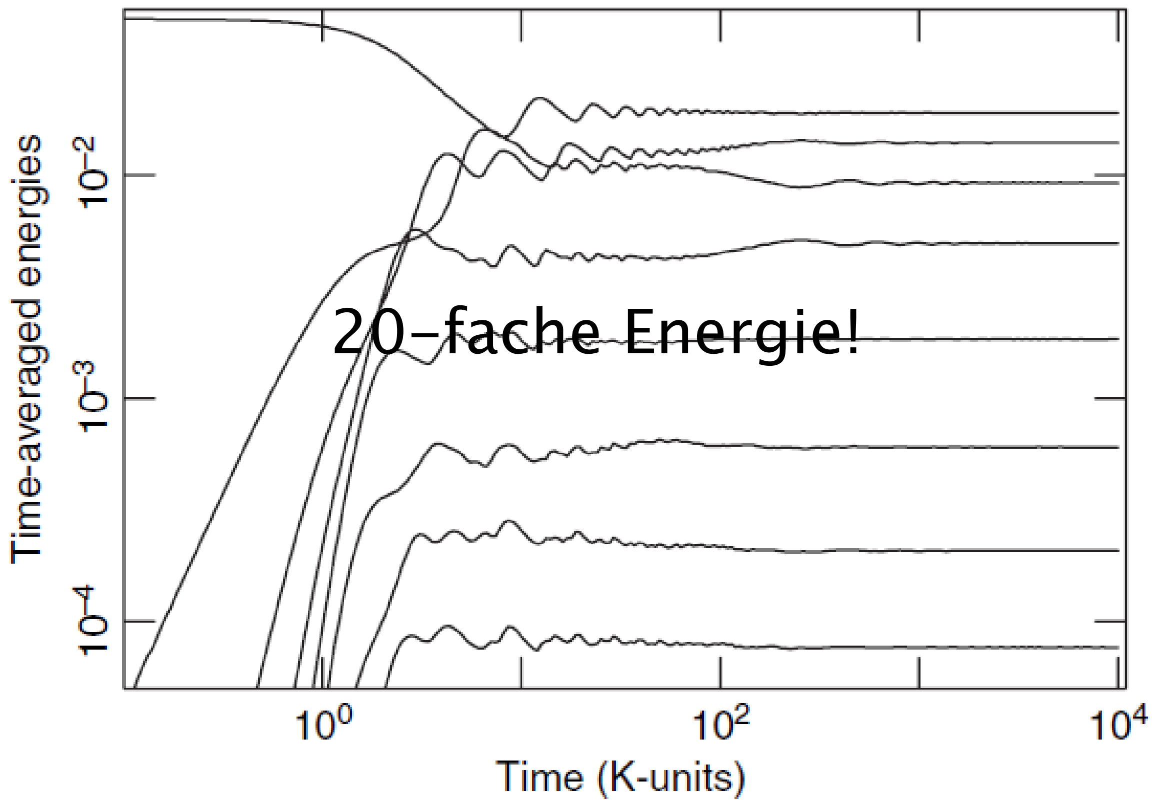
- Das Kolmogorow-Arnold-Moser-Theorem (KAM-Theorem)
  - Für genügend kleine autonome hamiltonsche Störungen werden die meisten Tori im Phasenraum lediglich leicht deformiert
  - Im gestörten System existieren Tori, die von den Phasenbahnen dicht und quasiperiodisch umsponnen werden und die Mehrheit bilden

Erklärungsversuche

- Die Entdeckung der Stochastizitätsgrenze
  - KAM-Theorem formal für das FPU-Problem nicht anwendbar
  - Trotzdem: Izrailev und Chirikov haben aufgrund des KAM-Theorems größere Störungen (z. B. höhere Energie) untersucht
  - Kritische Energien $E_c(N)$, ab der sich stochastisches Verhalten einstellt, wurden gefunden
  - Diese Grenze ist nicht scharf, sondern breit und hat eine komplizierte Struktur

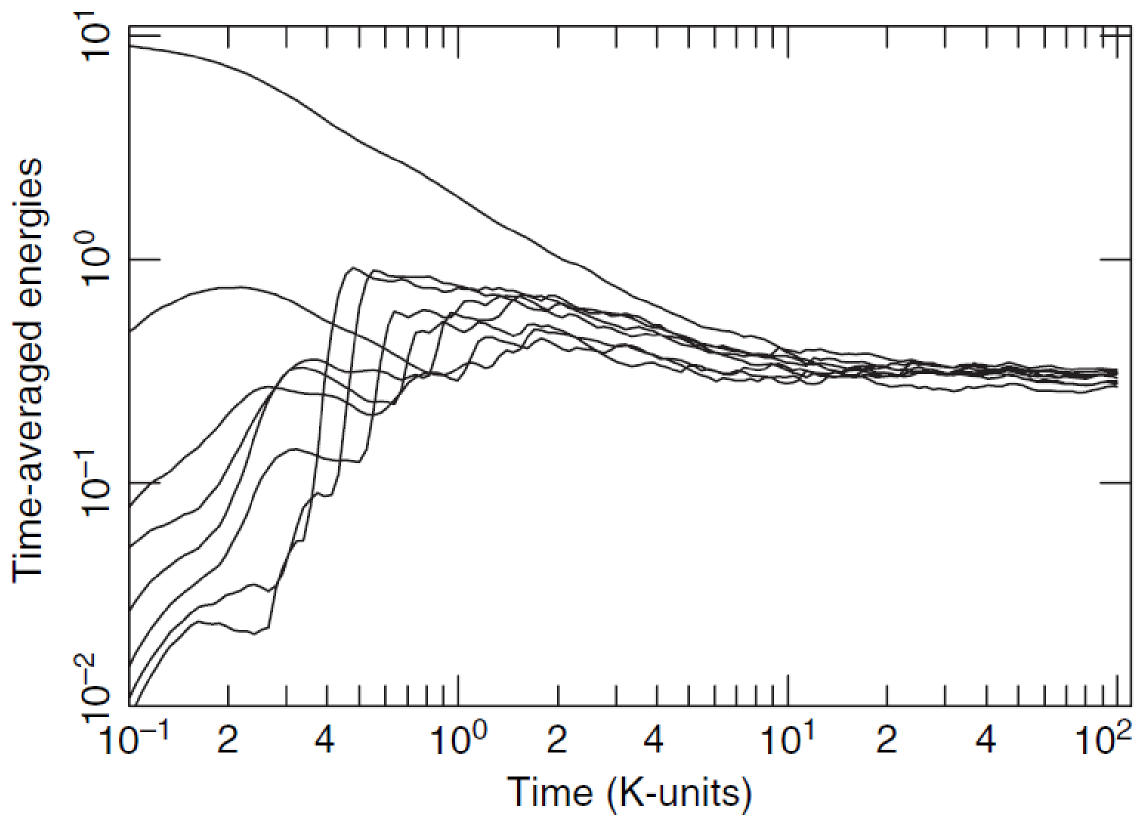
Erklärungsversuche

- Die Entdeckung der Stochastizitätsgrenze



Erklärungsversuche

- Die Entdeckung der Stochastizitätsgrenze



Erklärungsversuche

- Das Chirikov-Kriterium
  - Bei schwacher Nichtlinearität kann jede nichtlineare Resonanz einzeln betrachtet werden in dem man Störungstheorien anwendet
  - Bei starker Nichtlinearität kann man dies nicht machen, da die Resonanzen im Frequenzraum sehr dicht beieinander liegen
  - Die Überlagerung von Frequenzen erzeugt eine Instabilität, die zu einer irregulären, und damit chaotischen, Bewegung führt

Erklärungsversuche

- Das Chirikov-Kriterium
  - Schätzt das Eintreten der chaotischen Bewegung mit $K \approx S^2 > 1$ mit $S = \Delta\omega_r / \Delta_d$, wobei $\Delta\omega_r$ die Breite der Resonanzen und Δ_d die Frequenzdistanz der zwei ungestörten Resonanzen ist

Abschätzung für das FPU-Problem:

$3\beta_{cr} \frac{E}{N} \sim 3\sqrt{\frac{\Delta k}{k}}$ für $k \ll N$ und $\Delta\omega \approx 2\pi/N$

$3\beta_{cr} \frac{E}{N} \sim \frac{3\pi^2 \Delta k}{N^2} \left(\frac{k}{N}\right)^2$ für $N-k \ll N$ und $\Delta\omega \approx \pi^2/(2N^2)$

Δk=Anzahl der angeregten Moden um zentrale k-te Mode

Erklärungsversuche

- Exponentielle Instabilität
  - Erinnerung: $\|\delta(t)\| \sim \|\delta(0)\| e^{\lambda t}$ mit λ positiver Ljapunow Exponent
  - 2 Fälle:
    - 1. Fall: großes $\beta \Rightarrow \lambda \approx \Delta\omega \ln\left(\frac{\beta}{\beta_{cr}}\right)$ (starkes Chaos)
    - 2. Fall: kleines $\beta \Rightarrow \lambda \approx \Delta\omega \left(\frac{\beta}{\beta_{cr}}\right)^{\frac{4}{3}}$ (schwaches Chaos)

Fazit

- Das Modell ist stark von den Anfangsbedingungen abhängig
- Durch die numerischen Berechnungen konnte die Integrabilität einer Klasse von DGLen gezeigt werden
- Großer Einfluss in der Physik, da Pioniertat
- Neue Herangehensweise in der Physik:

1. „numerische Experimente“ → 2. Theoretische Studien und Voraussagen → 3. Experimenteller Beweis

Ausblick

- Das Problem ist noch nicht vollständig gelöst
- Vor allem in 2D und 3D wird das Problem sehr schwierig
- Experimenteller Nachweis soll mit Hilfe vom Bose-Einstein-Kondensat erfolgen

Quellen

- Wikipedia
- scholarpedia.org
- *The Fermi-Pasta-Ulam problem: 50 years of progress,* G. P. Berman und F. M. Izrailev
- *Studies of non linear problems,* E. Fermi, J. Pasta und S. Ulam
- *Fermi, Pasta, Ulam and the Birth of Experimental Mathematics,* Mason A. Porter et al.
- *The Fermi-Pasta-Ulam Problem and the Metastability Perspective,* G. Bennetin et al.
- Simulation: *Fermi-Pasta-Ulam model*, Wolfgang Christian, http://www.opensourcephysics.org/items/detail.cfm?ID=6891

Vielen Danke für eure Aufmerksamkeit!

Schöne Semesterferien, viel Erfolg bei den Prüfungen und… WIR SIND WELTMEISTER!!!! ☺