

Tegenspraak in de sta

In 1954 ontdekte de natuurkundige Fermi (Nobelprijs in 1938) samen met de computerexpert Pasta en de wiskundige Ulam een scheurtje in een traditioneel fundament van de klassieke statistische mechanica van Boltzmann. Dit leidde tussen 1960 en 1970 tot veel nieuwe natuurkundige theorieën, die de observaties van Fermi, Pasta en Ulam echter niet helemaal konden verklaren. Tegenwoordig boeken vooral wiskundigen voortgang in dit oude theoretisch natuurkundige probleem.

Bob Rink



rink@math.uu.nl

Bob Rink (1977) studeerde Toegepaste Wiskunde en promoveerde op 17 september 2003 aan de Universiteit Utrecht op het proefschrift *Geometry and dynamics in Hamiltonian lattices*. Hij voerde zijn promotieonderzoek uit bij de vakgroep Wiskunde onder begeleiding van Ferdinand Verhulst en Hans Duistermaat.

Natuurkundige systemen met veel deeltjes, zoals gassen, kristallen en grote moleculen zijn over het algemeen bijzonder gecompliceerd. Een exacte beschrijving van het gedrag van ieder van de deeltjes in deze systemen is onmogelijk te geven. Vaak is men ook meer geïnteresseerd in de grootschalige eigenschappen van zo'n systeem. Daarom ontwikkelde Boltzmann rond 1872 de theorie van de statistische mechanica. Deze stelt ons in staat om grootschalige, statistische kenmerken van veeldeeltjessystemen te bestuderen. Zo wordt in de statistische mechanica bijvoorbeeld over 'temperatuur' gesproken, die meestal gelijk is aan een constante keer de gemiddelde kinetische energie van de deeltjes in het systeem.

Om een statistische beschrijving mogelijk te maken en om relaties tussen statistische grootheden op te kunnen stellen, moest Boltzmann wel veronderstellen dat veeldeeltjessystemen zich lenen voor een statistische analyse. Dat wil zeggen dat ze zich in een evenwicht bevinden, waarin geen van de deeltjes zich, gemiddeld over lange tijd, uitgesproken anders gedraagt dan alle andere. Immers, als sommige atomen bijvoorbeeld altijd meer kinetische energie hebben dan andere, dan

heeft de grootheid 'temperatuur' geen echt zinvolle betekenis. Boltzmanns aanname van gemiddeld-geen-voorkeur heet de *ergodenhypothese* en ze vormt sinds de negentiende eeuw een van de traditionele fundamenteën van de statistische fysica.

In de jaren vijftig en zestig van de twintigste eeuw ontdekten onderzoekers echter dat sommige klassieke veeldeeltjessystemen zelden of nooit in evenwicht zijn. Bijvoorbeeld in het Los Alamos National Laboratory in de bergen van New Mexico, Verenigde Staten. In Los Alamos werd gedurende de Tweede Wereldoorlog de atoombom ontwikkeld en er bevond zich een grote groep van 's werelds beste onderzoekers. Los Alamos beschikte ook over een van de eerste supercomputers, met de tot de verbeelding sprekende naam MANIAC I. Op de MANIAC I voerden natuurkundige en Nobelprijswinnaar Enrico Fermi, computerexpert John Pasta en wiskundige Stan Ulam in 1954 een van de eerste computerexperimenten uit de geschiedenis van de theoretische natuurkunde uit.

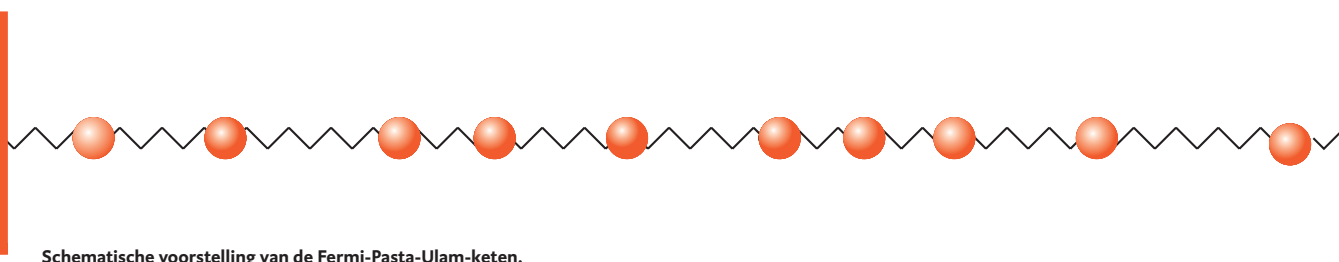
Zij besloten hiertoe een klassiek mechanisch model op te stellen voor een zeer eenvoudig éénimensionale atoomstructuur. Zelf schrijven ze hierover:

We imagine a one-dimensional continuum ... with forces acting on the elements of this string.

DE FERMI-PASTA-ULAM-KETEN

Het model bestaat uit een keten van gelijke puntdeeltjes die onderling verbonden zijn met hun burens door kleine identieke veertjes. De puntmassa's stellen de atomen, en de veertjes de interatomaire krachten in het eendimensionale continuüm voor. Dit model, dat bekend staat als de Fermi-Pasta-Ulam-keten, wordt ook gebruikt als eenvoudige beschrijving van bijvoorbeeld kristalstructuren, snaren,

statistische natuurkunde



Schematische voorstelling van de Fermi-Pasta-Ulam-keten.

lange moleculen en recentelijk zelfs vloeistofbewegingen.

Het gedrag van de Fermi-Pasta-Ulam-keten ligt vast in een groot stelsel differentiaalvergelijkingen. Fermi, Pasta en Ulam kozen bewust niet voor een quantummechanische beschrijving, dus dit stelsel bestaat uit de gewone differentiaalvergelijkingen van Newton:

$$\text{massa} \times (\text{versnelling deeltje}) = \text{som van krachten uitgeoefend door de twee verbonden veertjes}$$

Dit lijkt een simpele stelselvergelijkingen, maar schijn bedriegt. De krachten tussen atomen zijn immers niet eenvoudig, zodat we niet mogen veronderstellen dat de veertjes tussen de puntdeeltjes voldoen aan de bekende wet van Hooke. De kracht van de veer is dus niet rechtevenredig met zijn uitrekking. Deze niet-lineariteit zorgt ervoor dat we de Newtoniaanse vergelijkingen niet kunnen oplossen. Enkel met computersimulaties konden Fermi, Pasta en Ulam hun deeltjesketen bestuderen. Ze wilden vooral weten op welke manier deze een evenwicht zou bereiken.

EEN KLEINE ONTDEKKING

Fermi, Pasta en Ulam bestudeerden de Fermi-Pasta-Ulam-keten met 32 deeltjes, aangezien dit destijds het maximaal haalbare was voor de MANIAC I. Het resultaat van hun numerieke simulaties was verrassend en werd door Fermi voorzichtig “een kleine ontdek-

king” genoemd: de keten bleek helemaal niet in evenwicht te geraken!

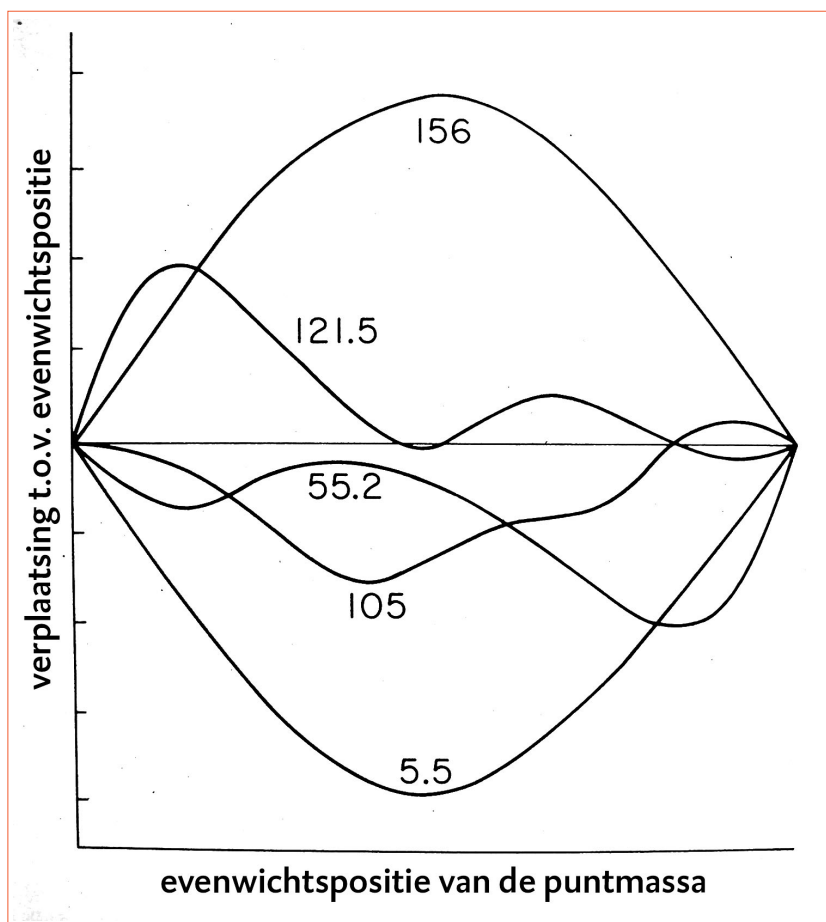
In een continu medium kunnen allerlei golven voorkomen. Fermi, Pasta en Ulam hadden daarom als volgt geredeneerd: als de Fermi-Pasta-Ulam-keten inderdaad in evenwicht is, dan kan ze geen voorkeur hebben voor bepaalde golfpatronen. Met andere woorden: als we initieel slechts één golfpatroon energie geven, dan zal deze energie ontsnappen naar andere golfpatronen en zullen, gemiddeld in de tijd, alle mogelijke golfpatronen gelijk bedield zijn. Numerieke integraties van de Newtoniaanse vergelijkingen lieten echter iets volslagen anders zien: het bleek dat als een kleine hoeveelheid initiële energie werd toegekend aan slechts één golfpatroon, deze energie eventjes met een paar andere golfpatronen werd gedeeld, maar dat de keten daarna snel weer terugkeerde naar haar oorspronkelijk golfpatroon. Vervolgens herhaalde dit proces zich. Dit zelfde terugkeergedrag en het bijbehorende gebrek aan energieverdeling werd later op snellere computers ook gevonden in ketens met duizenden deeltjes. Het toont aan dat de Fermi-Pasta-Ulam-keten bij lage energie geen evenwicht bereikt. Dezelfde computerexperimenten laten ook zien dat de Fermi-Pasta-Ulam-keten zich bij lage energie eigenlijk van geen van de wetten uit de statistische fysica iets aantrekt. Bij hoge energie gedraagt de keten zich overigens beter en observeert men dat het evenwicht wel wordt aangenomen.

In de jaren zestig van de twintigste eeuw ontdekten theoretisch natuurkundigen nog meer voorbeelden van veeldeeltjessystemen die geen evenwicht bereiken. Toda vond er een die dit zelfs bij hoge energie niet doet. Deze zogenaamde Toda-keten lijkt wel wat op de Fermi-Pasta-Ulam-keten, maar blijkt ‘integreerbaar’ te zijn. Dit impliceert dat hij altijd terugkeergedrag zal vertonen. Van enkele niet-lineaire partiële differentiaalvergelijkingen werd in deze periode eveneens de integreerbaarheid aangetoond. Een beroemd voorbeeld hiervan is de Korteweg-De Vries-vergelijking die de dynamica van watergolven beschrijft.

WAT IS HIER AAN DE HAND?

Tot op heden weten we niet echt goed waarom de Fermi-Pasta-Ulam-keten zich gedraagt zoals ze zich gedraagt. Ofschoon er in de zestiger jaren een uitgebreide nieuwe theorie werd ontwikkeld over terugkeergedrag in dynamische systemen, bleef het lang onduidelijk of deze theorie ook het terugkeergedrag van de Fermi-Pasta-Ulam-keten kan verklaren.

Op dit punt moet een ander invloedrijk numeriek experiment genoemd worden. In 1964 deden de astronomen Hénon en Heiles enkele interessante ontdekkingen. Zij verrichtten een numerieke studie aan een heelalmodel. Ook dit model werd beschreven door niet-lineaire Newtoniaanse vergelijkingen en het leek dus wel een laagdimensionale en eenvoudigere variant van het Fermi-Pasta-Ulam-model. Ex-



De golfvormen in de Fermi-Pasta-Ulam-keten met 32 deeltjes op verschillende tijdstippen. We zien dat de golf na tijdstip 5,5 vervormt, maar op tijdstip 156 is ze weer hetzelfde.

perimenten op de computer lieten het volgende zien: bij lage energie gedroeg het heelalmodel zich gestructureerd en vertoonde het terugkeergedrag. Bij hogere energie verdween deze gestructureerdheid en werden steeds meer oplossingen chaotisch.

Tegelijkertijd ontwikkelden Kolmogorov, Arnol'd en Moser in de vijftiger en zestiger jaren een uitermate gecompliceerde en ingenieuze wiskundige theorie voor het voorspellen van terugkeergedrag in energiebehoudende dynamische systemen. Deze theorie zegt dat de observaties van Hénon en Heiles – dus terugkeergedrag bij lage energie, en chaos bij hoge energie – mogen worden verwacht. De theorie blijkt toepasbaar in veel dynamische systemen uit bijvoorbeeld de sterrenkunde. Verklaart deze theorie dan ook het gedrag van de Fermi-Pasta-Ulam-keten? Helaas mogen we deze conclusie niet zomaar trekken, al doen natuurkundigen dat soms maar al te graag. Het grootste probleem is dat de Fermi-Pasta-Ulam-keten zo veel dimensies heeft dat het immens moeilijk is om na te gaan of ze echt in de klasse van Kolmogorov-Arnol'd-Moser-systemen valt. Na 1975 leek men de hoop om dit te bewijzen te hebben opgegeven. Maar de wiskunde heeft sinds die tijd niet stilgestaan en vooral de laatste vijf jaar worden er

weer veel interessante ontdekkingen gedaan aan de Fermi-Pasta-Ulam-keten.

RESONANTIES

In Utrecht hebben we onlangs aanzienlijke vooruitgang geboekt door te kijken naar resonanties. We weten allemaal dat resonanties vaak een rol spelen bij het overdragen van energie. Wanneer de eigenfrequenties van objecten op elkaar zijn afgestemd, kan het ene trillende object het andere aanslaan, zodat dit gaat meetrillen. Resonantie is een typisch niet-lineair effect, waarmee ingenieurs bijvoorbeeld rekening moeten houden bij het ontwerpen van grootschalige constructies.

Men realiseerde zich al vroeg dat resonanties ook wel eens van belang kunnen zijn bij het herverdelen van de energie van de golfpatronen in de Fermi-Pasta-Ulam-keten. Als de eigenfrequenties van golfpatronen voldoende resonant zijn, dan kan er veel energieoverdracht zijn en kan de keten dus in evenwicht raken. Maar andersom geldt ook: als de eigenfrequenties niet of weinig resonant zijn, dan betekent dit dat er geen of weinig energie kan worden overgedragen tussen golfpatronen.

Het is dan ook niet moeilijk om de volgende stelling te bewijzen: Als het waar

is dat de eigenfrequenties van de Fermi-Pasta-Ulam-keten niet resonant zijn, dan is de terugkeertheorie van Kolmogorov, Arnol'd en Moser toepasbaar en dan hebben we dus een verklaring gevonden voor de gebrekkige energieoverdracht in de Fermi-Pasta-Ulam-keten.

Deze stelling werd voor het eerst geponeerd door Nishida in 1971. Maar zijn die eigenfrequenties nu resonant of niet? Met weinig moeite kan men nagaan dat de verschillende golfpatronen in de keten met n deeltjes de volgende eigenfrequenties hebben:

$$\sin \frac{\pi}{n}, \sin \frac{2\pi}{n}, \dots, \sin \frac{[n/2]\pi}{n}$$

En helaas: het blijkt dat deze eigenfrequenties wel degelijk resonant zijn. Zo is bijvoorbeeld

$$2 \sin \frac{\pi}{6} = \sin \frac{\pi}{2}$$

wat niet moeilijk te bewijzen is. En er bestaan nog wel 'gekkere' relaties tussen de eigenfrequenties, zoals:

$$\sin \frac{\pi}{6} + \sin \frac{13\pi}{30} = \sin \frac{7\pi}{30} + \sin \frac{3\pi}{10}$$

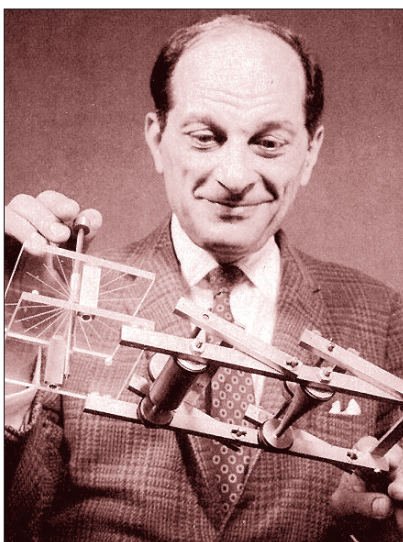
Al deze 'resonantie-relaties' zouden dus eigenlijk aanleiding moeten geven tot energieoverdracht, terwijl de computerexperimenten nu juist laten zien dat die overdracht niet plaatsvindt. Verwarrend, nietwaar?

WHAT'S NEW?

In Utrecht hebben we onlangs een verklaring gevonden voor de vraag waarom de resonanties geen aanleiding geven tot energieoverdracht. Het blijkt namelijk dat iedere resonantie wordt verlamd door de invloed van symmetrie. De Fermi-Pasta-Ulam-keten heeft immers veel symmetrie: doordat alle deeltjes en veertjes identiek zijn, kunnen we deze onderling verwisselen zonder dat er ook maar iets aan de



Enrico Fermi.



Stan Ulam.



Ludwig Boltzmann.

keten verandert. En symmetrie heeft altijd veel invloed op de dynamica: gedrag dat de symmetrie niet respecteert, kan niet voorkomen.

De techniek waarmee we het verband tussen resonantie en symmetrie hebben onderzocht, is voor natuurkundigen onconventioneel te noemen. We hebben gebruik gemaakt van enkele diepe getaltheoretische resultaten. Zo hebben we met behulp van een algebraïsche theorie van Galois (eind negentiende eeuw), een lijst gemaakt van alle resonantierelaties tussen de eigenfrequenties. De eerder genoemde resonanties zijn slechts een paar voorbeelden uit onze volledige lijst.

Ieder van de gevonden resonanties zou aanleiding kunnen geven tot energieoverdracht tussen bepaalde golfpatronen. Daarom zijn we voor elke van deze mogelijke energieoverdrachten nagegaan of deze de symmetrie van de

Fermi-Pasta-Ulam-keten respecteert. En het resultaat was een grote verrassing: geen enkele resonante golfinteractie respecteert de symmetrieën van de keten. Dit betekent dat elke golfinteractie óf niet resonant óf niet symmetrisch is. Dáárom vindt er op lage energieniveaus zo weinig energieoverdracht plaats. Dit resultaat geldt voor iedere Fermi-Pasta-Ulam-keten, dus onafhankelijk van het aantal deeltjes n .

Zo kan de stelling van Nishida met de nodige aanpassingen dus toch bewezen worden en is voor de eerste keer een sluitende verklaring gevonden voor het laag-energetische gedrag van de Fermi-Pasta-Ulam-keten. Op hogere energieniveaus veranderen de eigenfrequenties echter geleidelijk en geldt ons resultaat natuurlijk niet meer. Daarom haast ik mij erbij te zeggen dat veel aspecten van het Fermi-Pasta-

Ulam-probleem raadselachtig blijven en dat ons onderzoek bovendien weer een hele lijst nieuwe vragen oproept. Gelukkig maar...

REFERENTIES

- 1 E. Fermi, J. Pasta en S. Ulam, 'Los Alamos Report LA-1940', E. Fermi, *Collected Papers II* (1955), (Univ. Chicago Press Chicago, 1965), 977–988.
- 2 J. Ford, 'The Fermi-Pasta-Ulam problem: paradox turns discovery', *Phys. Rep.* **213** (1992), 271–310.
- 3 T. Nishida, 'A note on an existence of conditionally periodic oscillation in a one-dimensional anharmonic lattice', *Mem. Fac. Engrg. Kyoto Univ.* **33** (1971), 27–34.
- 4 B. Rink, 'Symmetric invariant manifolds in the Fermi-Pasta-Ulam lattice', *Phys. D* **175** (2003), 31–42.
- 5 B. Rink, 'Direction reversing traveling waves in the even Fermi-Pasta-Ulam lattice', *J. Nonlinear Sci.* **12** (2002), 479–504.
- 6 B. Rink, 'Symmetry and resonance in periodic FPU chains', *Comm. Math. Phys.* **218** (2001), 665–685.