
Dokumentacja Projektowa

Problem FPUT (Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou)

Łukasz Szydlik 331446
Dominik Śledziewski 331447

12 grudnia 2025

Spis treści

1. Opis projektu	2
2. Model fizyczny i matematyczny	2
2.1. Równania ruchu	2
2.2. Całkowanie numeryczne	2
2.3. Analiza modów normalnych	3
3. Wyniki symulacji	3
3.1. Wizualizacja przemieszczeń i energii	3
3.2. Interpretacja zjawiska nawrotów	4
4. Wnioski	4
Literatura	4

1. Opis projektu

Celem projektu jest numeryczna symulacja dynamiki jednowymiarowego łańcucha sprzężonych oscylatorów z nieliniowym oddziaływaniem, znana w literaturze jako problem FPUT (Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou). Eksperyment ten, pierwotnie przeprowadzony w 1955 roku, miał na celu zbadanie, jak szybko energia w układzie nieliniowym ulega ekwipartycji (równomiernemu rozkładowi na wszystkie stopnie swobody).

Symulacja modeluje układ cząstek połączonych nieliniowymi sprężynami. Kluczowym elementem analizy jest obserwacja przepływu energii między modami normalnymi układu. W przeciwieństwie do oczekiwań termodynamicznych, układ ten wykazuje zjawisko nawrotów (ang. *FPUT recurrence*), gdzie energia zamiast rozproszyć się termicznie, cyklicznie powraca do modów o niskich częstościach.

Projekt obejmuje implementację numerycznego rozwiązania równań ruchu metodą Velocity Verlet oraz analizę spektralną energii w czasie.

2. Model fizyczny i matematyczny

Rozważamy łańcuch składający się łącznie z **33 cząstek** (węzłów) o jednakowych masach. W układzie tym **31 cząstek jest ruchomych** (u_1, \dots, u_{31}), natomiast dwie skrajne są unieruchomione (u_0, u_{32}), co odpowiada sztywnym warunkom brzegowym.

Liczba oddziaływań (sprężyn) między węzłami wynosi $N = 32$. Wychylenie i -tej cząstki z położenia równowagi oznaczamy jako u_i .

2.1. Równania ruchu

Siła działająca na cząstki zawiera składową liniową (prawo Hooke'a) oraz nieliniową (człon kwadratowy w sile, odpowiadający modelowi α -FPUT). Równanie przyspieszenia dla i -tej cząstki ($i = 1, \dots, 31$) przyjmuje postać:

$$\ddot{u}_i = (u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) + \alpha [(u_{i+1} - u_i)^2 - (u_i - u_{i-1})^2] \quad (1)$$

gdzie α jest parametrem nieliniowości (w symulacji przyjęto $\alpha = 0.25$). Warunki brzegowe są sztywne, tzn. $u_0 = 0$ oraz $u_{32} = 0$.

2.2. Całkowanie numeryczne

Do rozwiązywania układu równań różniczkowych wykorzystano algorytm **Velocity Verlet**, który jest metodą symplektyczną, co zapewnia dobrą stabilność energetyczną przy długich czasach symulacji. Schemat kroku czasowego Δt :

$$v(t + \frac{\Delta t}{2}) = v(t) + \frac{1}{2}a(t)\Delta t \quad (2)$$

$$u(t + \Delta t) = u(t) + v(t + \frac{\Delta t}{2})\Delta t \quad (3)$$

$$a(t + \Delta t) = F(u(t + \Delta t)) \quad (4)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t + \frac{\Delta t}{2}) + \frac{1}{2}a(t + \Delta t)\Delta t \quad (5)$$

Implementacja algorytmu w języku Python została zvektoryzowana przy użyciu biblioteki **numpy**, co znacząco przyspiesza obliczenia dla wszystkich cząstek jednocześnie.

```
1 def step_verlet(u, v, a, alpha, dt):
2     v_half = v + 0.5 * a * dt
3     u_new = u + v_half * dt
4     a_new = get_acceleration(u_new, alpha)
5     v_new = v_half + 0.5 * a_new * dt
6     return u_new, v_new, a_new
```

Kod 1. Implementacja metody Velocity Verlet

2.3. Analiza modów normalnych

Aby zbadać przepływ energii, układ fizyczny jest rzutowany na przestrzeń modów normalnych. Mody te są wektorami własnymi macierzy oddziaływań liniowych A :

$$A_{ij} = \begin{cases} 2 & \text{dla } i = j \\ -1 & \text{dla } |i - j| = 1 \\ 0 & \text{w p.p.} \end{cases} \quad (6)$$

Energia k -tego modu (E_k) w danej chwili czasu obliczana jest jako suma energii kinetycznej i potencjalnej oscylatora harmonicznego o częstotliwości ω_k :

$$E_k = \frac{1}{2}(\dot{Q}_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2) \quad (7)$$

gdzie Q_k i \dot{Q}_k to odpowiednio amplituda i prędkość w przestrzeni modów (iloczyn skalarny stanu układu i k -tego wektora własnego).

3. Wyniki symulacji

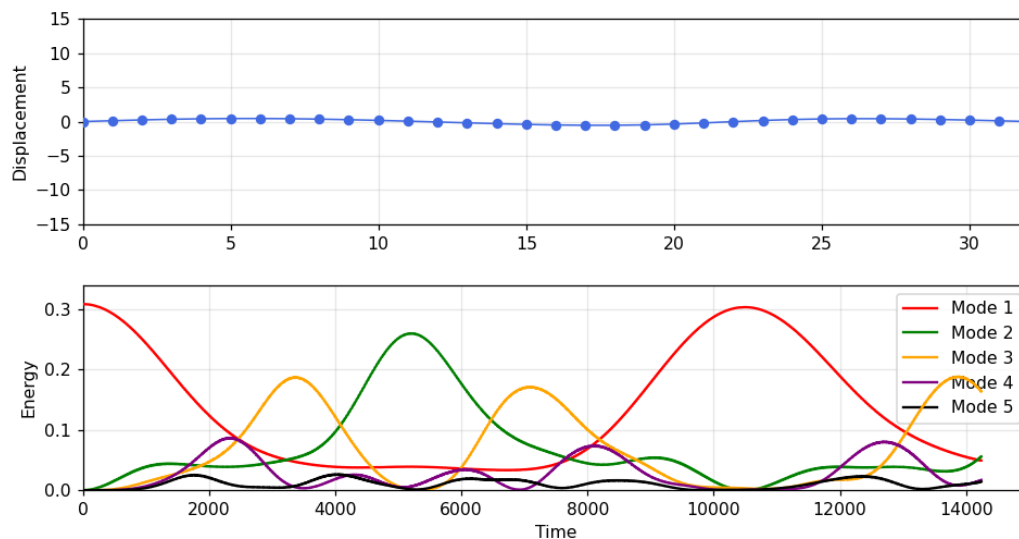
Symulację przeprowadzono dla następujących parametrów, dobranych tak, aby zaobserwować pełny cykl nawrotu FPUT w reżimie słabo nieliniowym:

- Całkowita liczba węzłów: 33 (z czego **31 cząstek ruchomych**).
- Liczba oddziaływań (sprężyn) $N = 32$.
- Parametr nieliniowości $\alpha = 0.25$.
- Krok czasowy $dt = 0.1$.
- Całkowita liczba kroków symulacji została zwiększona, aby uchwycić długoczasowe zachowanie układu.

Warunkiem początkowym było wzbudzenie wyłącznie pierwszego modu normalnego (kształt połówki sinusoidy) o amplitudzie dobranej tak, aby uniknąć chaotyzacji ruchu.

3.1. Wizualizacja przemieszczeń i energii

Poniższy wykres prezentuje ewolucję układu w czasie. Górny panel przedstawia rzeczywiste położenia cząstek w łańcuchu dla wybranej klatki czasowej, natomiast dolny panel ukazuje zmianę energii kinetycznej i potencjalnej dla pięciu pierwszych modów normalnych.



Rysunek 1. Wizualizacja wyników symulacji FPUT. Dolny wykres ukazuje klasyczny paradoks FPUT: Energia początkowo skupiona w Modzie 1 (czerwona linia) przepływa do wyższych modów (zielony, pomarańczowy), by następnie, zamiast ulec termalizacji, powrócić niemal w całości do stanu początkowego (Modu 1) pod koniec cyklu.

3.2. Interpretacja zjawiska nawrotów

Na Rysunku 1 wyraźnie obserwujemy zjawisko **FPUT Recurrence**.

1. **Faza początkowa:** Energia skupiona w Modzie 1 (czerwony) spada, zasilaając kolejne mody nieparzyste (Mod 3, Mod 5) oraz parzyste, co jest widoczne jako wzrost amplitudy pozostałych linii.
2. **Stan metastabilny:** Przez pewien czas energia jest rozdzielona między kilka modów o niskich częstościach.
3. **Nawrót (Recurrence):** W końcowej fazie symulacji następuje proces odwrotny – energia "wraca" z wyższych modów z powrotem do Modu 1. Wykres czerwonej linii ponownie osiąga maksimum, co dowodzi, że układ zapamiętał swój stan początkowy i nie dąży do równowagi termodynamicznej (ekwipartycji energii) w tej skali czasowej.

Jest to charakterystyczna cecha układów słabo nieliniowych, bliskich całkowalności, stojąca w sprzeczności z prostymi założeniami mechaniki statystycznej o szybkim mieszaniu się faz.

4. Wnioski

Zrealizowany projekt potwierdził numerycznie występowanie paradoksu FPUT. Implementacja algorytmu Velocity Verlet okazała się stabilna i pozwoliła na obserwację cyklicznej wymiany energii między modami normalnymi. Nieliniowość w postaci parametru α jest odpowiedzialna za sprzężenie modów, ale nie prowadzi do natychmiastowej termalizacji układu dla zadanych warunków początkowych.

Literatura

- [1] Wikipedia contributors. *Fermi–Pasta–Ulam–Tsingou problem*. Wikipedia, The Free Encyclopedia. https://en.wikipedia.org/wiki/Fermi%E2%80%93Pasta%E2%80%93Ulam%E2%80%93Tsingou_problem
- [2] Flowtography. *FPUT: A Mystery in Memory*. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=Cc8B-tvvReo>
- [3] Aaron Santos. *Physics for Play - Episode 025 - Mode Coupling and the FPUT Problem*. YouTube. https://www.youtube.com/watch?v=o_4hppp9dAo