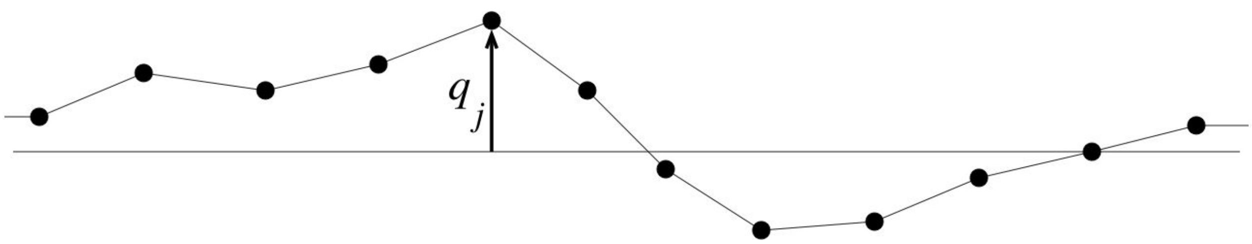
《计算物理学》2019 年春季开卷考试题 (10-16 讲): Problem III

截止日期：2019 年 6 月 10 日 24 点

FPU 模型

这一题中我们讨论世界上第一个计算物理的问题：FPU (Fermi, Pasta, Ulam)[1]模型。这个模型讨论的是一个弹簧振子链



n 个单位质量的质点通过相同的弹簧相互连接，首末两端固定。记 j 号质点偏离平衡位置的距离为 q_j，并定义 $q_0 = q_{n+1} = 0$，系统的哈密顿量写成

$$H_\alpha = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n} p_j^2 + \frac{1}{2}\sum_{j=0}^{n}(q_j - q_{j+1})^2 + \frac{\alpha}{3}\sum_{j=0}^{n}(q_j - q_{j+1})^3, \tag{1}$$

或者

$$H_\alpha = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n} p_j^2 + \frac{1}{2}\sum_{j=0}^{n}(q_j - q_{j+1})^2 + \frac{\beta}{4}\sum_{j=0}^{n}(q_j - q_{j+1})^4, \tag{2}$$

分别称为 α-FPU 模型或 β-FPU 模型。

1. 解析或数值证明对于没有高次项的情形，系统具有守恒量

$$E_k = \frac{1}{2}\dot{Q}_k^2 + \frac{1}{2}\omega_k^2 Q_k^2, \tag{3}$$

   其中有

$$Q_k = \sqrt{\frac{2}{n}}\sum_j \sin\frac{\pi k j}{n+1} q_j, \quad \omega_k = 2\sin\frac{\pi k}{2(n+1)}. \tag{4}$$

   我们通常将不同的 k 称为不同的声子模式。

[1]但在计算机上模拟实现的是另一位女士 Mary Tsingou，关于这段历史可参见 Dauxois, Thierry. “Fermi, Pasta, Ulam, and a Mysterious Lady.” *Physics Today.* **61**, 55 (2008)

2. Fermi 相信，引入非谐项后，系统的能量可以从一个声子模式扩散到全体声子模式上去，从而实现对热平衡过程的模拟。在 FPU 最初的报告中，他们选取 α-FPU 模型，令 $\alpha = 0.25, n = 32, Q_1(0) = 4$ 而其他 $Q_k(0)$ 以及全部 $\dot{Q}_k(0)$ 都为零，计算了 $t \in [0, 160 \times 2\pi/\omega_1]$ 的时间内系统的运动[2]。试重复这个计算，在同一张图上画出 E_1, E_2, E_3, E_4 随时间的变化，时间轴的单位取 $2\pi/\omega_1$。说明这段时间内有一个时刻几乎全部能量都回到了 $k = 1$ 的模式上，并给出具体时刻和能量比例。

3. 给出你认为这个结果的所有可能解释。本小问不以正误计分，在完成这一问之前请不要往下做。

4. 1961 年，Tuck 等人将计算的时间长度进一步向前推进。采用前述参数，给出 $t \in [0, 4000 \times 2\pi/\omega_1]$ 的时间中 E_1 的变化图像。说明这段时间内存在一个更大的回归周期。给出具体的回归时刻和能量比例。

5. 非线性系统的动力学行为往往强烈依赖于参数和初始条件的选取。取 $Q_1 = 20$，其他参数不变。计算并从模式能量的角度描述系统的演化。在多长的时间后系统表现出混乱的特性？讨论此时 $\langle E_k \rangle$ 与 k 的关系，是否和能均分定理相符？

6. 我们将目光转向 β-FPU 模型。自行选择参数，验证 β-FPU 模型中也有与之前类似的现象。

7. 论证对于 n 为偶数的 β-FPU 模型，若初始能量均分布在偶/奇次模式上，则随时间演化后仍然分布在偶/奇次模式上。取 $n = 16, \beta = 1$，初始条件为 $Q_{11} = 1$ 而其余为零，在对数标度上画出 9 至 13 次模式上能量的演化。解释你所观察到的现象。

8. β-FPU 模型可以看做是著名的 KdV 方程

$$\partial_t u + u\partial_x u + \delta^2 \partial_{xxx} u = 0, \tag{5}$$

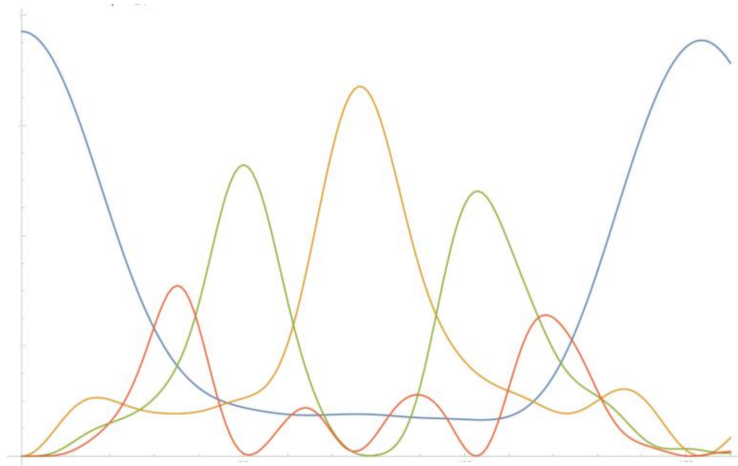
的离散形式。从而，在恰当的参数下我们能在 β-FPU 模型中看到 KdV 方程特有的孤子解。取 $n = 128$，分别对 $\beta = 0, 1$，考虑如下形式的初始条件

$$\begin{aligned}
q_i =& B \cos \frac{\pi k(i - n/2)}{n+1} \Big/ \cosh \left[\sqrt{\frac{3}{2}} B \omega_k (i - n/2) \right], \\
p_i =& \frac{B}{\cosh \left[\sqrt{\frac{3}{2}} B \omega_k (i - n/2) \right]} \left\{ \omega_k \left(1 + \frac{3}{16} \omega_k^2 B^2 \right) \sin \frac{\pi k (i - n/2)}{n+1} \right. \\
& \left. + \sqrt{\frac{3}{2}} B \cos \frac{\pi k (i - n/2)}{n+1} \sin \frac{\pi k}{n+1} \tanh \left[\sqrt{\frac{3}{2}} B \omega_k (i - n/2) \right] \right\},
\end{aligned} \tag{6}$$

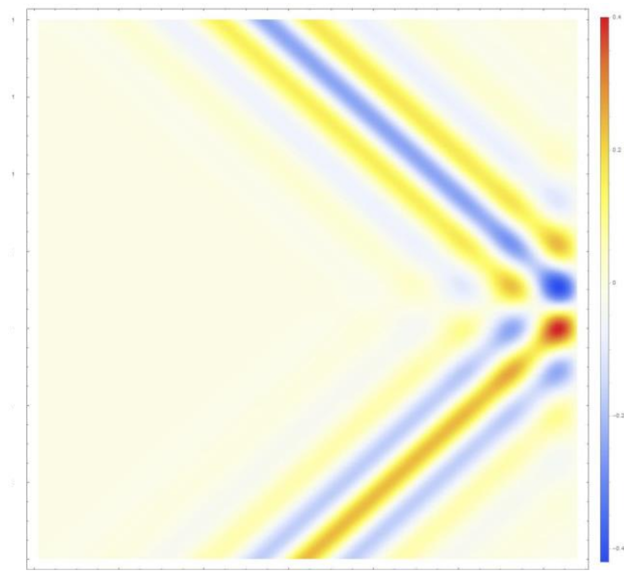
其中取 $B = 0.5, k = 11$，计算系统的运动。用合适图表展示波包的运动、反射、扩散等过程并讨论之。

[2] 这个计算耗费了当时 (1953 年) 最强大的计算机 MANIC 一整天的时间。

第三题 部分参考答案与提示



第二问参考解答。横坐标为时间，纵坐标为能量大小。



第八问参考解答。横坐标为节点编号（从左至右为 1~128），纵坐标为时间，颜色代表 q 值大小。总的时间长度自行给出，但是要能反映波包的运动、反射、扩散等过程。

注意：第 5 问中关于能均分定理的讨论需要给出数值计算的证据，具体需要怎样证明请自行考虑。