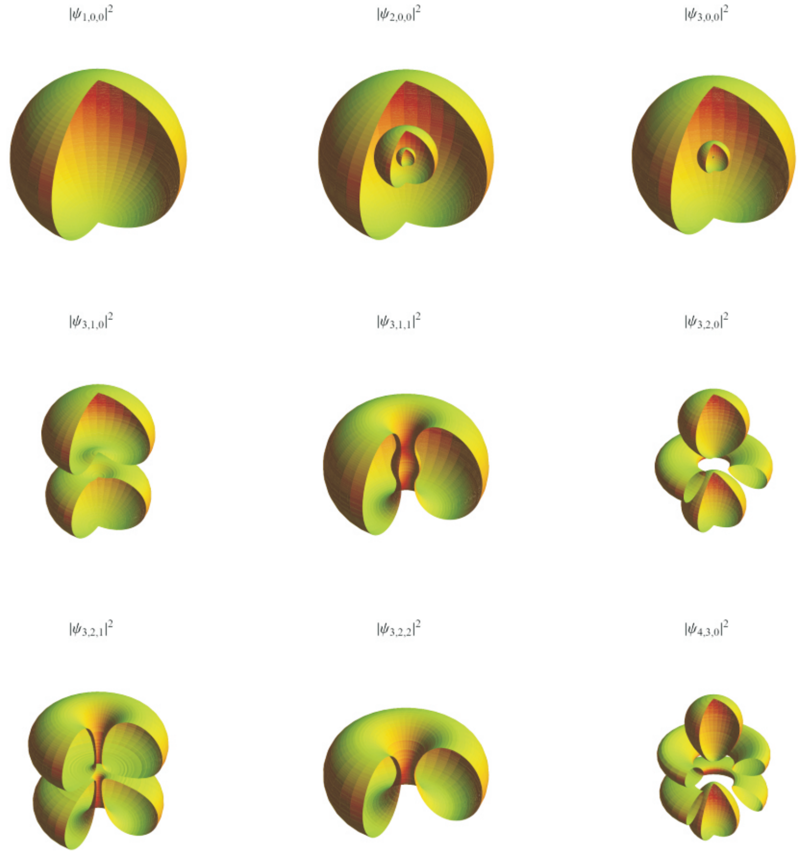
IZDAJA DRUŠTVO MATEMATIKOV, FIZIKOV IN ASTRONOMOV SLOVENIJE

ISSN 0473-7466

2011
Letnik 58
4

OBZORNIK ZA MATEMATIKO IN FIZIKO



OBZORNIK ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Glasilo Društva matematikov, fizikov in astronomov Slovenije
Ljubljana, JULIJ 2011, letnik 58, številka 4, strani 133–168

Naslov uredništva: DMFA–založništvo, Jadranska ulica 19, p. p. 2964, 1001 Ljubljana **Telefon:** (01) 4766 553, 4232 460 **Telefaks:** (01) 4232 460, 2517 281 **Elektronska pošta:** zaloznistvo@dmfa.si **Internet:** http://www.obzornik.si/ **Transakcijski račun:** 03100–1000018787 **Mednarodna nakazila:** SKB banka d.d., Ajdovščina 4, 1513 Ljubljana **SWIFT (BIC):** SKBASI2X **IBAN:** SI56 0310 0100 0018 787

Jezikovno pregledal Janez Juvan.
Računalniško stavila in oblikovala Tadeja Šekoranja.
Natisnila tiskarna COLLEGIUM GRAPHICUM v nakladi 1250 izvodov.

Člani društva prejemajo Obzornik brezplačno. Celoletna članarina znaša 21 EUR, za druge družinske člane in študente pa 10,50 EUR. Naročnina za ustanove je 35 EUR, za tujino 40 EUR. Posamezna številka za člane stane 3,19 EUR, stare številke 1,99 EUR.

DMFA je včlanjeno v Evropsko matematično društvo (EMS), v Mednarodno matematično unijo (IMU), v Evropsko fizikalno društvo (EPS) in v Mednarodno združenje za čisto in uporabno fiziko (IUPAP). DMFA ima pogodbo o recipročnosti z Ameriškim matematičnim društvom (AMS).

Revija izhaja praviloma vsak drugi mesec. Sofinancirata jo Javna agencija za knjigo Republike Slovenije ter Ministrstvo za šolstvo in šport.

Poštnina plačana pri pošti 1102 Ljubljana

NAVODILA SODELAVCEM OBZORNIKA ZA ODDAJO PRISPEVKOV

Revija Obzornik za matematiko in fiziko objavlja izvirne znanstvene in strokovne članke iz matematike, fizike in astronomije, včasih tudi kak prevod. Poleg člankov objavlja prikaze novih knjig s teh področij, poročila o dejavnosti Društva matematikov, fizikov in astronomov Slovenije ter vesti o drugih pomembnih dogodkih v okviru omenjenih znanstvenih ved. Prispevki naj bodo zanimivi in razumljivi širšemu krogu bralcev, diplomantov iz omenjenih strok.

Članek naj vsebuje naslov, ime avtorja (oz. avtorjev), sedež institucije, kjer avtor(ji) dela(jo), izvleček v slovenskem jeziku, naslov in izvleček v angleškem jeziku, klasifikacijo (MSC oziroma PACS) in citirano literaturo. Slike in tabele, ki naj bodo oštevilčene, morajo imeti dovolj izčrpen opis, da jih lahko večinoma razumemo tudi ločeno od besedila. Avtorji člankov, ki želijo objaviti slike iz drugih virov, si morajo za to sami priskrbeti dovoljenje (copyright). Prispevki so lahko oddani v računalniški datoteki PDF ali pa natisnjeni enostransko na belem papirju formata A4. Zaželena velikost črk je 12 pt, razmik med vrsticami pa vsaj 18 pt.

Prispevke pošljite odgovornemu uredniku ali uredniku za matematiko oziroma fiziko na zgoraj napisani naslov uredništva. Vsak članek se praviloma pošlje dvema anonimnima recenzentoma, ki morata predvsem natančno oceniti, kako je obravnavana tema predstavljena, manj pomembna pa je originalnost (in pri matematičnih člankih splošnost) rezultatov. Če je prispevek sprejet v objavo, potem urednik prosi avtorja še za izvorne računalniške datoteke. Le-te naj bodo praviloma napisane v eni od standardnih različic urejevalnikov TEX oziroma LATEX, kar bo olajšalo uredniški postopek.

Avtor se z oddajo članka strinja tudi z njegovo kasnejšo objavo v elektronski obliki na internetu.

PORAVNAVA NIZOV IN DELANNOYJEVA ŠTEVILA

MARKO RAZPET

Pedagoška fakulteta v Ljubljani

Math. Subj. Class. (2010): 05A15, 40B05, 68R15, 92D20

Pokazali bomo, kako je poravnava nizov povezana z Delannoyjevimi števili $D(m,n)$, s katerimi zapišemo število mrežnih poti v množici $\mathbb{N}\times\mathbb{N}$ od točke $(0,0)$ do dane točke (m,n), pri čemer so dovoljeni koraki v smereh $(1,0)$, $(0,1)$ in $(1,1)$. Vpeljali bomo Levenštejnovo razdaljo med nizoma in na kratko predstavili njeno uporabo v genetiki.

SEQUENCE ALIGNMENT AND DELANNOY NUMBERS

We will show how the sequence alignment is connected with the Delannoy numbers $D(m,n)$ which express the number of lattice paths in the set $\mathbb{N}\times\mathbb{N}$ with allowed steps $(1,0)$, $(0,1)$ and $(1,1)$. The Levenshtein distance between two sequences is introduced and its application in genetics is briefly presented.

Uvod

Kdor piše z računalniškim urejevalnikom besedil, zagotovo pozna poravnavo vrstic: levo, desno, sredinsko in obojestransko. Po navadi imamo najraje obojestransko poravnano besedilo, pri čemer sta vnaprej določena levi in desni rob, ki nam kot vidna ali nevidna ravna črta ne dovoljujeta, da bi kakšna črka, številka, ločilo ali kakšen drug znak padel bolj v levo od levega roba oziroma bolj v desno od desnega roba. Pomembno vlogo pri tem igra tudi znak za presledek, kateremu je namenjena posebna tipka. S presledki na primer ločujemo besede in nakažemo nov odstavek, lahko pa si mislimo, da z njimi na desno poravnamo prekratko vrstico. Ker običajno prostori za grafične znake niso enake širine, del težav s poravnavo odpade, ker urejevalniki po potrebi sami rahlo zgoščajo in redčijo razmike med znaki.

Če pa izberemo znake, ki zahtevajo enake širine, potem imamo z obojestransko poravnavo take težave kot nekoč na klasičnih pisalnih strojih. In ravno taka poravnava nas bo v nadaljevanju najbolj zanimala. Spoznali bomo, da je poravnava besed oziroma nizov kar uporabna. Vpeljemo namreč lahko mero, koliko sta si niza blizu. Ker pa so znaki ali elementi niza lahko marsikaj, lahko preverjamo ne le podobnost besedil in s tem odkrivamo na primer plagiatorstvo, ampak tudi podobnost tonskih zapisov in nukleotidnih zaporedij v genetiki. Nekaj več o tem bomo povedali v zadnjem razdelku.

Poravnava nizov

Prej povedano bomo sedaj posplošili. Iz črk, številk, ločil in morebitnih drugih znakov nekega področja, ki ga obravnavamo, sestavimo množico $\mathcal{A}$, ki ji bomo rekli *abeceda* tega področja. Elementom abecede bomo rekli kar *znaki*. V abecedo bomo dodali tudi znak za *presledek*, ki ga bomo označevali z znakom ␣, da bo bolj viden. *Niz* ali *beseda* dolžine m je končno zaporedje $\sigma = a_1 a_2 \dots a_m$, kjer je vsak $a_k \in \mathcal{A}$, z izrazom *prava beseda* pa bomo imenovali niz, v katerem ni znaka za presledek. Tudi v naravnem jeziku namreč v besedah med črkami ni znaka za presledek. Niz $\sigma = a_1 a_2 \dots a_m$ je torej prava beseda, če je v njej vsak $a_k \in \mathcal{A} \setminus \{\text{␣}\}$. Pametno je vpeljati tudi znak za *prazen niz*: $\diamond$. Dolžino niza σ označimo z $|\sigma|$. Za $\sigma = a_1 a_2 \dots a_m$ je torej $|\sigma| = m$. Katero koli nenegativno celo število m je zato lahko dolžina nekega niza. Tako je na primer $|\diamond| = 0$, $|\text{␣␣}| = 2$, $|\texttt{RAKETA}| = 6$ in $|\texttt{RAK␣ETA}| = 7$.

Pravi besedi

$$\sigma = a_1 a_2 \dots a_m\,, \quad \tau = b_1 b_2 \dots b_n$$

poravnamo v enako dolga niza σ' in τ' z dodajanjem znaka ␣ tako, da znaki ostanejo v istem vrstnem redu, znak ␣ pa ne sme biti v σ' in τ' hkrati na isti poziciji. Če bi dovolili nasprotno, bi lahko dobili s poravnavo nize poljubne dolžine s poljubno mnogo presledki. Vzemimo, da sta niza po poravnavi dolžine ℓ:

$$\sigma' = a'_1 a'_2 \dots a'_\ell\,, \quad \tau' = b'_1 b'_2 \dots b'_\ell\,.$$

Pri tem je a'_k eden od a_i ali ␣, b'_k eden od b_i ali ␣, za noben k pa ni $a'_k = b'_k =$ ␣, števila m, n, ℓ pa očitno povezuje relacija $\max(m,n) \leq \ell \leq m+n$. Za prikaz poravnave je najbolje, da niza pišemo drugega nad drugim.

Navedimo nekaj poravnav različnih dolžin besed `OBZORNIK` in `MATEMATIKA`:

```
OB␣␣ZORNIK    OB␣␣ZORNIK␣    OB␣Z␣OR␣N␣IK␣    ␣O␣BZO␣RNIK␣
MATEMATIKA    ␣MATEMATIKA    ␣␣MATEMA␣TIKA    MAT␣EMAT␣IKA
```

Poravnavo pravih besed σ in τ imamo lahko tudi za pretvorbo besede σ v besedo τ ali obratno s tremi transformacijami nad njunimi znaki, in sicer z brisanjem, vrivanjem in zamenjavo (vključujoč ohranjanje).

Ena od poravnav besed `AKSIOM` in `VZROK` dolžine 8 je

```
AKSI␣OM␣
␣V␣ZRO␣K
```

V tem primeru smo po vrsti uporabili naslednjih 8 transformacij:

1. brisanje znaka `A`;
2. zamenjavo znaka `K` z znakom `V`;
3. brisanje znaka `S`;
4. zamenjavo znaka `I` z znakom `Z`;
5. vrivanje znaka `R`;
6. ohranjanje znaka `O`;
7. brisanje znaka `M`;
8. vrivanje znaka `K`.

Po poravnavi dobljena niza spet stisnemo z opustitvijo presledkov:

$$\texttt{AKSI}\text{␣}\texttt{OM}\text{␣} \mapsto \texttt{AKSIOM}, \ \text{␣}\texttt{V}\text{␣}\texttt{ZRO}\text{␣}\texttt{K} \mapsto \texttt{VZROK}.$$

V tem smislu smo prek poravnave besed z brisanjem, vrivanjem in zamenjavo znakov pretvorili eno besedo v drugo. Podobno lahko opišemo tudi obratno transformacijo, to je pretvorbo besede `VZROK` v besedo `AKSIOM`.

Poravnavo besed lahko vpeljemo tudi drugače. Iz abecede $\mathcal{A}$ konstruiramo abecedo $\mathcal{B} = \mathcal{A} \times \mathcal{A}$. Znake nove abecede $\mathcal{B}$ označimo v obliki stolpca:

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \in \mathcal{B} \iff a \in \mathcal{A} \quad \text{in} \quad b \in \mathcal{A}\,.$$

Posebej označimo znak za presledek ␣ v $\mathcal{B}$:

$$\text{␣} \in \mathcal{B} \iff \text{␣} = \begin{bmatrix} \text{␣} \\ \text{␣} \end{bmatrix}.$$

Prave besede v $\mathcal{B}$ so po našem dogovoru končni nizi elementov iz $\mathcal{B} \setminus \{\text{␣}\}$.

Iz dvojice pravih besed $\sigma = a_1 a_2 \ldots a_m$ in $\tau = b_1 b_2 \ldots b_n$ sestavimo novo besedo dolžine ℓ z znaki abecede $\mathcal{B}$ takole:

$$\begin{bmatrix} a'_1 \\ b'_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a'_2 \\ b'_2 \end{bmatrix} \ldots \begin{bmatrix} a'_\ell \\ b'_\ell \end{bmatrix}. \tag{1}$$

Prve koordinate stolpcev so znaki besede σ ali pa ␣. Podobno so druge koordinate znaki besede τ ali ␣. Pri tem je vrstni red znakov brez ␣ v novih nizih enak kot v prvotnih nizih. Nikjer v nizu pa ne sme biti ␣ nad ␣. Če spregledamo oklepaje, dobimo ravno poravnavo besed σ in τ. Torej pri tem nastopajo stolpci treh oblik:

$$\begin{bmatrix} a'_k \\ b'_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{␣} \\ b_i \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} a'_k \\ b'_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_j \\ \text{␣} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} a'_k \\ b'_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_i \\ b_j \end{bmatrix}.$$

V poravnavi dolžine ℓ naj bo v število stolpcev prve vrste, h druge in d tretje vrste. Veljajo torej relacije: $v+h+d=\ell$, $m+v=\ell$, $n+h=\ell$. Iz njih izrazimo:

$$d = m+n-\ell\,, \quad h = \ell - n\,, \quad v = \ell - m. \tag{2}$$

Število vseh poravnav dolžine ℓ besed dolžine m in n označimo s $Q(m,n,\ell)$. To število pa lahko zapišemo s *trinomskim koeficientom.* V besedi (1) je namreč nanizanih ℓ stolpcev, od katerih je v prve, h druge in d tretje vrste. Takih pa je toliko, na kolikor načinov lahko permutiramo ℓ reči, od katerih je v prve, h druge in d tretje vrste, zato je

$$Q(m,n,\ell) = \frac{\ell!}{h!v!d!} = \binom{\ell}{h,v,d}, \quad h+v+d=\ell.$$

Z upoštevanjem izrazov (2) dobimo:

$$Q(m,n,\ell) = \binom{\ell}{n}\binom{n}{m+n-\ell} = \binom{\ell}{m}\binom{m}{m+n-\ell}. \tag{3}$$

Vseh možnih poravnav pa je

$$D(m,n) = \sum_{\ell=\max(m,n)}^{m+n} Q(m,n,\ell). \tag{4}$$

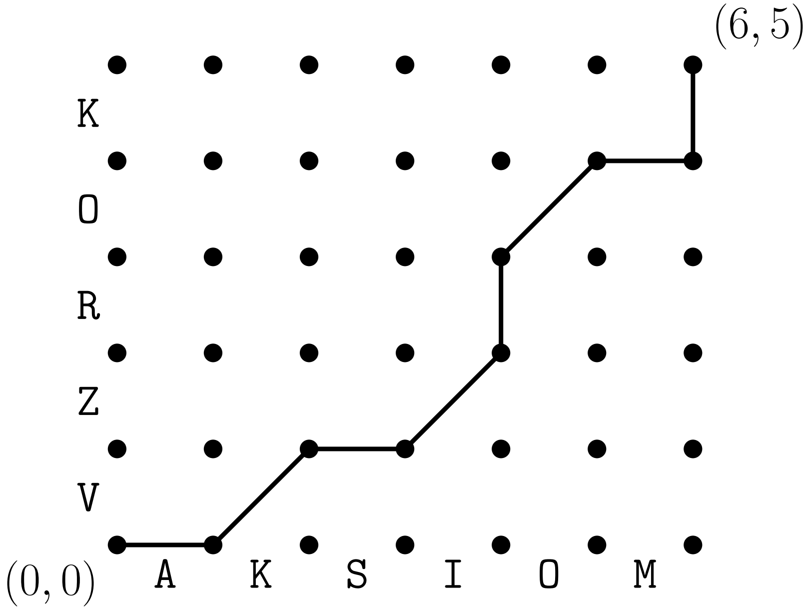
V nadaljevanju bomo z $\mathbb{N}$ označevali množico vseh celih nenegativnih števil, torej $\mathbb{N} = \{0,1,2,3,\ldots\}$. Števila $D(m,n)$ ($(m,n) \in \mathbb{N}\times\mathbb{N}$) imenujemo *Delannoyjeva števila*, ker se je z njimi prvi ukvarjal francoski matematik in častnik *Henri-Auguste Delannoy* (1833–1915) v povezavi s številom šahovskih iger. Več o tem manj znanem matematiku lahko preberemo v [1].

Delannoyjeva števila

Za nazorno ponazoritev poravnav pravih besed dolžin m in n si lahko pomagamo z množico točk

$$\mathcal{M}(m,n) = \{(x,y) : x \in \{0,1,2,\ldots,m\}, y \in \{0,1,2,\ldots,n\}\} \subset \mathbb{N}\times\mathbb{N}.$$

Vsaki poravnavi pravih besed pa lahko povratno enolično priredimo neko pot, ki povezuje nekatere točke v $\mathcal{M}(m,n)$. Pri tem povežemo točki $(0,0)$ in



Slika 1. Delannoyjeva pot k poravnavi besed `AKSIOM` in `VZROK` iz primera.

(m, n) z neko usmerjeno potjo, pri čemer so dovoljeni samo koraki v smeri vektorjev $(1, 0), (0, 1), (1, 1)$ (horizontalni, vertikalni, diagonalni). Vsaka taka pot je *Delannoyjeva pot*.

Do Delannoyjeve poti, ki ustreza poravnavi pravih besed, pridemo tako, da dani poravnavi priredimo korake takole:

$$\begin{bmatrix} a_j \\ \sqcup \end{bmatrix} \longleftrightarrow (1,0), \quad \begin{bmatrix} \sqcup \\ b_j \end{bmatrix} \longleftrightarrow (0,1), \quad \begin{bmatrix} a_i \\ b_j \end{bmatrix} \longleftrightarrow (1,1).$$

Ustrezajo brisanju, vrivanju in zamenjavi znakov pri pretvorbi ene besede v drugo. Pri tem gremo v poravnavi dolžine ℓ od leve proti desni, ustrezno Delannoyjevo pot pa pričnemo v $(0, 0) \in \mathcal{M}(m, n)$, sledimo poravnavam in po ℓ korakih prispemo v $(m, n) \in \mathcal{M}(m, n)$. Poravnavi besed `AKSIOM` in `VZROK`, ki smo jo navedli zgoraj, ustreza Delannoyjeva pot na sliki 1.

Zato je $Q(m, n, \ell)$ ravno število Delannoyjevih poti z ℓ koraki od $(0, 0)$ do (m, n). Taka pot ima $h = \ell - n$ horizontalnih, $v = \ell - m$ vertikalnih in $d = m + n - \ell$ diagonalnih korakov. Število najdaljših Delannoyjevih poti, ki imajo $m + n$ korakov, je

$$Q(m, n, m + n) = \binom{m+n}{m} = \binom{m+n}{n},$$

število najkrajših Delannoyjevih poti z $\max(m,n)$ koraki pa je

$$Q(m,n,\max(m,n)) = \binom{\max(m,n)}{\min(m,n)}.$$

Število vseh Delannoyjevih poti od $(0,0)$ do (m,n) je ravno Delannoyjevo število $D(m,n)$.

Števila $Q(m,n,\ell)$ so simetrična za vsak $\ell \in \mathbb{N}$: $Q(m,n,\ell) = Q(n,m,\ell)$. Prav tako so tudi Delannoyjeva števila simetrična: $D(m,n) = D(n,m)$. Oboja števila pa imajo rekurzijo. Za števila $Q(m,n,\ell)$ pridemo do nje z naslednjim razmislekom. Denimo, da smo v $\ell-1$ koraku prispeli iz točke $(0,0)$ v eno izmed točk $(m-1,n),(m,n-1),(m-1,n-1)$. Takih možnosti je $Q(m-1,n,\ell-1)+Q(m,n-1,\ell-1)+Q(m-1,n-1,\ell-1)$. Iz katere koli od omenjenih točk pa je potreben samo še en korak, da prispemo v točko (m,n). Zato za števila $Q(m,n,\ell)$ za vse $\ell \geq 1$, $m \geq 1$ in $n \geq 1$ velja rekurzija

$$Q(m,n,\ell) = Q(m-1,n,\ell-1)+Q(m,n-1,\ell-1)+Q(m-1,n-1,\ell-1)$$

pri robnih pogojih $Q(0,n,\ell) = \delta_{n,\ell}$ in $Q(m,0,\ell) = \delta_{m,\ell}$, kjer je δ znani Kroneckerjev simbol. Posebej namreč za $m > 0$ pomeni $Q(m,0,\ell)$ število poravnav niza dolžine m in praznega niza $\diamond$. Poravnavo, in to dolžine m, v tem primeru dobimo samo na en način, z brisanjem vseh znakov niza σ. Zato je $Q(m,0,m) = 1$. Analogno najdemo: $Q(0,n,n) = 1$. Prazen niz pa poravnamo s praznim nizom tudi le na en način, zato je $Q(0,0,0) = 1$.

Vpeljimo za $\ell \in \mathbb{N}$ množico parov

$$T(\ell) = \{(i,j) \in \mathbb{N}\times\mathbb{N}, 0 \leq i \leq \ell, 0 \leq j \leq \ell, i+j \geq \ell\}.$$

Na tej množici so števila $Q(m,n,\ell)$ pozitivna, na $\mathbb{N}\times\mathbb{N}\setminus T(\ell)$ pa so enaka 0. Zgled je tabela 3. V funkcionalni analizi bi rekli, da je $T(\ell)$ *nosilec* funkcije $(m,n) \mapsto Q(m,n,\ell)$. Pri danem ℓ velja zanimiva enakost

$$\sum_{(m,n)\in T(\ell)} Q(m,n,\ell) = 3^\ell,$$

ki jo dokažemo z metodo matematične indukcije glede na parameter ℓ in s pravkar dokazano rekurzijo, ki jo imajo števila $Q(m,n,\ell)$.

Za Delannoyjeva števila $D(m,n)$ pa velja za vse $m \geq 1$ in $n \geq 1$ rekurzija

$$D(m,n) = D(m-1,n)+D(m,n-1)+D(m-1,n-1) \qquad (5)$$

$n \uparrow$										
8	1	17	145	833	3649	13073	40081	108545	265729	
7	1	15	113	575	2241	7183	19825	48639	108545	
6	1	13	85	377	1289	3653	8989	19825	40081	
5	1	11	61	231	681	1683	3653	7183	13073	
4	1	9	41	129	321	681	1289	2241	3649	
3	1	7	25	63	129	231	377	575	833	
2	1	5	13	25	41	61	85	113	145	
1	1	3	5	7	9	11	13	15	17	
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	$m \rightarrow$

Tabela 1. Delannoyjeva števila $D(m,n)$.

pri robnih pogojih $D(m,0) = D(0,n) = 1$. Dokažemo jo bodisi iz rekurzije za števila $Q(m,n,\ell)$ in z vsoto (4) ali pa neposredno z naslednjim premislekom.

Denimo, da smo prispeli po Delannoyjevi poti iz točke $(0,0)$ v eno izmed točk $(m-1,n), (m,n-1), (m-1,n-1)$. Takih možnosti je seveda natančno $D(m-1,n) + D(m,n-1) + D(m-1,n-1)$. Iz katere koli od omenjenih točk pa je potreben samo še en dovoljen korak, da prispemo v točko (m,n). Zato za števila $D(m,n)$ velja zgornja rekurzija, s pomočjo katere lahko hitro izračunamo Delannoyjeva števila za majhne m in n (tabela 1).

Obstaja več zapisov števil $D(m,n)$. S formulo (3) na primer dobimo

$$D(m,n) = \sum_{\ell=\max(m,n)}^{m+n} \binom{\ell}{m}\binom{m}{m+n-\ell} = \sum_{\ell=\max(m,n)}^{m+n} \binom{\ell}{n}\binom{n}{m+n-\ell},$$

pa tudi

$$D(m,n) = \sum_{k=0}^{\min(m,n)} \binom{m}{k}\binom{n}{k} 2^k . \tag{6}$$

Slednjo lahko izpeljemo popolnoma kombinatorično. Vsaki Delannoyjevi poti od $(0,0)$ do (m,n) namreč lahko povratno enolično priredimo neki niz simbolov H, V, D, pri čemer le-ti po vrsti označujejo horizontalni, vertikalni in diagonalni korak. Vzemimo v takem nizu na piko podniza $K = HV$, nekakšen levi ovinek ali koleno, in podniz D. Delannoyjevih poti, na katerih se K ali D pojavita natanko k-krat, je ravno

$$\binom{m}{k}\binom{n}{k}2^k.$$

Prvi faktor pomeni število načinov, na katere lahko k-krat nastopi eden od omenjenih podnizov po horizontali dolžine m, drugi faktor število načinov, na katere lahko k-krat nastopi eden od omenjenih podnizov po vertikali dolžine n, tretji faktor pa pove, da k-krat izbiramo med dvema podnizoma. Število vseh Delannoyjevih poti potem dobimo kot rezultat seštevanja po vseh možnih številih k.

Pri malo večjih m in n so števila $D(m,n)$ zelo velika, na primer:

$$D(10,10) = 8\,097\,453\,, \quad D(16,24) = 85\,275\,509\,086\,721.$$

Zato je dobrodošla kakšna ocena. A. Raichev in M. C. Wilson sta v [3] izpeljala asimptotično formulo

$$D(Nm,Nn) \sim \left(\frac{n}{L-m}\right)^{Nn}\left(\frac{m}{L-n}\right)^{Nm}\sqrt{\frac{mn}{2\pi NL(m+n-L)^2}}$$

za $N \to \infty$, kjer je $L = \sqrt{m^2+n^2}$.

Preden končamo razdelek, si še oglejmo, kdaj so trinomski koeficienti največji, in lep primer, v katerem se pojavijo Delannoyjeva števila, čeprav ni neposredno povezan z Delannoyjevimi potmi.

Vemo, da binomski koeficienti z izbranim zgornjim indeksom n in spodnjim indeksom k ($n,k \in \mathbb{N}$) pri lihih n dosežejo dvakrat svojo največjo vrednost, pri sodih pa enkrat. Trinomski koeficienti pa pri izbranem zgornjem indeksu dosežejo svojo največjo vrednost enkrat ali trikrat. Za največjo vrednost Q_ℓ trinomskega koeficienta

$$\binom{\ell}{i,j,k} = \frac{\ell!}{i!j!k!} \quad (i,j,k \geq 0, i+j+k=\ell)$$

namreč dobimo izraz

$$Q_\ell = \binom{\ell}{\lfloor\frac{\ell}{3}\rfloor, \lfloor\frac{\ell+1}{3}\rfloor, \lfloor\frac{\ell+2}{3}\rfloor}.$$

Razlikovati je treba tri možnosti glede na ostanek pri deljenju števila ℓ s 3. Označimo z m_ℓ in n_ℓ tisti števili, pri katerih je $Q_\ell = Q(m_\ell, n_\ell, \ell)$. V tabeli 2 so zbrane vse možnosti.

ℓ	m_ℓ	n_ℓ	Q_ℓ
3λ	2λ	2λ	$\frac{\ell!}{\lambda!^3}$
$3\lambda+1$	2λ	$2\lambda+1$	$\frac{\ell!}{\lambda!^2(\lambda+1)!}$
	$2\lambda+1$	2λ	
	$2\lambda+1$	$2\lambda+1$	
$3\lambda+2$	$2\lambda+1$	$2\lambda+2$	$\frac{\ell!}{\lambda!(\lambda+1)!^2}$
	$2\lambda+2$	$2\lambda+1$	
	$2\lambda+1$	$2\lambda+1$	

Tabela 2. Števila Q_ℓ so odvisna od oblike indeksa ℓ.

Da ne bi imeli napačnega vtisa, da smo Delannoyjeva števila vpeljali zgolj zaradi štetja poravnav nizov in Delannoyjevih poti, povejmo, da se pojavljajo še marsikje, o čemer pa lahko več izvemo v izčrpni obravnavi [5]. Omenimo samo primer. Za vsako pozitivno celo število n in vsako nenegativno celo število m je v množici

$$\mathcal{O}_n(m) = \{(x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \mathbb{Z}^n : |x_1| + |x_2| + \ldots + |x_n| \leq m\}$$

natančno $D(m, n)$ točk. Podrobnosti najdemo na primer v [4].

$n \uparrow$ \ $m \rightarrow$	0	1	2	3	4	5	6	7	8
8	1	8	28	56	70	56	28	8	1
7		8	56	168	280	280	168	56	8
6			28	168	420	$\boxed{\mathbf{560}}$	420	168	28
5				56	280	$\boxed{\mathbf{560}}$	$\boxed{\mathbf{560}}$	280	56
4					70	280	420	280	70
3						56	168	168	56
2							28	56	28
1								8	8
0									1

Tabela 3. Števila $Q(m, n, 8)$ na nosilcu $T(8)$. Največja so v okvirčkih.

Vemo, da je $\mathbb{R}^n$ poln metrični prostor za normo $||(x_1, x_2, \ldots, x_n)|| = |x_1| + |x_2| + \ldots + |x_n|$ in da so v tem prostoru zaprte krogle s središčem v točki $(0, 0, \ldots, 0)$ in s polmerom $r \geq 0$ množice

$$\mathcal{K}_n(r) = \{(x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n : |x_1| + |x_2| + \ldots + |x_n| \leq r\}.$$

Potemtakem množica $\mathcal{O}_n(m)$ vsebuje natanko vse točke s celoštevilskimi koordinatami krogle $\mathcal{K}_n(m)$ in $D(m,n)$ pove število teh točk.

Samo po sebi je zanimivo, kako poimenovati nekatere geometrijske objekte v prostoru $\mathbb{R}^n$. Za $n = 1$ imamo opravka kar z množico $\mathbb{R}$, ki jo točka $x_1 = 0$ razdeli na dva dela: na pozitivna in negativna števila. Krogla $\mathcal{K}_1(r)$ pa je kar daljica s krajiščema v točkah $-r$ in r. Za $n = 2$ koordinatni osi $x_1 = 0$ in $x_2 = 0$ razdelita ravnino $\mathbb{R}^2$ na 4 *kvadrante*, krogla $\mathcal{K}_2(r)$ pa je običajni kvadrat z oglišči $(\pm r, 0)$ in $(0, \pm r)$. Za $n = 3$ koordinatne ravnine $x_1 = 0, x_2 = 0$ in $x_3 = 0$ razdelijo prostor $\mathbb{R}^3$ na 8 *oktantov*, krogla $\mathcal{K}_3(r)$ pa je oktaeder z oglišči $(\pm r, 0, 0)$, $(0, \pm r, 0)$ in $(0, 0, \pm r)$.

V splošnem primeru koordinatne hiperravnine $x_1 = 0, x_2 = 0, \ldots, x_n = 0$ razdelijo prostor $\mathbb{R}^n$ na 2^n delov, *ortantov*. Krogla $\mathcal{K}_n(r)$ pa je n-razsežno *hipertelo* z oglišči

$$(\pm r, 0, 0, \ldots, 0),\ (0, \pm r, 0, \ldots, 0),\ \ldots,\ (0, 0, 0, \ldots, \pm r).$$

Imena za to hipertelo so različna. Po analogiji s primerom $n = 3$ mu pravijo n-razsežni *hiperoktaeder*. V uporabi pa sta tudi imeni *križni politop* in *ortopleks*. Za naravno število m ima torej n-razsežni hiperoktaeder natanko $D(m,n)$ celoštevilskih točk.

Levenštejnova razdalja

Videli smo, da vsaki poravnavi pravih besed $\sigma = a_1a_2\ldots a_m$ in $\tau = b_1b_2\ldots b_n$ v niza $\sigma' = a'_1a'_2\ldots a'_\ell$ in $\tau' = b'_1b'_2\ldots b'_\ell$ ustreza neka Delannoyjeva pot med točkami množice $\mathcal{M}(m,n)$ in obratno. Delu poravnave na j-tem mestu, zapisane s stolpcem oblike

$$\begin{bmatrix} a'_j \\ b'_j \end{bmatrix},$$

pa lahko določimo tudi *kazen* ali *ceno* $c(j, \sigma', \tau')$. Ta kazen je pozitivna, vzeli bomo kar 1, če sta komponenti različni, in 0 sicer. To se pravi:

$$c(j, \sigma', \tau') = \begin{cases} 1, & \text{če je} \quad a'_j \neq b'_j\,, \\ 0, & \text{če je} \quad a'_j = b'_j\,. \end{cases}$$

Isto lahko zapišemo tudi z relacijo $c(j, \sigma', \tau') = \nu(a'_j \neq b'_j)$, pri čemer $\nu(I)$ pomeni Boolovo vrednost (1 ali 0) izjave I. Celotno kazen ali ceno poravnave pa definiramo kot

$$c(\sigma', \tau') = \sum_{j=1}^{\ell} c(j, \sigma', \tau').$$

Želimo pa si, da je $c(\sigma', \tau')$ najmanjša. Najmanjša kazen poravnave besed σ, τ je *Levenštejnova razdalja* $d_L(\sigma, \tau)$ med njima. Poimenovana je po Vladimirju Iosifoviču Levenštejnu, leta 1935 rojenem ruskem znanstveniku, uveljavljenem na področju teorije informacij in kod za popravljanje napak. Za vsako besedo σ je $d_L(\sigma, \sigma) = 0$ in $d_L(\sigma, \diamond) = |\sigma|$. Levenštejnova razdalja med besedama pove najmanjše število vrivanj, brisanj in zamenjav znakov, ki so potrebni za poravnavo teh besed.

Od poravnav

```
AKSI␣OM␣      AKSIOM
␣V␣ZRO␣K      VZR␣OK
.....=..      ....=.
```

ima prva kazen $c = 7$, druga pa najmanjšo, $c = 5$. Znaki pod poravnavo povejo kazen: pika 1 kazensko točko, enačaj nobene. Zato je v našem primeru $d_L(\mathtt{AKSIOM}, \mathtt{VZROK}) = 5$. Enako kazen imajo lahko različne poravnave istih besed.

Algoritem za iskanje Levenštejnove razdalje med nizoma najdemo v marsikaterem viru s tega področja, v našem jeziku je lepo opisan v [6]. Zato bomo zgolj navedli ta algoritem za iskanje razdalje $d_L(\sigma, \tau)$ besed

$$\sigma = a_1 a_2 \ldots a_m\,, \quad \tau = b_1 b_2 \ldots b_n,$$

ki nam da tudi Delannoyjevo pot ustrezne poravnave. Rešitev je lahko več.

Definiramo števila $L(i, j)$, kjer je $0 \leq i \leq m$ in $0 \leq j \leq n$. Najprej za $0 \leq i \leq m$ in $0 \leq j \leq n$ postavimo

$$L(i, 0) = i, L(0, j) = j. \tag{7}$$

Nato računamo rekurzivno z relacijo

$$L(i, j) = \min(L(i-1, j) + 1, L(i, j-1) + 1, L(i-1, j-1) + \nu(a_i \neq b_j))$$

in na koncu dobimo $d_L(\sigma, \tau) = L(m, n)$. Z uvedbo polkolobarja $(\mathbb{R} \cup \{\infty\}, \oplus, \odot)$, v katerem sta definirani operaciji $\oplus$ in $\odot$ s formulama

$$x \oplus y = \min(x, y) \quad \text{in} \quad x \odot y = x + y,$$

lahko zapišemo

$$L(i, j) = 1 \odot L(i-1, j) \oplus 1 \odot L(i, j-1) \oplus \nu(a_i \neq b_j) \odot L(i-1, j-1), \tag{8}$$

kar spominja na rekurzijo Delannoyjevih števil v obliki

$$D(i, j) = 1 \cdot D(i-1, j) + 1 \cdot D(i, j-1) + 1 \cdot D(i-1, j-1)\,.$$

S polkolobarjem $(\mathbb{R} \cup \{\infty\}, \oplus, \odot)$ se ukvarja *tropska matematika*, ki je dobila ime po vremenskih lastnostih Brazilije, kjer jo je okrog leta 1990 utemeljila skupina francoskih in brazilskih matematikov kot samostojno teorijo.

R	6	5	4	4	3	2	$\boxed{\mathbf{3}}$
E	5	4	3	3	2	2	3
T	4	3	3	2	1	2	3
S	3	2	2	1	2	3	4
I	2	1	1	2	3	4	5
S	1	0	1	2	3	4	5
	0	1	2	3	4	5	6
		S	E	S	T	R	A

Tabela 4. Števila $L(i, j)$.

Pogosto je s tem v zvezi omenjen matematik in informatik madžarskega rodu Imre Simon (1943–2009). V tropsko matematiko spadata na primer tropska geometrija in tropska algebra. Tropska matematika je pripravna tudi za obravnavo nekaterih problemov kombinatorike in dinamičnega programiranja, kamor uvrščamo tudi prej opisano iskanje Levenštejnove razdalje med nizoma.

Oglejmo si primer etimološko bližnjih besed SESTRA in SISTER. Z uporabo robnih pogojev (7) in rekurzije (8) izpolnimo tabelo 4 števil $L(i, j)$.

Torej je $d_L(\texttt{SESTRA}, \texttt{SISTER}) = L(6, 6) = 3$. Od $L(6, 6)$ naredimo obratno Delannoyjevo pot do $L(0, 0)$. Splošno: v levo, če je $L(i - 1, j) < L(i, j)$; navzdol, če je $L(i, j - 1) < L(i, j)$; diagonalno, če je $L(i - 1, j - 1) \leq L(i, j)$. V našem primeru imamo dve rešitvi:

R	6	5	4	4	3	2	**3**	R	6	5	4	4	3	**2**	**3**
E	5	4	3	3	2	**2**	3	E	5	4	3	3	**2**	2	3
T	4	3	3	2	**1**	2	3	T	4	3	3	2	**1**	2	3
S	3	2	2	**1**	2	3	4	S	3	2	2	**1**	2	3	4
I	2	1	**1**	2	3	4	5	I	2	1	**1**	2	3	4	5
S	1	**0**	1	2	3	4	5	S	1	**0**	1	2	3	4	5
	0	1	2	3	4	5	6		**0**	1	2	3	4	5	6
		S	E	S	T	R	A			S	E	S	T	R	A

Tabela 5. Ustrezni Delannoyjevi poti sta naznačeni s števili v krepkem tisku.

Ustrezni poravnavi sta:

```
SESTRA     SEST␣RA
SISTER     SISTER␣
=.==..     =.==.=.
```

Poravnava nizov in genetika

Že skoraj 70 let (od leta 1944, veliko o tem je v [7]) je znano, da so v vseh živih organizmih razen v nekaterih virusih nosilke dednih informacij molekule deoksiribonukleinske kisline (DNK). Molekulo DNK si predstavljamo kot dvojno vijačnico, sestavljeno iz riboznih (sladkornih) in fosfatnih gradnikov. Obe vijačnici pa prečno povezujejo pari dušikovih baz adenin (A), citozin (C), gvanin (G) in timin (T). Vedno sta v komplementarnem paru: adenin in timin ter citozin in gvanin. Molekulo DNK si lahko predstavljamo tudi kot lestev, ki smo jo zvili okoli njene vzdolžne simetrale, klini lestve pa so pari dušikovih baz. Tako zgradbo sta leta 1953 na podlagi svojih in predhodnih raziskav drugih znanstvenikov predvidela molekularni biolog in fizik F. H. Crick (1916–2004) in molekularni biolog J. D. Watson (rojen leta 1928), ki sta leta 1962 skupaj s fizikom in molekularnim biologom M. D. Wilkinsom (1916–2004) prejela Nobelovo nagrado za fiziologijo ali medicino. Slednji je z rentgensko metodo potrdil predvidevanje prvih dveh.

Vzdolž izbrane vijačnice molekule DNK si sledijo dušikove baze v nekem zaporedju, ki ga vedno beremo v dogovorjeni smeri, vzdolž preostale vijačnice pa v obratnem komplementarnem zaporedju. Zaporedje lahko obravnavamo kot niz znakov abecede $\{A, C, G, T, \texttt{-}\}$. Črtico $\texttt{-}$ je smiselno pridružiti abecedi, ker z njo v zaporedju označimo *izbris* ali *delecijo* posamezne baze. V nizu baz je zakodiran dedni zapis organizma. Genetiki s posebnim postopkom pridejo do teh nizov, jih poravnavajo in primerjajo med sabo. Tako ugotavljajo na primer evolucijsko sorodnost med organizmi, ki jim DNK pripada.

Povezavo med številom poravnav nizov in Delannoyjevimi potmi ter uporabo v genetiki obravnava veliko del, na primer [2].

LITERATURA

[1] C. Banderier, S. Schwer, *Why Delannoy numbers?*, Journal of Statistical Planning and Inference **135** (11/2005), str. 40–54.

[2] L. Pachter, B. Sturmfels, *The mathematics of phylogenomics*, SIAM Review **49** (2007), št. 1, str. 3–31.

[3] A. Raichev, M. C. Wilson, *A new method for computing asymptotics of diagonal coefficients of multivariate generating functions*, arXiv:math/0702595v1, 9 str.

[4] M. Razpet, *Nekaj primerov kombinatoričnega preštevanja*, Matematika v šoli **13** (2007), št. 1–2, str. 78–96.

[5] R. A. Sulanke, *Objects counted by the Delannoy numbers*, Journal of Integer Sequences **6** (2003), članek 03.1.5, 19 str.

[6] A. Taranenko, *Razdalja med nizi*, Presek **35** (2007/08), št. 1, str. 25–27.

[7] J. D. Watson, A. J. Berry, *DNK – skrivnost življenja*, Modrijan, Ljubljana, 2007.

PERIODNA PREGLEDNICA IN ZGRADBA ATOMOV

JANEZ STRNAD

Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

PACS: 31.15.bt

Mednarodno leto kemije 2011 „bo proslavilo dosežke kemije in njene prispevke k blaginji človeštva“. Ob tej priliki je vredno pregledati kvantne korenine periodne preglednice elementov. To je stičišče fizike in kemije, pomembno za poučevanje obeh. V kemiji razpravo pogosto začnejo s statističnim modelom atoma. Ta model okvirno pojasni vrstni red, v katerem elektroni v atomih polnijo podlupine $(n,\ l)$, ki jih označujeta glavno kvantno število n in obhodno kvantno število l. Vrstni red izraža Madelungovo pravilo: elektroni polnijo podlupine z naraščajočo vsoto $n+l$, pri enaki vsoti pa z naraščajočim n.

THE PERIODIC TABLE AND THE STRUCTURE OF ATOMS

The Internationl year of chemistry 2011 „will celebrate the achievements of chemistry and its contributions to the well-being of mankind“. On this occasion it appears worthwhile to review the quantum roots of the periodic table of elements. This is a point of contact of physics and chemistry, important for the teaching of both. In chemistry the discussion is often begun with the statistical model of the atom. In this model the order in which electrons are filling the subshells $(n,\ l)$, characterized by the principal quantum number n and the orbital quantum number l, can be understood. The order is expressed by the Madelung rule: the subshells fill up in the order of the increasing sum $n+l$ and for equal sums in the order of increasing n.

Thomas-Fermijev model

Satyendranath Bose, profesor fizike v Daki, je leta 1923 članek, ki mu ga je zavrnila angleška revija, poslal Albertu Einsteinu, s katerim sta prej izmenjala nekaj pisem. Einstein je članek prevedel in ga leta 1924 dal objaviti s pohvalno pripombo. Bose je ugotovil, da v faznem prostoru vsakemu stanju ustreza celica s prostornino h^3 s Planckovo konstanto h. Vsaka točka faznega prostora enega delca s šestimi dimenzijami – tri opišejo lego delca in tri njegovo gibalno količino – podaja stanje delca. V letih 1924 in 1925 je Einstein na Bosejev način obdelal plin in napovedal *Bose-Einsteinovo kondenzacijo*. Privzel je, da dano stanje lahko zasede poljubno število delcev.

Enrico Fermi je leta 1926 raziskal množico delcev, za katere velja Paulijeva prepoved, da danega stanja ne more zasesti več delcev kot eden. S tem je postavil osnove Fermi-Diracove statistike. Raziskovanje je nadaljeval in leto zatem razvil statistični model atoma [1]. Enaka misel je vodila Llewellyna Thomasa, tako da model imenujemo po obeh [2]. Okoli atomskega jedra se giblje veliko elektronov, vezanih na jedro. Naboj elektronov, porazdeljenih okoli jedra, določa električno polje, to pa določa energijo elektronov. Povezava obojega napove porazdelitev elektronov po razdalji. Rezultat velja okvirno za vse atome, ki imajo dovolj elektronov, da jih smemo obravnavati statistično. S tem izgubimo značilnosti atomov posameznih elementov, a pridobimo teoretično utemeljen pregled nad atomi vseh elementov.

Izhodišče koordinatnega sistema postavimo v jedro in množico elektronov obravnavamo, kot da bi bili neodvisni drug od drugega. Glede lege in glede hitrosti so vse smeri enakovredne. Zanimamo se za delce v tanki krogelni lupini med polmeroma od r do $r + dr$ s prostornino $4\pi r^2 dr$. Po gibalni količini pa zajamemo delce v notranjosti *Fermijeve krogle* s polmerom največje gibalne količine p_F in prostornino $4\pi p_F^3/3$. Lego obravnavamo drugače kot gibalno količino, ker nam gre za porazdelitev elektronov po oddaljenosti od jedra. Tako dobimo število stanj v krogelni lupini:

$$dN = 2 \cdot 4\pi r^2 dr \cdot 4\pi p_F^3/(3h^3)\,.$$

Z dvojko upoštevamo spin elektrona z dvema mogočima usmeritvama, s h^3 v imenovalcu pa prostornino fazne celice.

Elektroni se gibljejo v vseh mogočih smereh z velikostjo gibalne količine od 0 do p_F. Največja gibalna količina ustreza največji kinetični energiji $W_{k0} = \frac{1}{2}p_F^2/m$, če je m masa elektrona. Polna energija vezanega elektrona, ki jo sestavljata kinetična in potencialna energija $W = W_k + W_p$, je negativna. Elektroni s pozitivno polno energijo bi zapustili atom. V skrajnem primeru velja potem $\frac{1}{2}p_F^2/m = -W_p$. Krogelne lupine smo izbrali, da znotraj vsake lupine potencialno energijo lahko obravnavamo kot konstantno.

V osnovnem stanju atoma so vsa stanja pod energijo $\frac{1}{2}p_F^2/m$ zasedena, nad njo pa nezasedena. Število zasedenih stanj določa število elektronov:

$$dN = 32\pi^2 r^2 (-2mW_p(r))^{3/2} dr/(3h^3)\,. \tag{1}$$

Do porazdelitve elektronov v atomu po razdalji od jedra nas pripelje Gaussov zakon o električnem pretoku. Električni pretok skozi krogelno ploskev s polmerom r je enak naboju v notranjosti ploskve: $DS = \varepsilon_0 E \cdot 4\pi r^2 = -e_0 \int dN$. Pri tem je $-e_0$ naboj elektrona in $E = (dW_p/dr)/e_0$ jakost električnega polja. Električni pretok je:

$$\varepsilon_0 E \cdot 4\pi r^2 = \varepsilon_0 \frac{1}{e_0}\frac{dW_p}{dr} \cdot 4\pi r^2 = e_0 Z - e_0 \int_0^r \frac{dN}{dr} dr\,.$$

Enačbo odvajamo po r in z (1) dobimo:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\,\frac{dW_p}{dr}\right) = -\frac{8e_0^2\pi}{3\varepsilon_0 h^3}\,r^2(-2mW_p)^{3/2}\,.$$

Potencialno energijo elektrona v atomu nastavimo kot

$$W_p(r) = -e_0^2 Z\chi(r)/(4\pi r)\,.$$

Pri tem je Z vrstno število elementa, ki je enako številu pozitivnih osnovnih nabojev jedra in številu elektronov v nemotenem atomu. Funkcija $\chi(r)$ meri odstopanje od potencialne energije elektrona v polju golega jedra, v katerem bi veljalo $\chi(r) = 1$. To zares velja zelo blizu jedra: $\chi(0) = 1$. V zelo veliki razdalji pa ni polja, ker naboj elektronskega oblaka izravna naboj jedra: $\chi(\infty) = 0$. Razdaljo r izrazimo z novo spremenljivko $r = \alpha x$ z $\alpha = \frac{1}{2}(3\pi/4)^{2/3} r_B/Z^{1/3}$. Bohrov polmer je $r_B = \varepsilon_0 h^2/(\pi m e_0^2) = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(e_0^2 m) = 0{,}0528$ nm. Pri tem je $\hbar = h/(2\pi)$. Naposled dobimo diferencialno enačbo:

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \frac{\chi(x)^{3/2}}{x^{1/2}}\,, \quad \chi(0) = 1, \quad \chi(\infty) = 0\,, \tag{2}$$

ki so jo velikokrat rešili numerično [2]. Thomas-Fermijev model je uporabno orodje za raziskovanje pozitivnih in celo negativnih ionov ter sipanja. Tu se zanimamo samo za nevtralne atome v osnovnem stanju in model izkoristimo le v poučevalske namene.

Vrtilna količina

Energija elektronov v atomu je odvisna še od obhodne vrtilne količine. Tudi v tem koraku sledimo Fermiju [1]. V Fermijevi krogli, v kateri so vse smeri enakovredne, si zamislimo os skozi izhodišče in krajevni vektor $\vec{r}$ v smeri te osi. Vektorju gibalne količine $\vec{p}$, ki ustreza točki v krogli, priredimo komponento $p_\perp$ v ravnini, pravokotni na os. Vektor obhodne vrtilne količine elektrona $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ ima tedaj velikost $L = rp_\perp$. Pri računanju porazdelitve elektronov po komponenti gibalne količine $p_\perp$ se zgledujemo po prejšnjem računu. Elektronom s komponento gibalne količine med $p_\perp$ in $p_\perp + dp_\perp$ ustreza tanka valjasta plast z obsegom osnovne ploskve $2\pi p_\perp$, višino $2\sqrt{p_F^2 - p_\perp^2}$ in debelino $dp_\perp$, torej s prostornino $4\pi p_\perp\sqrt{p_F^2 - p_\perp^2}\,dp_\perp$. Velikost vrtilne količine $L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$ razvijemo v vrsto za velik l: $L = (l + \frac{1}{2})\hbar$. Zapisani izraz predelamo in za spremembo komponente gibalne količine $dp_\perp = dL/r$ vstavimo $\hbar/r$, ker se obhodno kvantno število l spreminja v skokih po 1:

$$4\pi \frac{L}{r}\frac{\hbar}{r}\sqrt{p_F^2 - \frac{L^2}{r^2}} = \frac{h^2}{\pi r^2}\,(l+\tfrac{1}{2})\sqrt{p_F^2 - \tfrac{L^2}{r^2}}\,.$$

Tako smo poskrbeli za porazdelitev elektronov po komponenti vrtilne količine. Upoštevati moramo še krajevno porazdelitev. To naredimo tako, da dobljeni izraz pomnožimo s prostornino tanke krogelne lupine $4\pi r^2 dr$:

$$dN_l = \frac{2}{h^3}\,\frac{h^2}{\pi r^2}\,(l+\tfrac{1}{2})\sqrt{p_F^2 - \tfrac{L^2}{r^2}}\cdot 4\pi r^2 dr = \tfrac{4(2l+1)}{h}\sqrt{p_F^2 - \tfrac{L^2}{r^2}}\,dr\,.$$

Prva dvojka zopet upošteva dve usmeritvi spina in h^3 v imenovalcu prostornino fazne celice. Pod korenom vstavimo $p_F^2 = -2mW_p = 2m(Ze_0^2/4\pi\varepsilon_0 r)\chi(r)$ in $L^2 = (l+\frac{1}{2})^2\hbar^2$. S spremenljivko $x = r/\alpha$ sledi:

$$dN_l = \frac{2(2l+1)}{\pi}\sqrt{\frac{a\chi(x)}{x} - \frac{b}{x^2}}\,dx \qquad (3)$$

z $a = (3\pi Z/4)^{2/3}$ in $b = (l+\frac{1}{2})^2$. Porazdelitev elektronov po obhodnem kvantnem številu l dobimo, ko v enačbi (3) integriramo po območju, na katerem je izraz pod korenom pozitiven. Fermi je vse zapleteno računanje opravil numerično.

Za utemeljitev periodne preglednice potrebujemo splošen račun, zato uporabimo približek za funkcijo $\chi(x)$. Dokaj natančen preprost približek $\chi_T(x) = 1/(1+cx)^2$ s $c = (\pi/8)^{2/3}$ je leta 1954 predložil T. Tietz [3]. Približek v bližini izhodišča odstopa od funkcije $\chi(x)$ in v izhodišču ne zrase čez vse meje. Vendar približek izpolnjuje zahtevo $\int_0^\infty \sqrt{x}\chi^{3/2}(x)\,dx = 1$, ki sledi iz zveze $N = Z\int_0^x \sqrt{x}\chi^{3/2}(x)dx$ in ki nadomesti robni pogoj $\chi(\infty) = 0$ [4].

$$N_l = \frac{2(2l+1)}{\pi}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{\frac{a}{x(1+cx)^2} - \frac{b}{x^2}}\,dx$$

integriramo med ničlama, med katerima je izraz pod korenom pozitiven. Ta izraz predelamo v:

$$\frac{-bc^2(x^2 + (2/c - a/(bc^2))x + 1/c^2)}{x^2(1+cx)^2}$$

in izračunamo ničli:

$$x_1 = \frac{a}{2bc^2} - \frac{1}{c} - \sqrt{\frac{a^2}{4b^2c^4} - \frac{a}{bc^3}} \quad \text{in} \quad x_2 = \frac{a}{2bc^2} - \frac{1}{c} + \sqrt{\frac{a^2}{4b^2c^4} - \frac{a}{bc^3}}\,.$$

Račun integralov ob pomoči tablic ni zapleten, a je zamuden. Rezultat pa je preprost [5], [4], [6]:

$$N_l = \frac{2(2l+1)}{\pi} \cdot \pi \left(\sqrt{\frac{a}{c}} - 2\sqrt{b} \right) = 2(2l+1)((6Z)^{1/3} - (2l+1)) \,. \qquad (4)$$

Madelungovo pravilo

Erich Madelung je postavil pravilo: „Urejevalno načelo [...] je leksikografska urejenost po številih $n+l$, n“ in pristavil: „Teoretične utemeljitve prav tega vrstnega reda še ni.“ [7] Po tem pravilu elektroni zasedajo podlupine $(n,\ l)$ po naraščajoči vsoti glavnega in obhodnega kvantnega števila $n+l$. Če je vsota enaka, pa se vrstni red ravna po naraščajočem glavnem kvantnem številu.[1] Madelung je načelo spoznal leta 1926 [4], objavil pa v tretji izdaji svoje knjige [7]. Prvi del načela o vsoti $n+l$ je objavil Charles Janet že leta 1927.

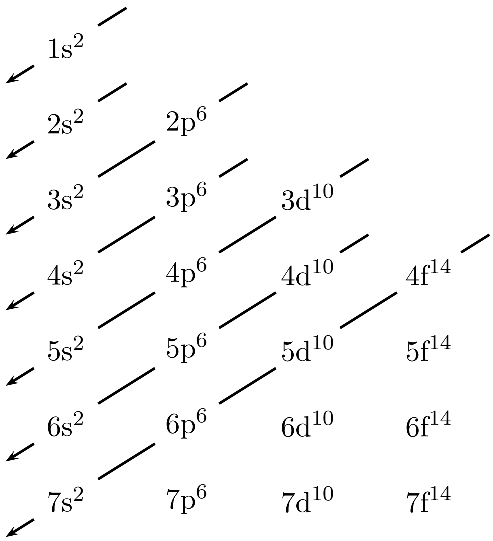
Vrednosti obhodnega kvantnega števila zaznamujemo s simboli: $l = 0$ s s, $l = 1$ s p, $l = 2$ z d, $l = 3$ s f, $l = 4$ z g. Podlupina (n,l) ima $2(2l+1)$ stanj (magnetno obhodno kvantno število m_l teče od $-l$ do l, magnetno spinsko kvantno število pa je $m_s = -\frac{1}{2}$ ali $m_s = \frac{1}{2}$). Število stanj v podlupini zapišemo kot eksponent. Po Madelungovem pravilu si ustvarimo preglednico podlupin:

$$\begin{array}{l}
(6s)^2, (4f)^{14}, (5d)^{10}, (6p)^6. \\
(5s)^2, (4d)^{10}, (5p)^6, \\
(4s)^2, (3d)^{10}, (4p)^6, \\
(3s)^2, (3p)^6, \\
(2s)^2, (2p)^6, \\
(1s)^2.
\end{array}$$

Razpored podlupin, s katerim je povezana *elektronska konfiguracija* atomov, si zapomnimo z risbo (slika 1). Pri tem se pustimo voditi navzdol poševnim puščicam in pri podlupini s, v kateri so elektroni močno vezani na jedro, preskočimo v nižjo vrstico. Števila stanj v vrsticah so 2, 8, 8, 18,

[1] Pravilo velja za nemotene atome. V atomih, ki so izgubili veliko elektronov, se polnijo podlupine z naraščajočim n, pri enakem n pa z naraščajočim l. To sta ugotovila S. A. Goudsmit in P. I. Richards [4].

18, 32. Zaporedne vsote teh števil dajo vrstna števila žlahtnih plinov helija (2), neona (10), argona (18), kriptona (36), ksenona (54) in radona (86), ki ustrezajo dolžinam period v preglednici.



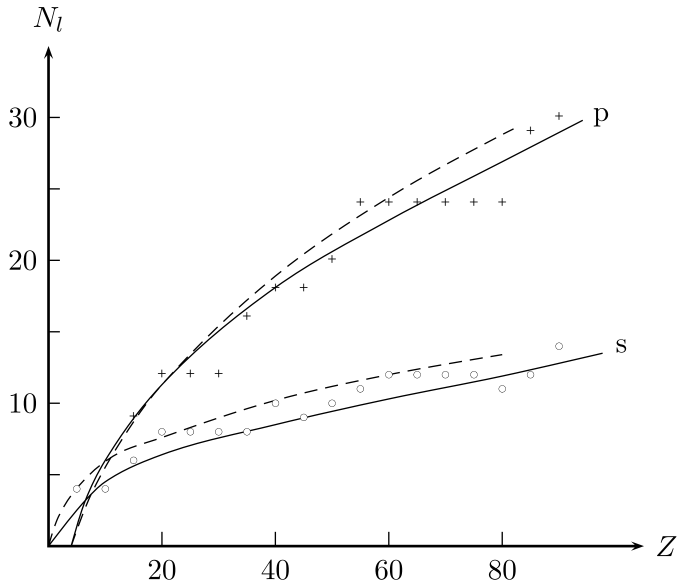
Slika 1. Z risbo si zapomnimo, kako si po Madelungovem pravilu sledijo podlupine.

Madelungovo pravilo ne velja strogo, poznamo dvajset izjem. Več jih pojasnimo „z velikim številom multipletnih stanj v zapletenih elektronskih konfiguracijah, medtem ko težišče stanj morda ustreza pravilu. Energija enega od teh stanj se lahko zniža zaradi velike zamenjalne interakcije." [4] Tako sta na primer zadnji podlupini atoma kroma z $Z = 24$ $(4s)^1$, $(3d)^5$, ne $(4s)^2$, $(3d)^4$ in atoma bakra z $Z = 29$ $(4s)^1$, $(3d)^{10}$, ne $(4s)^2$, $(3d)^9$.

Utemeljitev

Prvi del Madelungovega pravila je prvi utemeljil V. M. Klečkovski [5]. Kratek članek, v katerem je izhajal iz enačbe (4), je zbudil precej pozornosti. V francosko govorečih deželah pravilo pogosto imenujejo po Klečkovskem, ne po Madelungu.

Sledimo D. Pan Wongu, ki je utemeljil tudi drugi del pravila in rezultate Fermijevih numeričnih računov primerjal z rezultati Tietzevega približka (slika 2) [5]. Enačba (4) v okviru Thomas-Fermijevega modela povezuje tri spremenljivke: število elektronov v atomu N_l v podlupinah z določenim obhodnim kvantnim številom l, število l in vrstno število Z. Z njo lahko za element z danim vrstnim številom Z izračunamo število elektronov z danim obhodnim kvantnim številom l. Ugotovimo lahko, pri katerem vrstnem številu se začne polniti kaka podlupina. Tako na primer za element z vrstnim številom $Z = 10$, neon, za $l = 3$ dobimo negativno število N_l, kar kaže, da atom neona ne vsebuje elektronov v podlupini f. Napovemo lahko, pri katerem vrstnem številu se začnejo prehodni elementi. Za $l = 2$ in $N_l = 0$ sledi $(6Z)^{1/3} = 7$ in $Z = 21$, skandij. Podobno lahko napovemo, pri katerem vrstnem številu se začnejo lantanidi. Za $l = 3$ sledi $Z = 57$, lantan.



Slika 2. Število elektronov N_l z danim obhodnim kvantnim številom $l = 0$ (s) in $l = 1$ (p) v odvisnosti od vrstnega števila Z. Gladko krivuljo je Fermi dobil z numerično integracijo, črtkano krivuljo da Tietzev približek, krožci in križci pa kažejo eksperimentalne vrednosti [6].

Podlupina $(n,\ l)$ sprejme največ $2(2l{+}1)$ elektronov. Razmerje $N_l/(2(2l+1))$ povežemo z največjim kvantnim številom n podlupine, ki jo v atomu zasedajo elektroni. To je podlupina z najšibkeje vezanimi, valenčnimi elektroni. Pri danem glavnem kvantnem številu n obhodno kvantno število zavzame vrednosti $l = 0, 1, \ldots, n - 1$. Glavno kvantno število je $n = 1, 2, \ldots, l + 1$. Največje glavno kvantno število, ki zadeva valenčne elektrone, je $n = l + 1$. Tako postavimo:

$$\frac{N_l}{2(2l+1)} = n - (l+1)\,. \tag{5}$$

Zvezo preizkusimo. Vzemimo atom z $N_l = 20$ elektroni p, to je $l = 1$. Enačba $n = 3{,}3 + 1 + 1$ napove $n = 5$. Pogled na preglednico podlupin pokaže, da je zares treba v peto vrstico do zadnje podlupine 5p, če naj bo v tej in v vseh nižjih podlupinah v atomu 18 do 24 elektronov p.

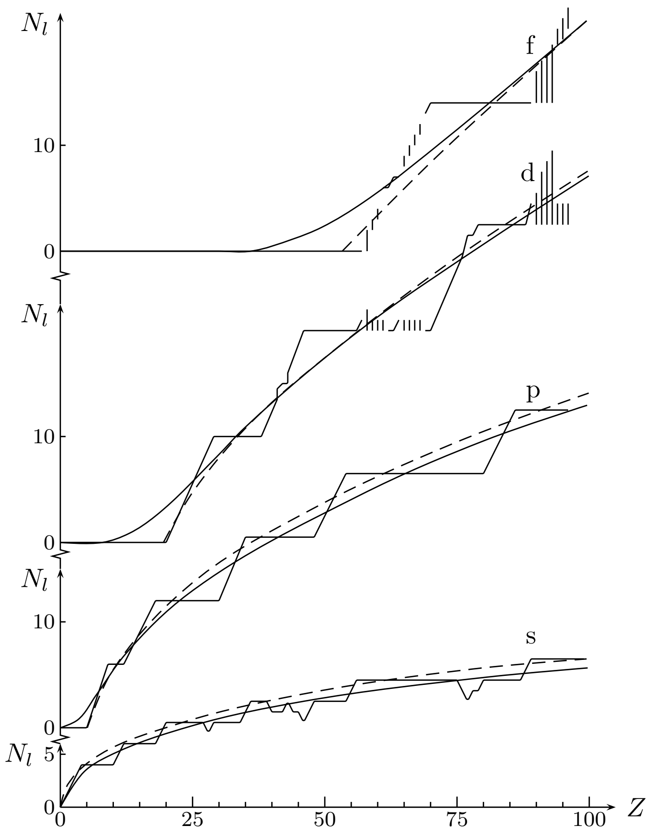
Enačbi (4) in (5) dasta:

$$n + l = (6Z)^{1/3}\,. \tag{6}$$

Zvezo preizkusimo za atom z $Z = 60$ elektroni, neodim, za katerega je $(6Z)^{1/3} = 7{,}11$. Po enačbi (4) je v tem atomu po 12, 25, 21 in 2 elektronov, ki imajo po vrsti obhodno kvantno število 0, 1, 2 in 3 in glavno kvantno število 7, 6, 5 in 4. Elektronov g z $l = 4$ v atomu neodima ni. Pogled na preglednico podlupin pokaže, da je v atomu s 60 elektroni z elektronsko konfiguracijo $(1s)^2 \mid (2s)^2, (2p)^6 \mid (3s)^2, (3p)^6 \mid (4s)^2, (3d)^{10}, (4p)^6 \mid (5s)^2, (4d)^{10}, (5p)^6 \mid (6s)^2, (4f)^4$ 12 elektronov s, 24 elektronov p, 20 elektronov d in 4 elektroni f. Valenčna podlupina je 4f. Odstopanja opozorijo na to, koliko smemo zaupati modelu.[2] Da Thomas-Fermijev model opiše povprečne lastnosti atomov, se zavemo, če zvezne krivulje modela primerjamo s stopničastimi eksperimentalnimi rezultati (slika 3).

Enačba (6) pove, da vsota $n+l$ narašča z naraščajočim vrstnim številom in utemelji prvi del Madelungovega pravila. Odvod $dl/(-dn) = 1$ spominja na sliko 1. Podlupinam z enako vsoto $n+l$ ustreza približno enaka energija. Če je $N_l/(2(2l+1))$ celo število, so z elektroni zasedene vse podlupine z danim obhodnim kvantnim številom l in različnimi glavnimi kvantnimi števili n. Ker je $2l+1$ celo število, neceli del izvira od člena z $(6Z)^{1/3}$. Ta člen da tem več valenčnih elektronov, čim večje je obhodno kvantno število l. Od dveh podlupin z enako vsoto $n+l$ s približno enako energijo ima podlupina z večjim l več valenčnih elektronov in ji ustreza manjša energija. Podlupini z manjšim l ustreza torej večja energija. Po enačbi (6) se pri danem Z vsota $n + l$ ne spreminja, zato večja energija ustreza podlupini z večjim n. To utemelji drugi del Madelungovega pravila.

[2] Neodim kot lantanid sodi med izjeme Madelungovega pravila. Skoraj pri vseh lantanidih se polni notranja podlupina (4f) in ostaja valenčna podlupina $(6s)^2$.



Slika 3. Število elektronov N_l z danim obhodnim kvantnim številom l v odvisnosti od vrstnega števila Z za različne vrednosti l. To je izpopolnjena odvisnost s slike 2. Gladke krivulje je navedel Fermi (1), črtkaste je dal izpopolnjeni račun, ki ga nismo omenili, stopničaste pa kažejo eksperimentalne vrednosti. Diagram opozori na pomanjkljivosti Thomas-Fermijevega modela [2].

Sklep

S sklepanjem smo utemeljili periodno preglednico elementov. Kako trdno se komu zdi sklepanje, je stvar osebne presoje. Vsi kemiki niso zadovoljni z njim. E. Sceri opozarja, da ne kaže pretiravati z izjavami, kako kvantna mehanika utemelji periodno preglednico [8]. Težave vidi v „zaključkih period“ 2, 10, 18, 36, 54, 86. Kaže, da se mu Madelungovo pravilo z dvajsetimi izjemami zdi preohlapno. Zavzema se za strožjo utemeljitev, ki naj bi vključila tudi popravke zaradi posebne teorije relativnosti.

Učbeniki fizike uberejo navadno drugačno pot, na kateri Madelungovega pravila ne omenijo. Za vodikov atom rešijo Schrödingerjevo enačbo. Rešitev uporabijo za ion z enim elektronom in razvijejo približek golega jedra. Uvedejo približek *krogelno simetričnega povprečnega polja*, v katerem obravnavajo gibanje Z-tega elektrona v polju jedra in krogelno simetričnega oblaka preostalih $Z-1$ elektronov. V tem približku podlupine ležijo med ustreznimi podlupinami v vodikovem atomu in v približku golega jedra. Ugotovijo, da oblak pri danem številu n z naraščajočim l sega vse dalje od jedra in se energija podlupine z naraščajočim l bliža ustrezni energiji pri vodiku. Tako se na primer podlupina (3d) vrine med podlupini (4s) in (4p). Rezultate je mogoče izboljšati z računom z notranje usklajenim poljem, pri katerem račun ponavljajo kot iteracijo. Postopek je razvil Douglas Rayner Hartree leta 1928. Še boljše rezultate dobijo, če v celoti vključijo Paulijevo prepoved na način, ki sta ga predlagala John C. Slater in Vladimir A. Fock okoli leta 1930.

Nekaterim kemikom se zdi prva pot posrečena. "Ni presenetljivo, da Tietzeva rešitev Thomas-Fermijevega modela ponudi za malenkost napačen odgovor. Preprosto osupljivo je, da s tako izrazito predpostavko o elektronskem plinu okoli jedra dobimo odgovor, ki je blizu pravega rezultata." [6] Na obeh poteh se je treba sprijazniti s približki in se zadovoljiti z okvirno utemeljitvijo periodne preglednice. Ob Mednarodnem letu kemije se zdi smiselno, da fiziki spoznajo pot, ki jim ni domača, čeprav so jo pripravili fiziki.

LITERATURA

[1] E. Fermi, *Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente*, Zeitschrift für Physik **48** (1928), 73–79.

[2] P. Gombas, *Statistische Behandlung des Atoms*, *Handbuch der Physik* (ur. S. Flügge) XXXVI, *Atome II*, Springer, Berlin 1956, str. 109.

[3] T. Tietz, *Approximate analytic solution of the Thomas-Fermi equation for atoms*, Journal of Chemical Physics **22** (1954) 2094–2095; *Comparison of the approximate solution for free neutral atoms*, **23** (1955), 1167.

[4] S. A. Goudsmit, P. I. Richards, *The order of electron shells in ionized atoms*, Phys. Rev. **51** (1964), 664–671.

[5] V. M. Klečkovski, *K obosnovaniju pravila posledovatel'nogo zapolnenija (n+l)-grup*, Žurnal eksperimental'noj i teoretičeskoj fyziki **41** (1961), 465–466.

[6] D. Pan Wong, *Theoretical justification of Madelung's rule*, Journal of Chemical Education **56** (1979), 714–717.

[7] E. Madelung, *Die mathematischen Hilfsmittel des Physikers*, Springer, Berlin 1936, str. 359, 360.

[8] E. R. Sceri, *How good is the quantum mechanical explanation of the periodic system*, Journal of Chemical Education **75** (1998), 1384–1385.

ROBERT BLINC (1933–2011)

Robert Blinc se je rodil leta 1933. Na Univerzi v Ljubljani je diplomiral leta 1958 in doktoriral leta 1959. Po doktoratu se je izpopolnjeval na Massachusetts Institute of Technology v ZDA. Redni profesor Univerze v Ljubljani je postal leta 1970. Za rednega člana SAZU je bil izbran leta 1976. Na Fakulteti za naravoslovje in tehnologijo Univerze v Ljubljani, katere dekan je bil v obdobju 1976–1978, je predaval na dodiplomskem in podiplomskem študiju. Njegova predavanja so bila izjemno cenjena. Akademik prof. dr. Robert Blinc je bil gostujoči profesor na vrsti uglednih tujih univerz.

Raziskovalno je deloval na Institutu Jožef Stefan. Raziskoval je feroelektrike z vodikovimi vezmi, tekoče kristale, inkomenzurabilne sisteme, protonska in devteronska stekla, relaksorje ter magnetoelektrične sisteme. Je eden od utemeljiteljev uporabe jedrske magnetne resonance pri raziskavah v fiziki kondenzirane snovi. Med njegovimi raziskovalnimi dosežki velja posebej omeniti Blinc-De Gennesov tunelski model feroelektrikov z vodikovimi vezmi, „soft mode“ teorijo faznih prehodov v nematskih in feroelektričnih tekočih kristalih in določanje ekscitacij ter gostote solitonov v inkomenzurabilnih sistemih z jedrsko magnetno resonanco. Pokazal je, kako lahko s pomočjo magnetne resonance določimo Edwards-Andersonov ureditveni parameter in porazdelitveno funkcijo lokalne polarizacije v devteronskih steklih in relaksorjih. Akademik prof. dr. Robert Blinc je raziskal tudi vrsto magnetoelektričnih sistemov, v katerih hkrati obstajata spontana polarizacija in spontana magnetizacija. O rezultatih raziskav je skupaj s sodelavci poročal v velikem številu mednarodno odmevnih člankov. Je tudi soavtor treh knjig, ki obravnavajo feroelektrike, tekoče kristale in inkomenzurabilne sisteme. Avgusta letos je pri založbi Oxford University Press izšla njegova zadnja knjiga z naslovom *Advanced Ferroelectricity*. Bil je član širših uredniških odborov vrste mednarodnih znanstvenih revij, predsednik mednarodnega združenja za magnetne resonance AMPERE in predsednik evropskega komiteja za feroelektrike.

Akademik prof. dr. Robert Blinc je bil za svoje izjemno raziskovalno delo deležen vrste domačih in mednarodnih priznanj. Leta 1999 je postal častni doktor Univerze v Bukarešti, leta 2003 pa častni doktor Univerze v Ljubljani. Prejel je Kidričevo nagrado za fiziko v letih 1965 in 1971, nagrado

AVNOJ leta 1978 in Zoisovo nagrado za življenjsko delo leta 2008. Ambasador znanosti je postal leta 1991. Leta 2002 je prejel zlati častni znak svobode Republike Slovenije. Prejel je nagrado mednarodnega združenja magnetne resonance ISMAR leta 1977 in nagrado Mednarodnega združenja za jedrsko kvadrupolno resonanco leta 2004. Akademik prof. dr. Robert Blinc je bil član Saške akademije znanosti v Leipzigu, grške akademije znanosti v Atenah, Evropske akademije znanosti in umetnosti (Salzburg), Evropske akademije (London), Hrvaške akademije znanosti, Makedonske akademije znanosti, Poljske akademije znanosti in Mednarodne inženirske akademije s sedežem v Moskvi. Akademik prof. dr. Robert Blinc je bil od leta 2003 tudi častni član Društva matematikov, fizikov in astronomov Slovenije.

Janez Seliger

OSEMNAJSTO MEDNARODNO TEKMOVANJE ŠTUDENTOV MATEMATIKE

Leta 1994 sta Univerza v Sofiji in University College London organizirala prvo mednarodno tekmovanje študentov matematike v Plovdivu v Bolgariji. Namen začetnih tekmovanj, ki jih je finančno podpiral evropski projekt Tempus, je bila primerjava kvalitete študija na evropskih univerzah. Slovenci se tekmovanja redno udeležujemo od leta 1995. Pogosto se z nostalgijo spominjam prvih tekmovanj, ko je le nekaj več kot 60 tekmovalcev reševalo izjemno estetske matematične naloge, popoldneve preživljalo ob nogometnih tekmah, večere pa ob breskvah, melonah, lubenicah in sangriji, ki jo je pripravljala španska ekipa.

Z leti je tekmovanje postalo zelo popularno in zares mednarodno. Letos je tekmovalo že več kot 300 študentov iz 44 držav. Tako tudi organizacija tekmovanja postaja čedalje bolj zahtevna. Zaradi tradicije in zelo dobrih izkušenj z Ameriško univerzo v Bolgariji je bilo tekmovanje letos že šestič v Blagoevgradu.

Tekmujejo študentje prvih štirih letnikov. Med tekmovalci se najdejo tudi fiziki in študenti tehničnih fakultet. Naloge so v grobem iz snovi, ki se na večini študijev matematike predavajo v prvih dveh letih.

Dan po prihodu je sestanek vodij ekip, kjer do poznega večera izbiramo tekmovalne naloge. Izbrati je treba deset nalog, po pet za vsak tekmovalni dan. Teža nalog narašča z zaporedno številko; prvo nalogo reši večina študentov, zadnje pa skoraj nihče. Pazimo tudi, da so različna področja

Slika 1. Slovenska ekipa: Peter Muršič, Miha Habič, Tom Primožič, Marjan Jerman, Jan Kralj in Jure Vogrinc.

matematike smiselno zastopana. Končni izbor nalog je dosežen z glasovanjem. Letos sem bil nad izborom nalog prvič razočaran. Vodje ekip, ki v tekmovanju vidijo nadaljevanje srednješolskih olimpijad, so izglasovali nesorazmerno veliko nalog, kjer se namesto občutka in talenta za matematiko preverja tekmovalne izkušnje in poznavanje trikov. Tako v končnem izboru ni bilo nobene lepe naloge iz realne ali kompleksne analize.

Naslednja dva dneva študenti tekmujejo, vodje ekip pa ocenjujemo naloge. Da bi zagotovili največjo mero poštenosti, vsako nalogo neodvisno popravita dva ocenjevalca, ki se morata kasneje strinjati z oceno. Seveda so možne tudi pritožbe, ki se upoštevajo, če se z njimi strinjata vsaj dva popravljavca ali pa neodvisna, vnaprej izbrana komisija treh vodij ekip.

Kot običajno sem se javil za ocenjevanje zelo lepe naloge iz linearne algebre, ki je bila prvi dan zastavljena kot druga naloga:

I.2. *Ali obstaja realna matrika* A *velikosti* 3×3 *s sledjo* 0*, za katero velja:*

$$A^2 + A^\top = I \ ?$$

Študenti so našli kar nekaj različnih rešitev, ena od njih gre takole:

Matrika A je normalna, ker je

$$AA^\top = A(I - A^2) = (I - A^2)A = A^\top A\,.$$

Zato imata matriki A in $A^\top$ iste lastne vektorje, ustrezne lastne vrednosti pa so konjugirane. Vsaka lastna vrednost mora tako izpolnjevati enakost

$$\lambda^2 + \bar{\lambda} = 1\,,$$

zato je $\lambda = \dfrac{1 \pm \sqrt{5}}{2}$.

Vsota lastnih vrednosti matrike A je enaka sledi matrike A. Hitro se lahko prepričamo, da samo s števili oblike $\dfrac{1 \pm \sqrt{5}}{2}$ ne moremo dobiti vsote 0.

Iz rešitve se lepo vidi, da je privzetek o velikosti in realnosti matrike odveč. Ta dva privzetka pa sta koristna, če se reševanja naloge lotimo drugače. Hitro se recimo vidi, da je vsota kvadratov lastnih vrednosti enaka 3. S premetavanjem enačbe in Vietovimi formulami lahko dobimo še vsoto četrtih potenc lastnih vrednosti in nato pokažemo, da takemu sistemu enačb ne zadoščajo ničle karakterističnega polinoma z realnimi koeficienti.

Drugi dan je bila kot druga zastavljena zelo simpatična kombinatorična naloga z elementi znanstvenofantastične sociologije:

II.2. *V neki nezemeljski rasi so osebe treh različnih spolov. Poročeni trojček je sestavljen iz treh oseb paroma različnih spolov, ki so si med seboj všeč. Vsaka oseba je lahko v največ enem poročenem trojčku. Čustva v rasi so vedno obojestranska: če je oseba x všeč osebi y, velja tudi obratno.*

Oddaljeni nenaseljeni planet želijo kolonizirati z odpravo, v kateri je po n oseb vsakega spola. Ugotovili so, da je vsakemu članu odprave všeč vsaj k oseb vsakega od preostalih dveh spolov. Naloga odprave je tvoriti čim več poročenih trojčkov, ki bodo sčasoma z v zakonu rojenimi otroki poselili planet.

(a) *Če je n sodo število in je $k = \dfrac{n}{2}$, pokaži, da morda ni mogoče ustvariti niti enega poročenega trojčka.*

(b) *Če je $k \geq \dfrac{3n}{4}$, pokaži, da je vedno možno ustvariti n disjunktnih poročenih trojčkov in tako poročiti vse člane odprave.*

Prvi del naloge je zelo lahek, za drugi del pa se je treba pošteno potruditi. Pomaga uvedba relacije „si nista všeč“, za katero se izkaže, da ne pokriva prevelikega dela populacije.

Zelo zanimiva je bila tudi četrta naloga prvega dneva, ki kaže, kako lepo se da rešiti na videz zapleteno nalogo z malo bolj globokim vpogledom v matematiko.

I.4. *Naj bodo $A_1, \ldots, A_n$ končne neprazne množice. Funkcija f je definirana s pravilom*

$$f(t) = \sum_{k=1}^{n} \sum_{1 \le i_1 < \ldots < i_k \le n} (-1)^{k-1} t^{|A_{i_1} \cup \ldots \cup A_{i_k}|} .$$

Pokaži, da je funkcija f nepadajoča na intervalu $[0,1]$. (Pri tem $|A|$ kot običajno pomeni moč množice A.)

Naj bo $\Omega = \bigcup_{i=1}^{n} A_i$. V podmnožico $X \subset \Omega$ izbiramo elemente iz Ω tako, da je element $x \in \Omega$ izbran v množico X z verjetnostjo t, neodvisno od izbora preostalih elementov.

Potem je

$$P(C \subset X) = t^{|C|} .$$

Po načelu vključitve in izključitve je

$$\begin{aligned} &P((A_1 \subset X) \text{ ali } (A_2 \subset X) \text{ ali } \ldots \text{ ali } (A_n \subset X)) = \\ &= \sum_{k=1}^{n} \sum_{1 \le i_1 < \ldots < i_k \le n} (-1)^{k-1} P(A_{i_1} \cup \ldots \cup A_{i_k} \subset X) = \\ &= \sum_{k=1}^{n} \sum_{1 \le i_1 < \ldots < i_k \le n} (-1)^{k-1} t^{|A_{i_1} \cup \ldots \cup A_{i_k}|} . \end{aligned}$$

Verjetnost $P((A_1 \subset X) \text{ ali } (A_2 \subset X) \text{ ali } \ldots \text{ ali } (A_n \subset X))$ pa je nepadajoča funkcija argumenta t.

Kako varljiv je lahko prvi vtis, kaže zadnja naloga prvega dneva, ki je na prvi pogled čisto obvladljiva. Na koncu se je izkazalo, da so se le trije študentje približali rešitvi:

I.5. *Naj bo n naravno število in V $(2n-1)$-razsežen vektorski prostor nad obsegom $\mathbb{Z}_2 = \{0,1\}$. Pokaži, da lahko za poljubne vektorje $v_1, \ldots,$*

Slika 2. Rilski samostan.

$v_{4n-1} \in V$ najdemo zaporedje takšnih indeksov $1 \leq i_1 < \ldots < i_{2n} \leq 4n-1$, da je

$$v_{i_1} + \ldots + v_{i_{2n}} = 0\,.$$

Rešitev poteka s pomočjo zelo zvite indukcije in manj razsežnih kvocientnih prostorov.

Po končanem izboru nalog sem javno izrazil svoje pomisleke o manjkajoči lepi nalogi iz analize. Po tesnem preglasovanju so me nekateri vodje ekip skušali prepričati, da v analizo spada tretja naloga drugega tekmovalnega dneva:

II.3. *Določi vrednost vsote*

$$\sum_{n=1}^{\infty} \ln\Big(1+\frac{1}{n}\Big)\ln\Big(1+\frac{1}{2n}\Big)\ln\Big(1+\frac{1}{2n+1}\Big)\,.$$

Uradna rešitev (ki po mojem ni zelo analitična) gre takole:

Za $n \geq 1$ naj bo $f(n) = \ln\Big(\frac{n+1}{n}\Big)$. Preverimo lahko, da velja

$$f(2n) + f(2n+1) = f(n).$$

Znana neenakost $\ln(1+x) \leq x$ pove tudi, da je $f(n) \leq \frac{1}{n}$.

Definirajmo še funkcijo

$$g(n) = \sum_{k=n}^{2n-1} f^3(k) < nf^3(n) \leq \frac{1}{n^2}\,.$$

Tedaj je

$$\begin{aligned} g(n) - g(n+1) &= f^3(n) - f^3(2n) - f^3(2n+1) \\ &= (f(2n) + f(2n+1))^3 - f^3(2n) - f^3(2n+1) \\ &= 3(f(2n) + f(2n+1))f(2n)f(2n+1) \\ &= 3f(n)f(2n)f(2n+1)\,, \end{aligned}$$

zato je

$$\sum_{n=1}^{N} f(n)f(2n)f(2n+1) = \frac{1}{3}\sum_{n=1}^{N}(g(n) - g(n+1)) = \frac{1}{3}(g(1) - g(N+1))\,.$$

Ker gre $g(N+1) \to 0$, ko gre $N \to \infty$, je iskana vsota enaka

$$\sum_{n=1}^{\infty} f(n)f(2n)f(2n+1) = \frac{1}{3}g(1) = \frac{1}{3}\ln^3(2)\,.$$

Po tekmovanju smo si ogledali znameniti Rilski samostan. Komisija je nato pregledala še zadnje pritožbe in določila meje za nagrade.

Slovenijo so zastopali Miha Habič, Jan Kralj, Tom Primožič in Jure Vogrinc z Univerze v Ljubljani in Peter Muršič z Univerze na Primorskem. Miha Habič in Jan Kralj sta dobila tretjo nagrado, drugi pa pohvalo.

Več o tekmovanju in o prejšnjih tekmovanjih lahko preberete na spletni strani: `http://www.imc-math.org`

Marjan Jerman

UTRINEK K LANSKEMU POSVETU NA SAZU

JANEZ STRNAD

Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

Septembra lani je Slovenska akademija znanosti in umetnosti povabila na posvet, o katerem je Obzornik podrobneje poročal (Mojca Čepič, *Posvet o pouku fizike, kemije in matematike na Slovenski akademiji znanosti in umetnosti*, Obzornik mat. fiz. **58** (2011) 25–29). Na posvetu so učitelji fizike, kemije in matematike na vseh stopnjah poročali o razmerah na naših šolah in težavah, ki jih tarejo. Razpravljali so o pomenu fizike v vsakdanjem življenju, o kvaliteti pouka matematike, o novih prijemih v poučevanju naravoslovnih predmetov, o stalnem strokovnem spopolnjevanju učiteljev, o slabi motiviranosti učencev, o nekritični podpori staršev. Posvetu sta se pozneje pridružila tudi minister za šolstvo in šport in v. d. direktorja Direktorata za visoko šolstvo na Ministrstvu za visoko šolstvo, znanost in tehnologijo in razkrila nekaj svojih pogledov. Čeprav so bile na posvetu misli usmerjene predvsem v prihodnost, sem kot zastopnik odhajajočega rodu želel opozoriti na napake iz preteklosti, da jih ne bi ponavljali. Po nastopu ministra in direktorja pa se mi je zazdelo, da prihajata iz sveta, ki se tako razlikuje od sveta matematikov, fizikov in kemikov, da bi moja vprašanja zgrešila namen. Čeprav je od posveta poteklo že dobro leto, bodo morda kakega člana društva opozorila na širši vidik naših šolskih težav.

- Ali morebiti ne razpravljamo o težavi, ki je samo del obsežnejših težav? Ali ni naša družba pretirano asimetrična? Ali ne vodijo države in njenih ustanov pravniki, ekonomisti in drugi, ki nimajo uravnovešenega pogleda na matematiko in naravoslovje? Ali to, kar so načrtovali, primerjamo z dosežki, da bi ugotovili, v kakšno smer bi bilo smiselno usmeriti razvoj?

- Ali v zadnjih šestdesetih letih slovenski šolski sistem ni preživel vrste sprememb in reform z dvomljivim uspehom? Ali se šolski delavci, ki jim vsiljujejo spremembe in reforme, teh ne naveličajo in jih ne izvajajo? Ali je mogoče napovedati, kako se bo razvijal sistem, če se v kratkem času spremeni preveč okoliščin?

- Ali je lahko uspešen poučevalski sistem, če se nenehno znižuje zahtevnost in spodbuja prepričanje, da je mogoče doseči znanje brez napora? Ali zniževanje zahtevnosti na vseh stopnjah šolanja ne spodbuja izbire poti z najmanj napora?

- Ali pretirana množičnost ne vodi do znižanega znanja? Ali znižano znanje ne pripelje do zaostajanja gospodarstva? Ali v razvitih državah gospodarstvo ne poskrbi za izboljšanje šolstva, če začenja zaostajati?

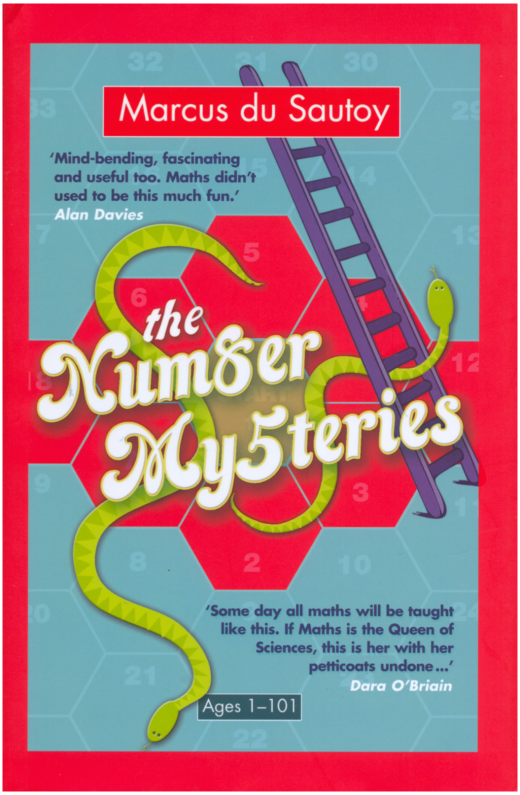
NOVE KNJIGE

Marcus du Sautoy, THE NUMBER MYSTERIES: A Mathematical Odyssey Through Every Day Life, Fourth Estate, London, 2010, 316 strani.

Knjiga ni, kot smo v matematiki navajeni, prepolna definicij, izrekov in njihovih dokazov ter zapletenih tabel in slik, ampak je večinoma usmerjena v pripovedovanje. S tem naj bi bolje razumeli nekatere matematične vsebine in probleme, s katerimi se v življenju pravzaprav kar naprej srečujemo.

V prvem poglavju srečamo praštevila, kot že nič kolikokrat v knjigah, namenjenih širokemu krogu bralcev, ki jih vsaj malo zanima matematika. Praštevila so skrivnostna, odkar jih poznamo. Neskončno mnogo jih je, porazdeljena so neenakomerno, v zvezi z njimi je še mnogo nerešenih problemov, povezana so z znamenito Riemannovo funkcijo zeta, za katero je prav tako še nerešena Riemannova hipoteza o njenih netrivialnih ničlah.

Drugo poglavje pripoveduje o nenavadnih, včasih nekako izmuzljivih tvorbah. Govor je o platonskih telesih in kako iz njih dobimo poliedre, ki so dobri približki za sfero, o mehurčkih in minimalnih ploskvah, kristalnih strukturah, fraktalih in njihovi dimenziji, predstavitvi štirirazsežnih struktur, barvanju zemljevidov, obliki vesolja in Poincaréjevi hipotezi ter Perelmanovi rešitvi le-te.



Tretje poglavje je posvečeno logiki, verjetnostnemu računu, teoriji iger, magičnim kvadratom, nekaterim igram, ki so v računalniški dobi osvojile svet, osnovam teorije grafov in nekaterim klasičnim problemom, ki jih navadno študiramo v zvezi s tem.

Predzadnje poglavje pa obravnava osnove kodiranja in komunikacij. Tu spoznamo morda nekoliko manj znane prijeme za tajno prenašanje sporočil v starih in novejših časih, pa bolj znane načine kodiranja, znamenito nemško Enigmo, nazadnje pa tudi vlogo praštevil pri sodobnem kodiranju in prenašanju sporočil, s čimer imamo zadnje čase opraviti skoraj vsak dan.

Zadnje, peto poglavje se ukvarja z napovedovanjem bodočih dogodkov. Vemo, kako izračunati datume Sončevih in Luninih mrkov v bližnji prihodnosti. Težave pa nam dela na primer že preprosto nihalo, za katero je težko upoštevati vse okoliščine, da bi lahko vnaprej izračunali, kako se bo obnašalo. Toliko teže je napovedati, kaj se bo dogajalo z vremenom, s populacijami organizmov, in dogodke v vesolju, saj imajo že majhne naključne spremembe kake količine lahko katastrofalne posledice.

O avtorju

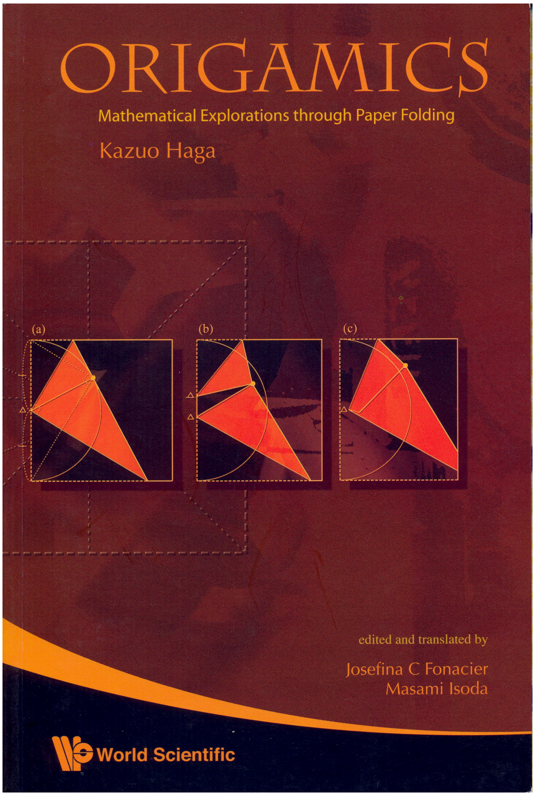
Marcus Peter Francis du Sautoy, rojen leta 1965 v Londonu, je študiral matematiko na univerzi v Oxfordu. Na tej univerzi je leta 1989 tudi doktoriral z disertacijo *Discrete Groups, Analytic Groups and Poincaré Series* in tam postal profesor matematike. Njegovo raziskovalno področje je razumevanje sveta simetrij, pri čemer uporablja različne prijeme, ki vključujejo funkcije zeta, p-adične Liejeve grupe, teorijo modelov, algebraično geometrijo in analitične metode. Leta 1995 je računalniški strokovnjak madžarskega rodu Charles Simonyi podaril univerzi v Oxfordu poldrugi milijon funtov, da bi ustanovili posebno katedro, ki naj bi skrbela za bolše razumevanje in popularizacijo znanosti tako znotraj univerze kot zunaj nje. Simonyi je kar dvakrat poletel v vesolje, kjer je preživel vsega skupaj skoraj mesec dni. Prvi profesor nove katedre je postal leta 1995 Richard Dawkins, leta 2008 pa ga je nasledil Marcus du Sautoy. Poleg opisane knjige je Marcus du Sautoy tudi avtor odmevnih knjig *The Music of the Primes: Searching to Solve the Greatest Mystery in Mathematics* ter *Finding Moonshine: A Mathematician's Journey Through Symmetry*. Slednja je izšla tudi z naslovom *Symmetry: A Journey into the Patterns of Nature*. V Springerjevi zbirki *Lecture Notes in Mathematics* sta Marcus du Sautoy in Luke Woodward objavila delo *Zeta Functions of Groups and Rings*.

Marcus du Sautoy je za boljše razumevanje in popularizacijo znanosti, zlasti matematike, v sodelovanju z BBC ustvaril tudi številne radijske oddaje in televizijske nadaljevanke. Od leta 2008 imamo na voljo *The Story of Math* v štirih enournih nadaljevanjih na dveh DVD-jih. Avtor nas popelje skozi celotno zgodovino matematike, kakršno sicer poznamo iz knjig. Ena od odlik slikovnega in zvočnega zapisa na modernem mediju pa je zagotovo v tem, da lahko spoznamo pristna okolja, v katerih je nekoč nastajala matematika. Filmov in DVD-jev o matematiki in njeni zgodovini ni prav veliko, zato je Sautoyjeva stvaritev še toliko bolj dobrodošla. Za svoje delo je bil Marcus du Sautoy tudi večkrat primerno nagrajen, nazadnje januarja 2010, ko je prejel *Award of the Joint Policy Board for Mathematics*.

Slovenske javne knjižnice du Sautoyjevih del nimajo ravno na pretek. Morda pa bo ta članek kakšno vzpodbudil, da bo nekoliko razširila svojo ponudbo tudi z njegovimi deli, ki nam dajo veliko zanimivega branja in nas vodijo k razmišljanju o matematiki in svetu, v katerem živimo.

Marko Razpet

Kazuo Haga, ORIGAMICS, Mathematical Explorations Through Paper Folding. World Scientific, New Jersey in drugje, 2008, 152 strani.



Origami je znana tradicionalna japonska umetnost prepogibanja kvadratnih kosov papirja, s čimer dobimo zanimive in estetsko oblikovane dvo- ali trirazsežne objekte, ki spominjajo na živali, cvetje in drugo. S sestavljanjem različno velikih in obarvanih objektov lahko ustvarimo precej velike in kompleksne samostoječe izdelke. Nekaj od tega poznamo iz otroških let, na primer papirnata letala, papirnata pokrivala ali čake in papirnate barčice.

Prej ali slej pa spoznamo, da je ob prepogibanju papirja možno obravnavati kar precej geometrije in algebre. Robove kvadratnega ali pravokotnega kosa papirja in prepogibne črte imamo za dele premic, oglišča in presečišča prepogibnih črt pa za točke. Tako lahko po nekaj prepogibih opazujemo kote in like na papirju in začnemo odkrivati in dokazovati različne odnose med njimi. S tem beseda *origami* postane neustrezna, zato je v naslovu knjige uporabljena beseda *origamics*, kar bi se dalo posloveniti z besedo *origamika*, ki nas spominja na besede *matematika*, *fizika*, *keramika* in druge. Prepogibanje papirja je našlo svoje mesto tudi v šolah in na seminarjih za učitelje matematike. Čeprav je taka dejavnost bolj eksperimentalne in spretnostne vrste, ji pa vendar moramo priznati, da je naravnana tudi v študij geometrije, ki je v šolah po vsem svetu že nekoliko zanemarjena. Origamika je torej lahko zanimiva in poučna tako za učitelje kot tudi za njihove učence.

Pokukajmo malo v vsebino knjige. Začetek je namenjen prepogibanju kvadratnega kosa papirja. Spoznamo tri tako imenovane *Hagove izreke*. Nanašajo se na razmere, ki nastanejo, ko prepognemo kvadrat tako, da eno od njegovih oglišč pade na nasprotno stranico. Z dolžino enega od odsekov lahko izrazimo dolžine preostalih daljic na papirju, in to racionalno, brez uporabe korenov. To nas v posebnih primerih pripelje do pitagorejskih trikotnikov in deljenja daljic na več dolžinsko enakih delov.

Nato sledi posplošitev Hagovih izrekov na primer pravokotnega kosa papirja, ki ima razmerje stranic $\sqrt{2} : 1$. Papirji formata A imajo ravno to lastnost. Pravokotnikom s takim razmerjem stranic pravi avtor pravokotnik s *srebrnim razmerjem*, kar ni povsem korektno (glej pripombo na koncu članka), po analogiji z zlatim razmerjem $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$.

Z dvema prepogiboma kvadratnega kosa papirja, pri čemer dve sosednji oglišči preideta na nasprotno stranico, pridemo do presečišč, ki imajo glede na stranice in druge točke prav zanimive lastnosti.

S prepogibanjem na vsaki strani različno obarvanega papirja dobimo v barvi spodnje strani različne like. Če izbrano oglišče kvadratnega kosa papirja postavimo v različne lege, lahko tudi zunaj kvadrata, in ga do konca prepognemo, dobimo trikotnike, štirikotnike in petkotnike. Zanimivo se je vprašati, kdaj dobimo katerega od naštetih likov. Mimogrede pa se porodi še kup drugih vprašanj.

Prav tako nam prepogibanje kvadratnega oziroma pravokotnega kosa papirja prinaša veliko lepih nalog, če izberemo točko v ravnini papirja in vanjo zaporedno prepognemo vsa oglišča. Lahko pa določimo tudi neko ravno črto v ravnini papirja in vanjo zaporedno prepogibamo dele njegovih stranic. Prepogibanje papirja pa lahko usmerimo celo v napeto igro med udeleženci.

Knjiga bralca vseskozi ne le vzpodbuja, da prepogiba kos papirja, ampak ga tudi vabi, da opazuje oblike, ki jih pri tem dobi, da jih med seboj primerja in da samostojno postavlja hipoteze za odnose med dobljenimi geometrijskimi objekti ter da jih poskuša tudi dokazati. Pri tem ni treba znati več kot Pitagorov izrek in lastnosti podobnih trikotnikov ter nekaj algebre za računanje.

Knjiga je primerno branje za učence in učitelje od višjih razredov osnovne šole naprej. Njena vsebina je natančno in logično razporejena in bogato likovno opremljena. Učitelji in profesorji bodo na prepogibanje papirja morda nekoliko drugače gledali in vsaj del vsebine vključili v pouk oziroma predavanje. Z veseljem pa jo bo prebral tudi marsikdo, ki se z geometrijo že dolgo ni ukvarjal,

O avtorju

Kazuo Haga je upokojeni profesor biologije na univerzi v Tsukubi. S prepogibanjem papirja pa se je ukvarjal med poteki dolgotrajnih bioloških eksperimentov in za sprostitev med napornim delom z mikroskopom. Opisana knjiga obravnava samo košček njegovih dognanj, do katerih je prišel pri prepogibanju papirja.

Pripomba

V resnici je srebrno razmerje $\varrho = 1 + \sqrt{2}$. Tako je razmerje stranic pravokotnika, ki ostane, če odrežemo od pravokotnika z razmerjem stranic $\sqrt{2} : 1$ največji možni kvadrat. Obstaja tudi še bronasto razmerje $\sigma = (3+\sqrt{13})/2$. Vsem tem *kovinskim razmerjem* so skupne oblike kvadratnih enačb, ki jim zadoščajo, in njihovi razvoji v neskončne verižne ulomke. Posplošimo: n-to kovinsko razmerje σ_n je pozitivni koren enačbe $x^2 = nx + 1$ z diskriminanto $D = n^2 + 4$, ki očitno za noben naraven n ni kvadrat kakega naravnega števila. Ker je $\sigma_n^2 = n\sigma_n + 1$ oziroma $\sigma_n = n + 1/\sigma_n$, lahko hitro dobimo neskončen verižni ulomek $\sigma_n = [n; n, n, \ldots]$. Temu ustrezajo žlahtnosti kovin na velikih športnih tekmovanjih. Prvi, $n = 1$, prejme zlato medaljo; ustreza mu zlato razmerje $\tau = \sigma_1$, ki se kot verižni ulomek zapiše s samimi enicami. Drugi, $n = 2$, prejme srebrno medaljo; ustreza mu srebrno razmerje $\varrho = \sigma_2$, ki se kot verižni ulomek zapiše s samimi dvojkami. Tretji, $n = 3$, prejme bronasto medaljo; ustreza mu bronasto razmerje $\sigma = \sigma_3$, ki se kot verižni ulomek zapiše s samimi trojkami. Nehvaležnemu četrtemu mestu, $n = 4$, ustreza razmerje σ_4 in verižni ulomek s samimi štiricami. Lahko pa se četrti potolaži z enakostjo: $\sigma_4 = 2\tau + 1$.

Marko Razpet

OBZORNIK ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
LJUBLJANA, JULIJ 2011
Letnik 58, številka 4

ISSN 0473-7466, UDK 51 + 52 + 53

VSEBINA

CONTENTS

Na naslovnici: Ekviverjetnostne ploskve vodikovih orbital opišejo valovne funkcije $\psi_{n,l,m}(r)$. n je glavno kvantno število, l je tirno magnetno število in m magnetno kvantno število.