

# Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

---

Michal Křížek; Alena Šolcová

Vladimír Vand - konstruktér mechanických počítačů

*Pokroky matematiky, fyziky a astronomie*, Vol. 56 (2011), No. 1, 19–34

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/141983>

## Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 2011

Institute of Mathematics of the Czech Academy of Sciences provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This document has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://dml.cz>

# Vladimír Vand – konstruktér mechanických počítačů

K 100. výročí narození

*Michal Krížek, Alena Šolcová, Praha*

*Učte se, jako byste se hnali za někým,  
koho nemůžete dohnat,  
jako by to byl někdo,  
koho byste se báli ztratit.*

KONFUCIUS

## 1. Úvod

Toto pojednání je volným pokračováním článku [16] o fyziku Vladimíru Vandovi (1911–1968). Soustředíme se v něm mj. na vzpomínky jeho kolegů a žáků.

Vand absolvoval Přírodovědeckou fakultu Univerzity Karlovy v Praze, kde se zaměřil zejména na fyziku, a v roce 1937 získal titul RNDr. Již během studia se intenzivně věnoval pozorování proměnných hvězd a byl předsedou Sekce hvězd proměnných České astronomické společnosti po Zdeňku Kopalovi. Koncem třicátých let minulého století pracoval na vývoji analogového počítače pro akustické zaměřování letadel společně s Antonínem Svobodou.<sup>1)</sup>

V roce 1947 Vand sestrojil 6 m dlouhý samočinný mechanický počítač vlastní konstrukce pro difrakční analýzu krystalických struktur pomocí paprsků X. O dva roky později postavil ještě menší, ale efektivnější počítač na podobném principu. Spolupracoval s Francisem H. Crickem na výzkumu struktury šroubovicových molekul pomocí Fourierovy transformace. V roce 1953 napsal s S. R. Pepinským řadu let oceňovanou a hojně citovanou monografii *The statistical approach to X-ray analysis*. V roce 1954 získal titul Doctor of Science (DSc.) na Univerzitě v Glasgowě a v roce 1961 se stal profesorem krystalografie na Pennsylvania State University.

---

<sup>1)</sup> Antonín Svoboda (nar. 14. října 1907 v Praze) navrhl a v roce 1957 uvedl do provozu první československý samočinný počítač SAPO. Zemřel 18. května 1980 v USA.

---

Prof. RNDr. MICHAL KRÍŽEK, DrSc., Matematický ústav AV ČR, v.v.i., Žitná 25, 115 67 Praha 1, [krizek@math.cas.cz](mailto:krizek@math.cas.cz).

Doc. RNDr. ALENA ŠOLCOVÁ, Ph.D., katedra teoretické informatiky, Fakulta informačních technologií ČVUT, Kolejnií 2, 160 00 Praha 6, [alena.solcova@fit.cvut.cz](mailto:alena.solcova@fit.cvut.cz).

Na konci své životní dráhy prof. Vand studoval meteorické krátery (např. kráter Ries Kessel v Německu) a vysvětlil, proč mají tektity takový komplikovaný tvar. Je autorem monografie *Astrogeology*, která vyšla v prestižním nakladatelství Academic Press v roce 1965. Publikoval 19 prací v časopise Nature. Web of Science obsahuje tisíce ohlasů na desítky jeho dalších článků (např. [3] a [22] jsou v literatuře citovány každý více než 500krát). Planetka č. 129 595 nese jméno Vand.

## 2. Studium na Univerzitě Karlově

Vladimír Vand se narodil 6. února 1911. Jeho dětství a životní osudy podrobně popisujeme v knížce [18] (viz též [5], [6], [16], [17]). Po maturitě na smíchovské reálce v roce 1930 začal Vladimír studovat fyziku na Přírodovědecké fakultě Univerzity Karlovy. Zde získal výbornou matematickou přípravu od Miloše Kösslera (viz [12]), Karla Petra, Vojtěcha Jarníka, Václava Hlavatého a mnohých dalších. Základy astronomie studoval u Wáclawa W. Heinricha a Vincence Nechvíle. Z fyziků jej nejvíce ovlivnil Viktor Trkal, František Závíška, August Žáček a zejména Václav Dolejšek, od něhož se naučil rentgenovou spektroskopii, kterou později často používal. Během studia se Vand vážně zabýval i astronomií.

Na ukázkou uvádíme na další straně seznam přednášek ze dvou semestrů, kdy Vand navštěvoval 3. a 4. ročník. Seznam přednášek v ostatních semestrech je uveden v [18] (viz též Archiv Univerzity Karlovy).

## 3. Vladimír Vand v Říši hvězd

Česká astronomická společnost vznikla 8. prosince 1917 (viz [15]). Již roku 1920 začala vydávat časopis *Říše hvězd* (ŘH), jehož název si propůjčila z úspěšného díla univerzitního profesora Gustava Grusse: *Z říše hvězd* (1896/97). Podívejme se, co se píše v tomto časopise<sup>2)</sup> o Vladimíru Vandovi. První zmínka o něm se v ŘH objevila v listopadovém čísle roku 1930 ve Zprávě sekce pozorovatelů Zdeňka Kopal (tehdy bylo Vandovi 19 let a Kopalovi pouhých 16 let):

*Rovněž bude zbudován fotometr k osmipalcovému hledači východní kopule LHŠ.<sup>3)</sup> Konstrukcí fotometru byl pověřen p. RNSt.<sup>4)</sup> Vand.*

O měsíc později Kopal ve Zprávě sekce pozorovatelů hvězd proměnných v ŘH píše:

*Fotometr k osmipalcovému hledači východní kopule L.H.Š. jest již dokončen a v nejbližší době se začne pravidelně měřiti. Originální návrh podal a konstrukci bezvadně sestrojil člen p. RNSt. Vlad. Vand, za což mu vzdávám*

---

<sup>2)</sup> Planetka č. 4090 dostala název *Říšehvězd*.

<sup>3)</sup> Lidová hvězdárna Štefánikova v Praze.

<sup>4)</sup> Student přírodních věd – Rerum naturalium student.

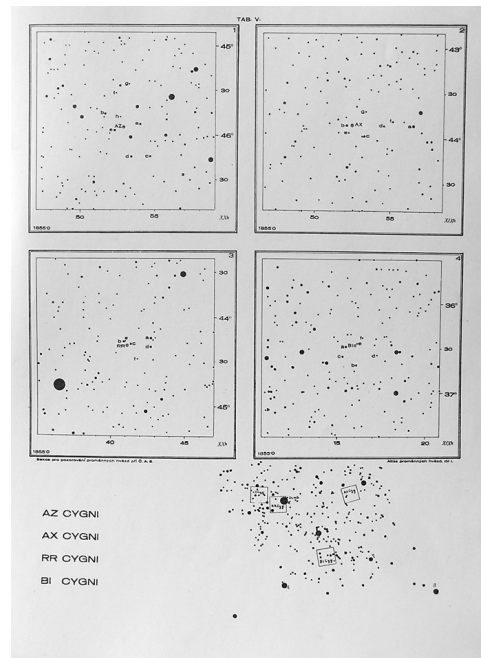
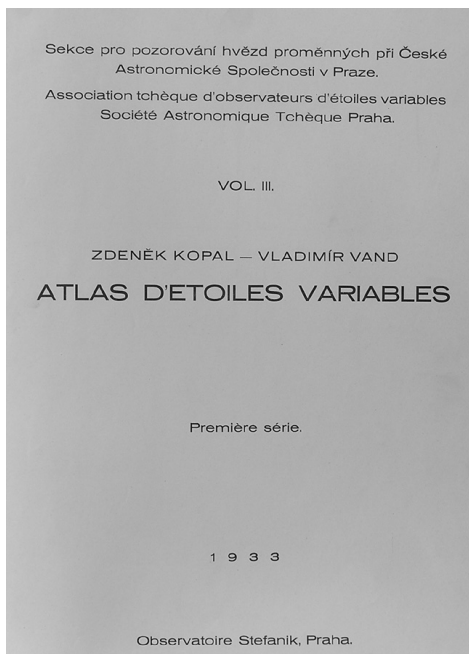
| Název přednášky   | Přednášející | Počet hodin týdně |
|---|--------------|-------------------|
| <b>Zimní semestr studijního roku 1932 – 1933, běh pátý</b>  |              |                   |
| Theorie čísel   | Petr         | 4                 |
| O funkcích komplexní proměnné                               | Kössler      | 5                 |
| Diferenciální geometrie křivek a ploch                      | Hlavatý      | 5                 |
| Einsteinův princip relativity                               | Heinrich     | 4                 |
| Výklady a cvičení na strojích                               | Heinrich     | 3                 |
| Měření a výpočet drah dvojhvězd                             | Nechvíle     | 2                 |
| Vybrané partie z astrofysiky                                | Nušl         | 1                 |
| Theorie elektromagnetického pole                            | Záviška      | 5                 |
| Tepelné záření  | Záviška      | 1                 |
| Cvičení   | Záviška      | 2                 |
| Kinetická teorie plynů                                      | Trkal        | 3                 |
| Seminář II. odd.  | Kádner       | 2                 |
| Vybrané kapitoly elektronické                               | Posejpal     | 2                 |
| <b>Zimní semestr studijního roku 1933 – 1934, běh sedmý</b> |              |                   |
| Školství u nás i v cizině                                   | Kádner       | 4                 |
| Rovnice diferenciální                                       | Kössler      | 3                 |
| Vybrané části z teorie funkcí komplexní proměnné            | Kössler      | 2                 |
| Úvod do astronomie  | Heinrich     | 3                 |
| Sférická astronomie   | Heinrich     | 2                 |
| Theorie astronomických měření                               | Heinrich     | 3                 |
| Cvičení seminární   | Kössler      | 2                 |
| Cvičení seminární   | Záviška      | 2                 |
| Theorie relativnosti  | Záviška      | 3                 |
| Vektorové a tensorové pole                                  | Záviška      | 2                 |
| Spektroskopie   | Dolejšek     | 3                 |
| Technika vysokého vacua                                     | Dolejšek     | 2                 |
| Praktikum techniky vysokovacuové                            | Dolejšek     | 5                 |
| Didaktika matematiky  | Vetter       | 2                 |
| O pohybech stálic a rotace Mléčné dráhy                     | Nechvíle     | 2                 |
| Fysikální praktikum pokusů přednáškových                    | Posejpal     | 3                 |
| Kurs prací dilenských                                       | Posejpal     | 3                 |

upřímné díky. Fotografii a podrobný popis, kterého pro technické obtíže není možno otisknouti nyní, nalezne čtenář v některém z příštích čísel Ř.H.

Vand o svém fotometru později napsal svůj první článek [19]. V letech 1932 a 1933 trávil prázdniny na Raspenavě nedaleko Frýdlantu v Čechách. Zdeněk Kopal ve své knize *O hvězdách a lidech* [7, s.81] na toto období rád vzpomíná:

*Byla to kouzelná doba – přes den jsem překládal Jeanse a v noci pozoroval proměnné hvězdy, a to spolu s přítelem Vladimírem Vandem, který přijel do Raspenavy za stejným účelem. To jeho dalekohledem jsme v noci pozorovali proměnné hvězdy, i fotometr, který byl k němu připojen, postavil on. Přes den se mi Vláda dával přes rameno a pozoroval, jak pokračuje překlad Jeansovy knihy. V té době neuměl Vláda sice anglicky o nic víc než já. Neuplynula však příliš dlouhá doba, a angličtina se stala druhým mateřským jazykem nás obou (zvláště jeho – když se před svým odchodem do Spojených států oženil s hezkým skotským děvčetem z Milngavie<sup>5)</sup>).*

V roce 1932 se Vand stal demonstrátorem Astronomického ústavu Univerzity Karlovy v Praze. Na večerních setkáních astronomů přednášel o různých tématech, např.: *O významu teorie relativity a teorie kvant pro přírodní vědy a filosofii, O stavbě komety.* V roce 1933 Vand společně s Kopalem vydal ceněný Atlas hvězd proměnných [8] (viz obr. 1) a o rok později sám Vand vydal ještě Malý atlas proměnných hvězd.



Obr. 1. Atlas hvězd proměnných.

<sup>5)</sup> Milngavie leží na severním okraji Glasgowa.

V roce 1936 Vand publikoval v *Memoirs and Observations of the Czech Astronomical Association at Prague* svůj první anglicky psaný článek [25] (srov. [6, s. 16]). Společně s J. Vlčkem se v něm zabývají systematickým sledováním tří proměnných hvězd v souhvězdí Pasterve, Žirafy a Štítu v období let 1930–1936. U každé ze tří hvězd se uvádějí jména pozorovatelů (Kadavý, Vand, Kopal, Matoušek, . . .), počty pozorování, tabulky magnitud a grafy měřených světelných křivek.

O Vandovi píše Vlček a Šternberk v *Říši hvězd 26* (1945) na str. 65–66:

V. Vand: „*Temperature of the Solar Corona*“ (dopis *Nature 151*, 728, 1943), týž autor „*A Solar Halo Phenomenon*“ (dopis *Nature 154*, 517, 1944). *Členy společnosti, kteří znají býv. předsedu sekce pro pozorování proměnných hvězd, jistě budou zajímat prvě zprávy, které jsme získali o jeho životě za války. Náš mladý fyzik a astronom RNDr. Vladimír Vand uprchl v roce 1939 již za německé okupace do Francie a odtud později před postupujícími německými vojsky do Anglie. Houževnatou prací získal významné postavení v jednom z velkých anglických průmyslových koncernů, kde se stal vedoucím fyzikálního výzkumného oddělení. Přesto však nikterak nezapomínal na astronomii a publikoval řadu článků a prací v anglických astronomických časopisech. Stal se členem Britské královské astronomické společnosti (Royal Astronomical Society) a členem Britského fyzikálního institutu (Institute of Physics). Těšíme se, že mu bude možno vrátiti se s bohatými zkušenostmi brzy zpět do vlasti a pomoci nám také v práci pro českou astronomii . . .*

O dalším Vandově článku *A theory of the evolution of surface features on the Moon* (viz [20]) ředitel lunární sekce časopisu *J. British Astronom. Assoc.*, T. L. MacDonald, v roce 1945 pochvalně píše:

*Dr. Vand's paper is to be welcomed, bringing together as it does a number of very interesting points . . . All of this is only to stress in other terms the need which Dr. Vand also poses – the need for more observations and more critical study.*

Vand tehdy vybízel k důkladnějšímu pozorování Měsíce, což později realizoval jeho přítel Zdeněk Kopal na observatoři Pic du Midi ve Francii. Jak známo, Kopalovy fotografie použila NASA pro volbu místa k přistání prvních lidí na Měsíci.

#### 4. Vandovy mechanické počítače

V roce 1933, ještě během studia, nastoupil Vand do Spektroskopického ústavu UK k profesoru Dolejškovi. Zde se seznámil s Antonínem Svobodou. V roce 1935 Vand přešel na doporučení prof. Dolejška do oddělení fyzikálního výzkumu firmy Škoda.<sup>6)</sup>

---

<sup>6)</sup> Oddělení fyzikálního výzkumu bylo tehdy společným pracovištěm Škodových závodů a Spektroskopického ústavu UK.

Zde se později s Antonínem Svobodou věnoval akustickému zaměřování letadel (jejichž rychlosti byly tehdy nízké) a prognóze jejich budoucí polohy. Jejich zaměřovač určený pro protiletadlové dělostřelectvo byl založen na myšlence analogového řešení diferenciálních rovnic popisujících dynamiku letadla. Jednalo se vlastně o mechanický analogový počítač.

Ve spolupráci firmy Škoda s francouzskými zbrojními partnery stačil Vand odjet z Československa 1. května 1939 do Francie.<sup>7)</sup> Společně s Antonínem Svobodou se dokonce stali poradci francouzské vlády.

V roce 1948 vyšla Antonínu Svobodovi obsáhlá monografie<sup>8)</sup> *Computing mechanisms and linkages* [14] o různých pákových mechanismech (eventuálně doplněných převody s ozubenými či neozubenými koly) sloužících zejména k analogovému výpočtu hodnot různých funkcí, např. balistické křivky ve vakuu.<sup>9)</sup> Tato monografie vznikla díky spolupráci s Vandem, což Svoboda v předmluvě komentuje slovy:

*The impulse to the development of the methods presented in this volume for the mathematical design of linkage computers grew out of a collaboration of the author with his friend, Dr. Vladimir Vand. That collaboration was begun in France in 1940, and was brought to a premature end by the progress of the war. Though these ideas and methods have largely been developed by the author since that time, he wishes to emphasize that credit for the initiation of the work is shared by Dr. Vand.*

(...)

A. SVOBODA

*Praha, Czechoslovakia,  
June, 1946*

Poznamenejme ještě, že v roce 1950 bylo při Ústředním ústavu matematickém na Loretánském náměstí v Praze zřízeno Oddělení matematických strojů, jež vedl Antonín Svoboda (viz [5]). Ústav byl koncem roku 1952 přejmenován na Matematický ústav a 1. ledna 1953 byl začleněn do nově vzniklé Československé akademie věd. Svobodovo oddělení se v něm rychle rozrůstalo, až v roce 1955 se stalo samostatným Ústavem matematických strojů. V září 1957 Svoboda uvedl do zkušebního provozu první československý samočinný počítač SAPO s binární aritmetikou realizovanou pomocí telefonních relé (podrobnosti viz [6]).

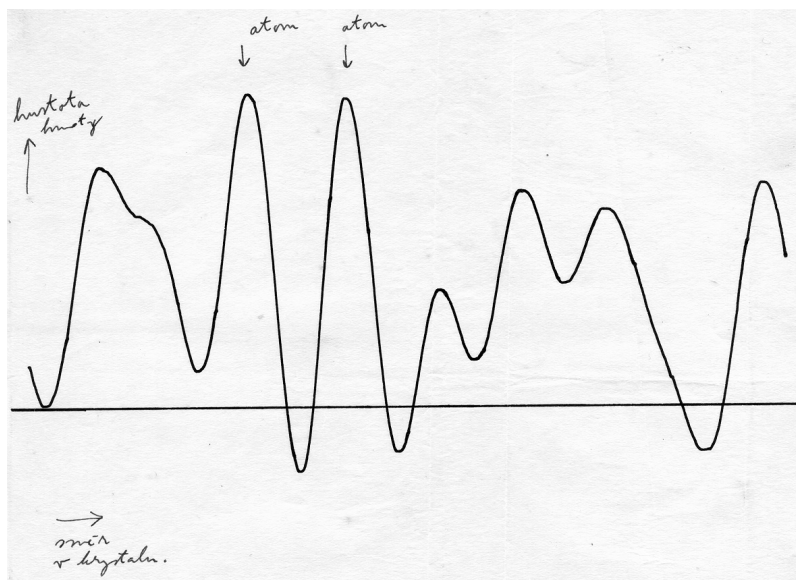
---

<sup>7)</sup> Vedoucí počítačový konstruktér ing. Jan G. Oblonský o tom v [10] napsal: *Svoboda was soon joined by his friend Vladimír Vand, a physicist who had also escaped from occupied Czechoslovakia. Together, they finished the design of their first analog computer – the anti-aircraft gunfire director – based on the use of a mechanical integrator invented by Vand. Of course, Vand was not aware that a similar device had been invented by Lord Kelvin about 100 years earlier.*

<sup>8)</sup> Kniha [14] je uložena např. v knihovně Ústavu fononiky a elektroniky AV ČR nebo v Národní technické knihovně v Praze.

<sup>9)</sup> Svoboda v roce 1944 získal U.S. Patent 2340350 na mechanismus, který stanovuje hodnoty dekadického logaritmu  $y = \log_{10} x$  pro  $1 \leq x \leq 50$ . Jeho popis je uveden v [14, s. 198].

Po válce Vand pracoval ve výzkumném oddělení firmy Lever Brothers and Unilever Ltd. v Port Sunlight. Zde se soustředil na studium krystalické struktury některých organických látek. K tomuto účelu v roce 1947 zkonstruoval svůj vlastní 6 metrů dlouhý mechanický počítač obsahující kolem milionu ocelových kuliček určených k přenosu dat a uchování numerické informace. Tento jednoúčelový počítač určoval koeficienty třírozměrných Fourierových řad difrakčních rentgenogramů krystalů, jejichž molekuly mají až 24 atomů. Jeho náčrt uvádíme v [17] a [18]. Příklad grafického výstupu ilustrujícího hustotu rozložení atomů v určitém směru je na obr. 2. Stručný popis funkce a blokové schéma svého počítače uveřejnil Vand v časopise Nature v roce 1949.



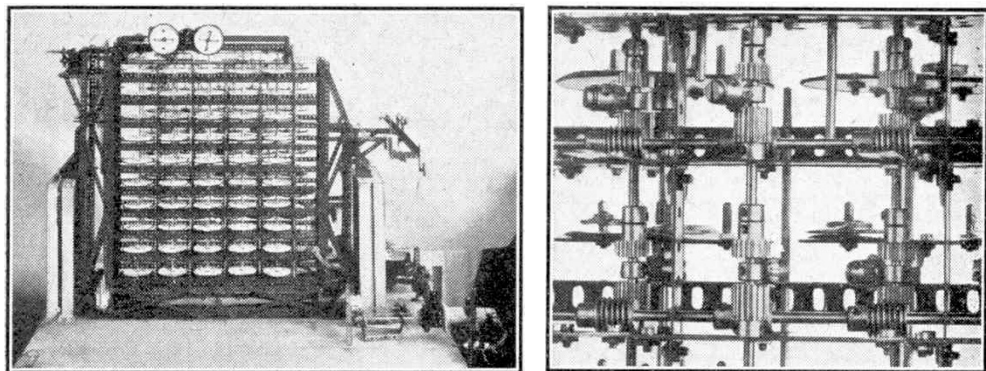
Obr. 2. Křivka hustoty atomů v krystalu je grafem trigonometrického polynomu

$$a_0/2 + \sum_{k=1}^n (a_k \sin kx + b_k \cos kx),$$

jehož koeficienty  $a_k$  a  $b_k$  Vandův počítač stanovil z difrakčních rentgenogramů.

V téže roce Vand zkonstruoval na podobném principu další počítač, který byl 4krát menší (viz obr. 3) a přitom mohl počítat mnohem složitější molekuly. I když mechanické počítače představovaly slepou větev ve vývoji výpočetní techniky, Vandův nový počítač odhalil strukturu několika organických molekul, mj. poměrně veliké molekuly trilaurinu  $C_{39}H_{74}O_6$  se 119 atomy (viz [24]), což byl tehdy rekord. Trilaurin je ester glycerínu s kyselinou laurovou. Vand zjistil, že molekula trilaurinu má uprostřed glycerín, na který jsou navázány tři řetězce kyseliny laurové  $CH_3(CH_2)_{10}COOH$ .





Obr. 3. Vandův mechanický počítač (převzato z [23]).

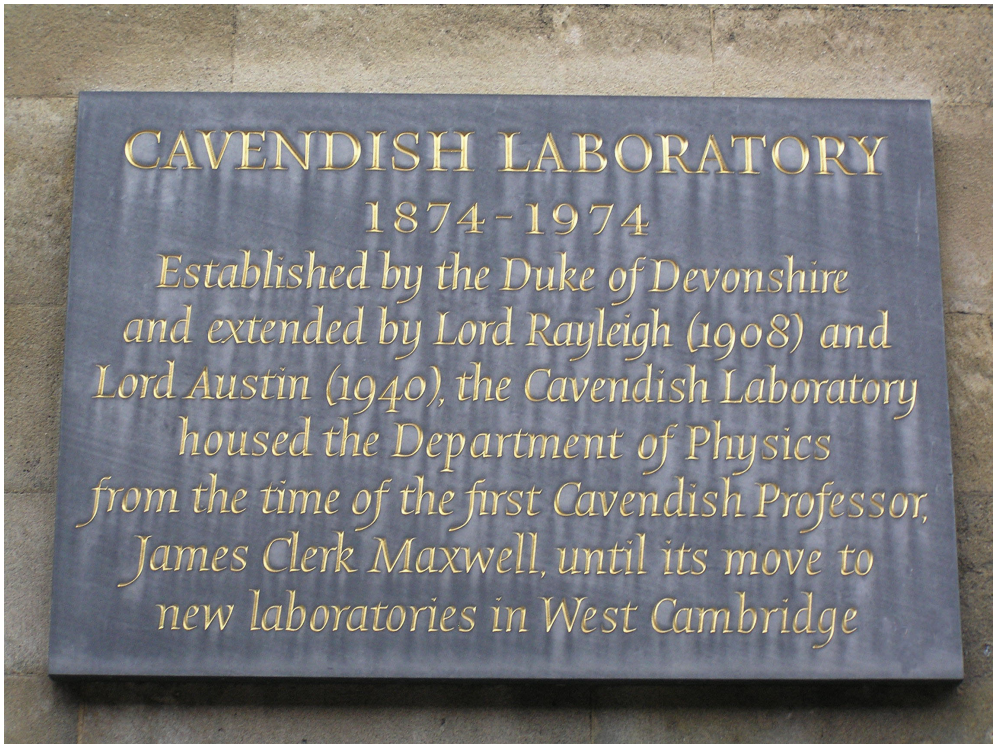
Vand také určil strukturu draselných a lithiových mýdel, což jsou soli vyšších mastných kyselin (např. stearové či palmitové). Již koncem roku 1946 se Vandovi podařilo mýdlo vykrytalizovat a získat příslušné difrakční rentgenogramy, i když jeho krystalky měly hmotnost menší než desetitisícina miligramu. O rok později o tomto objevu publikoval článek [21] v *Nature*.

O svém novém počítači Vand uveřejnil v roce 1951 článek *Magnifying 100 million times* (viz [23]). V jeho úvodu připomněl, že optickým mikroskopem nelze dosáhnout více než 3000násobného zvětšení, protože nelze pozorovat detaily menší, než je vlnová délka viditelného světla. Elektronový mikroskop může zvětšovat až 100 000krát. Cílem Vanda však bylo pozorovat jednotlivé atomy. K tomu je zapotřebí zvětšení řádově milionkrát. Vand upozorňuje, že ale zatím neumíme zkonstruovat čočky pro paprsky X, jejichž vlnová délka odpovídá rozměrům atomu. V případě krystalů lze však využít difrakce a interference paprsků X a příslušný obraz vypočítat tak, jako by jej zobrazila čočka.<sup>10)</sup> Vand si jako jeden z prvních uvědomil, že difrakční obrázky lze zpracovat výkonným počítačem, a ten tak vlastně slouží jako mikroskop. (Podobná myšlenka se dnes používá v astronomii při analýze radiointerferometrických pozorování.)

Vand v [23] uvádí základní myšlenku svého mechanického stroje a dále poznamenává, že nedávno v USA Ray Pepinsky zkonstruoval podobný elektronický počítač stroj, který umožňuje sečíst až 800 waveletových funkcí (tj. elementárních trigonometrických polynomů vynásobených Fourierovým koeficientem) a příslušný obraz ukáže na televizní obrazovce. Vandův mechanický stroj umožňoval sečíst až 100 waveletových funkcí.<sup>11)</sup> Je zajímavé, že již tehdy používal Vand termín waveletová funkce, i když teorie waveletů vznikla mnohem později.

<sup>10)</sup> Elektrony urychlené napětím desetitisíců voltů dopadají z katody na anodu. Přitom vznikají rentgenovy paprsky, které po průchodu clonou v olovené bariéře ozařují zkoumaný krystal. Dopadající elektromagnetická vlna (RTG) rozkmitá elektrony v atomových obalech. Ty začnou vyzařovat kulové vlny, které v určitých místech prostoru interferují konstruktivně a jinde destruktivně. Tím vzniká třírozměrný Fourierův obraz krystalu, tzv. reciproká mříž.

<sup>11)</sup> Termín waveletová funkce byl později zobecněn a rozšířil se až v 80. letech minulého století především díky pracím paní Ingrid Daubechies.



Obr. 4. Pamětní deska umístěná na Cavendishově laboratoři (foto J. Šístek).

## 5. Vandova pomoc při určování parametrů šroubovicových molekul

V roce 1949 Vand dostal od L. W. Bragga<sup>12)</sup> pozvání k přednášce do Cavendishovy laboratoře v Cambridge. Přednáška na téma

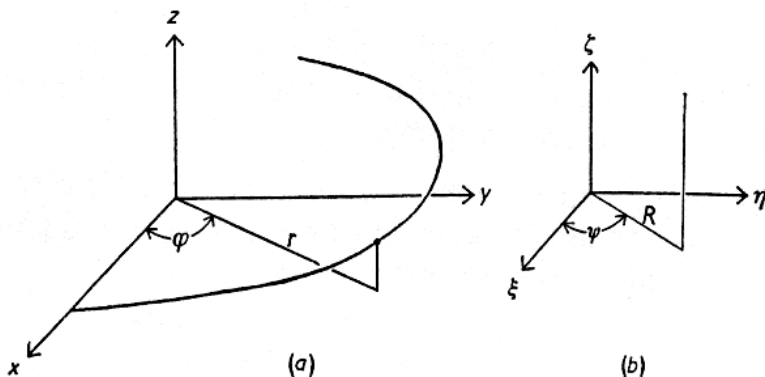
*Nové metody určování struktury komplikovaných molekul*

se konala 18. března 1949 a měla velký úspěch. Následujícího dne měl Vand důležitou schůzku s Williamem Cochranem. S ním a Francisem Crickem později Vand napsal fundamentální článek [3], kde popsali metodu pro výpočet stoupání a poloměru  $r$  šroubovicových molekul (viz obr. 5). Budeme-li jeden typ molekuly napojovat na sebe vždy stejným způsobem, lze takto postavit šroubovici, která v mezních případech může degenerovat na kružnici či přímku. Metodu otestovali na bílkovinné šroubovicové molekule poly- $\gamma$ -metyl-L-glutamátu<sup>13)</sup> a odvodili, že vzdálenost mezi sousedními

---

<sup>12)</sup> William Lawrence Bragg (1890–1971) získal Nobelovu cenu za fyziku již v roce 1915 společně se svým otcem W. H. Braggem.

<sup>13)</sup> L-glutamát je opticky aktivní aminokyselina kódovaná tripletem GAA nebo GAG. (opačná polarizace se značí D).



Obr. 5. (a) Kartézské  $(x, y, z)$  a válcové  $(r, \varphi, z)$  souřadnice bodu na šroubovicové molekule, (b) odpovídající souřadnice bodu v recipročném prostoru (viz [3]).

závity je 0.54 nm. V závěru článku [3] autoři děkují prof. L. Braggovi, prof. J. M. Robertsonovi a dr. M. F. Perutzovi.<sup>14)</sup>

Dne 18. května 1987 vyšel v Current Contents 20 (1987) článek Williama Cochran z Department of Physics na University of Edinburgh připomínající tehdejší spolupráci Vanda s Crickem a Cochranem. Na str. 16 se doslova píše toto:

*This work was done 35 years ago! In 1951 I had just received my first tenured appointment as a physics lecturer in Cambridge. Francis Crick was a research student in the Medical Research Council Unit of the Cavendish – he had come late into physics research. Vladimír Vand was a research fellow in Glasgow, whom I had met but did not know well. For me the story began when, without much expectation of being able to interpret them, I took some X-ray photographs of a specimen of poly- $\gamma$ -methyl-L-glutamate that my professor, Sir Lawrence Bragg, had obtained from another research group. My diary for October 2, 1951, notes:*

*The Prof shows a touching faith in my ability to extract a complicated crystal (sic) structure from almost no data*

*– the material was only semicrystalline, and I was used to looking at crystals. A month or so later Bragg received, possibly as a referee, a paper by Vand on the theory of X-ray diffraction by helical structures.<sup>15)</sup> He passed it on to me, and I concluded that Vand's answer was correct for a continuous helix but not for atoms on a helix. Crick also saw the paper, and when we compared notes the following day, we found that we had arrived at the same (correct) answer by different routes. A few days later I suddenly realised that*

<sup>14)</sup> Max Ferdinand Perutz získal v roce 1962 Nobelovu cenu za chemii za objevené práce o struktuře hemoglobinu a myoglobinu. Byl školitelem F. Cricka.

<sup>15)</sup> Tento článek se pravděpodobně později stal kapitolou 2 v [3]: The transform of a uniform helix, jejíž hlavní myšlenky jsme popsali v [16].

*the photographs of poly- $\gamma$ -methyl-L-glutamate, which I had put aside, could be explained as a diffraction pattern of atoms on helices of different radii. The structure turned out to be based on the  $\alpha$ -helix<sup>16)</sup> of Linus Pauling and Robert B. Corey [11]. It was, I believe, the first fairly conclusive experimental evidence for the existence of a helical structure at molecular level, and Crick and I published a short note on the subject [2].*

*The main value of this work, seen in retrospect, is that it was a first step on the road to the discovery of the structure of DNA by Jim Watson and Crick [26]–[28]. The first I knew of that work was when Crick arrived excitedly in my office to take me to see the model of a double helix that they had built. Actually, it was their first and incorrect version, but I would not have been more impressed by the correct version – I had not see the experimental evidence contained in photographs of B-type DNA, and I distrusted “speculation”. It was some time before I gradually became convinced of their tremendous success . . .*

Při práci na článku [3] z roku 1952 Vand výborně uplatnil své zkušenosti s rentgenovou spektroskopií, které získal v Dolejškově ústavu a v Port Sunlight, a vlastně tak naučil Cricka určovat parametry šroubovicových molekul. Tyto znalosti pak Crick společně s Watsonem využili ke stanovení průměru a stoupání dvojšroubovice molekuly DNA, což publikovali ve dvou článcích v Nature v roce 1953, za které získali v roce 1962 Nobelovu cenu za fyziologii nebo lékařství. Společně s nimi získal Nobelovu cenu i Maurice Wilkins, který objevil metodu, jak z DNA získat tenká vlákna vhodná pro difrakční analýzu. Díky tomu pak získal velice kvalitní difrakční rentgenogramy DNA. V jeho článku se Stokesem a Wilsonem [29], jenž vyšel také v Nature v roce 1953, je z práce [3] převzato vyjádření Fourierova obrazu šroubovice pomocí Besselových funkcí<sup>17)</sup> (podrobnosti viz [16]–[18]).

## 6. Vandův odchod do USA

V roce 1953 se Vladimír Vand rozhodl přestěhovat z Anglie do USA. O rok později obhájil velký doktorát (Doctor of Science, DSc.) na Univerzitě v Glasgow, přestože již působil v USA. Ve stejném roce se stal docentem (tj. Associate Professor) na Pensylvánské státní univerzitě a v roce 1961 byl jmenován profesorem krystalografie. I zde patřil mezi několik významných průkopníků počítačových technik a výpočetních metod zejména v krystalografii, i když už přešel na elektronkové počítače. Často byla

---

<sup>16)</sup> Poznamenejme, že Paulingova  $\alpha$ -šroubovice je (většinou) pravotočivá spirální struktura proteinů, která obsahuje řádově kolem 10 aminokyselin. Linus C. Pauling vytvořil též model trojšroubovice DNA, který se později ukázal jako chybný. V roce 1954 získal (USA) Nobelovu cenu za chemii a v roce 1962 ještě další Nobelovu cenu za mír. Jenom 4 lidé dostali 2 Nobelovy ceny.

<sup>17)</sup> Besselovy funkce  $J_n$  splňují obyčejnou diferenciální rovnici 2. řádu s proměnnými koeficienty  $x^2 J_n'' + x J_n' + (x^2 - n^2) J_n = 0$  pro  $n$  celé.





Obr. 6. Model DNA v parku před Cavendishovou laboratoří (foto J. Šístek).

citována kniha Vladimíra Vanda a Raye Pepinskyho *The Statistical Approach to X-Ray Structure Analysis*, The Pennsylvania State Univ., 1953, XVI+98, jejíž exemplář je k dispozici např. v Library of Congress ve Washingtonu, D.C. Z jejího úvodu vyjímáme:

*... Because of the general absence of information on the phases of diffracted X-rays in crystal structure studies, it has usually not been possible to accomplish X-ray analyses in a straightforward manner, independently of chemical information. ... During the past decade crystallographers have developed algebraic relations between structure factors, arising from the non-negativity and atomicity of electron densities, which provide some phase information in the case of simpler structures. Through the use of crystalline heavy atom derivatives, and particularly of isomorphous crystals – in which one heavy atom is present in one crystal and another atom of markedly differing scattering power substitutes for it in the second – it has been possible to achieve phase information for even moderately complex structures (e.g., strychnine, ergine, colchicine) ...*

Vand s Pepinským napsal celou řadu dalších fundamentálních prací o numerických a výpočetních metodách. Na několik z nich jsou odkazy i v databázi Zentralblatt für Mathematik či Mathematical Reviews.

Vandovy zájmy o výpočetní techniku byly skutečně široké. V roce 1956 programoval Vand pro firmu General Motors v Detroitu. Ve stejném roce působil i u firmy IBM v New Yorku. Kolem roku 1957 začal pracovat na počítači UNIVAC ve Philadelphii. V roce 1958 se Vand podílel na založení Groth Institute for the Classification of Information in Crystallography (viz [4]) a stal se členem Americké krystalografické společnosti. Byl také jedním ze zakladatelů Muzea mládeže ve střední Pensylvánii a konzultantem četných vládních ústavů a průmyslových podniků.

## 7. Vladimír Vand v Materials Research Laboratory

V roce 1962 vznikla na Pensylvánské státní univerzitě Materials Research Laboratory (MRL). Byla to první organizace svého druhu v celých Spojených státech. Jeden ze zakládajících členů Rustum Roy vzpomíná (2009), že se jim tehdy podařilo pro novou laboratoř získat Vladimíra Vanda, který předtím pracoval na Pensylvánské univerzitě ve skupině vedené tehdy Rayem Pepinským.

Vand měl v MRL vskutku skvělé pracovní prostředí. Koncem 60. let zde Vand začal studovat nanotrubičky, které svým tvarem připomínají šroubovicové molekuly, jejichž vlastnostmi se zabýval již v padesátých letech společně s Cochranem a Crickem (viz [18]).

Po několika nezdarech se NASA v polovině šedesátých let, v červenci 1965, konečně podařilo získat první detailní snímky povrchu Marsu sondou Mariner 4, jež odvyšlala na Zemi celkem 22 snímků, na nichž byly vidět mj. i impaktní krátery (viz obr. 7).



Obr. 7. Krátery na Marsu pořízené sondou Mariner 4 (foto NASA).



Obr. 8. Obraz Vladimíra Vanda v MRL.

Tehdy nesmírně vzrostl zájem o studium Marsu a ani Vand nezůstal stranou tohoto dění. Pro Vanda to byl zcela výjimečný okamžik, neboť se v řadě svých prací zabýval právě impaktními krátery na Měsíci i na Zemi. Nyní měl k dispozici zcela unikátní snímky povrchu dalšího nebeského tělesa.

Vand se soustředil zejména na otázky týkající se výpočtu tepla, které Mars získá od Slunce na daném místě povrchu v daném okamžiku. Polohu Marsu počítal pomocí polynomiální aproximace 5. stupně známé Keplerovy rovnice (pro odvození viz [9])

$$M(t) = E(t) - e \sin E(t),$$

kde  $e$  je excentricita eliptické dráhy Marsu, tzv. střední anomálie  $M(t) = 2\pi t/T$  je lineární funkcí času  $t$ ,  $T$  je oběžná doba Marsu a  $E(t)$  je excentrická anomálie. V roce 1968 pak Vand společně s Williamem Schlossem a Raymondem Greerem publikoval teorii (viz [13]) zabývající se výpočtem povrchové teploty Marsu a interpretací některých jeho denních i sezónních jevů způsobených kolísáním slunečního svitu. Článek [13] je doplněn i programem v jazyce FORTRAN pro počítač IBM 7074.

Anthony J. Perrotta, který byl kdysi Ph.D. studentem v MRL, nám v dubnu 2009 sdělil, že tehdy se v laboratoři znal každý s každým a Penn State University měla jen 10 000 studentů. Vand byl velice oblíbený a vedl přednášky podle vlastních skript. V dnešní laboratoři je už tolik pracovníků, že se vzájemně téměř neznají.

Mezi studenty, kteří na Vladimíra Vanda vděčně vzpomínají, je i jeho bývalá doktorandka fyzikální chemička Mary Barnes-Talbot Westergaard (viz [1, s. 142]), která obhájila disertaci v roce 1966 a poté získala stipendium v Ústavu fyzikální chemie Maxe Plancka v Göttingen v Německu. V roce 2009 nám napsala dopis:

*I worked as a post-doctoral fellow with Professor Vand during the last six months of his life. Despite his illness, he was always eager to discuss our project, even when he was in the hospital. Our calculations, in the late sixties, were some of the earliest on the structure of water, a subject both fascinating and important. We used random numbers to generate a model of the positions of the hydrogen bonds that connected single water molecules into a megastructure. He was a brilliant physicist, so imaginative that work with him was fun. I admired him immensely!*

Dne 29. srpna 1967 Vanda navždy opustila manželka Molly. V té době i Vladimír statečně vzdoroval těžkému onemocnění. Začátkem roku 1968 již nemohl chodit do práce, a tak studenti docházeli za ním. Dvě obhajoby Ph. D. se dokonce konaly v jeho domě. Vladimír Vand zemřel 4. dubna 1968 ve věku 57 let (nekrology se objevily v časopisech Nature 218 (1968), 505, Acta Crystallographica A24 (1968), 47, Říše hvězd 49 (1968), 138–139, a též ve věhlasných amerických novinách The New York Times).

Profesora Vladimíra Vanda si dodnes v MRL velice váží. Na chodbě v přízemí visí jeho obraz (viz obr. 8) spolu s obrazy dalších významných pracovníků (Ray Pepinsky, Frank Dachille aj.), kteří se významně zasloužili o rozvoj laboratoře. V přízemí visí také sádrová deska připomínající život a dílo Vladimíra Vanda. Jeho myšlenky výrazně ovlivnily poválečný rozvoj krystalografie. Své dva mechanické počítače zkonstruoval cca 10 let před vznikem prvního československého elektronického počítače SAPO v r. 1957.

**Poděkování.** Autoři děkují Mgr. Emilii Těšínské a RNDr. Filipu Křížkovi, Ph.D., za velice podnětné připomínky. Článek byl podpořen výzkumným záměrem MSM 0021620839 a grantem IAA 100190803 GA AV ČR.

## L i t e r a t u r a

- [1] *Annual Report 1967–1968*. Materials Research Laboratory, The Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania 1968.
- [2] COCHRAN, W., CRICK, F. H. C.: *Evidence for the Pauling–Corey  $\alpha$ -helix in synthetic polypeptides*. Nature 169 (1952), 234–235.
- [3] COCHRAN, W., CRICK, F. H. C., VAND, V.: *The structure of synthetic polypeptides. I. The transform of atoms on a helix*. Acta Cryst. 5 (1952), 581–586.
- [4] DOBIÁŠOVÁ, L.: *Struktura mikrosvěta – svět viděný neviditelnými paprsky*. Materials Struct. 7 (2000), 24–38.
- [5] DURNOVÁ, H.: *Sovietization of Czechoslovak computing: the rise and fall of the SAPO project*. IEEE Ann. Hist. Comput. 32 (2010), 21–31.
- [6] KLIR, G. J. (ed.): *Memorable ideas of a computer school: The life and work of Antonín Svoboda*. Czech Tech. Univ. Publ. House, Prague 2007.



- [7] KOPAL, Z.: *O hvězdách a lidech*. Edice Kolumbus, Mladá fronta, Praha 1991.
- [8] KOPAL, Z., VAND, V.: *Atlas d'étoiles variables*. Obser. Štefánik, Praha 1933.
- [9] KRÍŽEK, M.: *O Keplerově rovníci*. Matematika-fyzika-informatika 19 (2008/2009), 449–452.
- [10] OBLONSKÝ, J. G.: *Eloge: Antonín Svoboda, 1907–1980*. Ann. Hist. Comput. 2 (1980), 284–298.
- [11] PAULING, L., COREY, R. B.: *The structure of synthetic polypeptides*. Proc. Nat. Acad. Sci. USA 37 (1951), 241–281.
- [12] PAVLÍKOVÁ, P.: *125 let od narození Miloše Köslera*. PMFA 54 (2009), 144–156.
- [13] SCHLOSSE, W. A., GREER, R. T., VAND, V.: *Computation and interpretation of isolation tables for the surface of Mars*. Trans. Amer. Geophys. Union 49 (1968), 250.
- [14] SVOBODA, A.: *Computing mechanisms and linkages*. McGraw-Hill Book Company, INC., New York, London 1948.
- [15] ŠOLCOVÁ, A.: *Vznik a první léta České astronomické společnosti*. Astropis 15 (2008), č. 1, 14–19.
- [16] ŠOLCOVÁ, A., KRÍŽEK, M.: *Nobelova cena na dosah — zapomenutý osud fyzika Vladimíra Vanda*. PMFA 53 (2008), 7–21.
- [17] ŠOLCOVÁ, A., KRÍŽEK, M.: *Vladimír Vand (1911–1968). Pioneer of computational methods in crystallography*. IEEE Ann. Hist. Comput. 33 (2011).
- [18] ŠOLCOVÁ, A., KRÍŽEK, M.: *Cesta ke hvězdám i do nitra molekul: Osudy Vladimíra Vanda, konstruktéra počítačů*. Matematický ústav, Akademie věd ČR, Praha 2011.
- [19] VAND, V.: *Nový fotometr Lidové hvězdárny Štefánikovy*. Říše hvězd 12 (1931), 65–68.
- [20] VAND, V.: *A theory of the evolution of the surface features of the Moon*. J. British Astronom. Assoc. 55 (1945), April, 47–52.
- [21] VAND, V., LOMER, T. R., LANG, A.: *Crystal structure of a crossed-chain potassium soup*. Nature 159 (1947), 507–507.
- [22] VAND, V.: *Viscosity of solutions and suspensions. I: Theory*. J. Phys. Colloid Chem. 52 (1948), 277–299.
- [23] VAND, V.: *Magnifying 100 million times*. The Meccano Magazine 36 (1951), 247.
- [24] VAND, V., BELL, I. P.: *A direct determination of the crystal structure of the beta-form of trilaurin*. Acta Cryst. 4 (1951), 465–469.
- [25] VAND, V., VLČEK, J.: *Observations of variable stars RY Bootis, ST Camelopardalis and R Scuti*. Memoirs and Observations of the Czech Astronomical Association at Prague, Prometheus, Praha 1936, No. 4, 1–10.
- [26] WATSON, J. D.: *The double helix: A personal account of the discovery of the structure of DNA*. Weidenfeld and Nicolson, London 1968.
- [27] WATSON, J. D., CRICK, F. H. C.: *A structure for deoxyribose nucleic acid*. Nature 171 (1953), 737–738.
- [28] WATSON, J. D., TOOZE, J.: *The DNA story: a documentary history of gene cloning*. Freeman, San Francisco 1981.
- [29] WILKINS, M. H., F., STOKES, A. R., WILSON, H. R.: *Molecular structure of deoxyribose nucleic acids*. Nature 171 (1953), 738–740.