

混沌体系中寻找周期轨迹的方法^{*}

王培杰^{1)†} 吴国祯²⁾

¹⁾ 清华大学高等研究中心, 北京 100084)

²⁾ 清华大学物理系, 原子分子纳米科学教育部重点实验室, 北京 100084)

(2004 年 10 月 21 日收到, 2004 年 11 月 22 日收到修改稿)

一个不可积混沌体系, 由于扰动而遭到破坏时, 存活的周期轨迹体现了体系的本质特征, 是体系的运动骨架. 在一定程度上, 可以由周期轨迹来量子化不可积体系, 这充分说明了周期轨迹的重要性. 而寻找周期轨迹, 也就成为研究混沌体系动力学特性以及对混沌体系进行量子化的关键问题. 结合具体实例, 给出了 3 种常用的寻找周期轨迹方法, 并详细探讨了各种方法的优缺点和适用范围.

关键词: 周期轨迹, 数值方法, 混沌

PACC: 0545, 0547

1. 引 言

分子高激发振动态体系, 由于模间强烈的非线性耦合, 使得体系变为不可积, 又由于它是个多体体系, 因此, 运用传统量子力学波函数的方法来处理它就会遇到很大的困难. 然而, 近年来, 经典力学理论的发展为这种不可积体系的研究打开了新的思路, 尤其是有关经典力学混沌理论的研究, 正引导人们思考与其相对应的量子特性问题^[1]. 这当中涉及到如何运用经典力学的思想和方法来研究量子物理课题. 而分子的振动, 特别是分子高激发态的振动研究正是这一思想的合理延伸, 因为这时体系的能量高, 其量子态已接近于经典的行为, 同时非线性的效应又使得振动体系展现多种奇异结构与性质, 如分形和混沌等. 因此, 问题就变成如何运用半经典的方法从非线性力学的角度来研究分子振动的不可积体系. 这是个引人入胜的课题, 而这当中典型的课题就是有关不可积体系(混沌体系)的半经典量子化问题.

Gutzwiller^[1]的周期轨迹理论是不可积体系的半经典量子化研究的一个突破性进展. 该理论的求迹公式可以由经典的周期轨迹来求取不可积体系的量子能级, 这充分强调了不可积量子体系中周期轨

迹的作用. 早在 1892 年, 庞加莱(Poincare)首先指出了周期轨迹的重要性, 并暗示对周期轨迹的研究能够为体系的所有动力学行为提供线索. 在可积体系中, 由于大量的运动守恒量的存在, 从而存在着大量的周期轨迹. 当体系受到扰动时, 体系的非线性效应增强, 这些运动守恒量乃至体系的周期轨迹遭到破坏, 从而又产生了新的稳定的周期轨迹和不稳定的周期轨迹, 而在不稳定的周期轨迹附近就会产生混沌. 根据 KAM(Kolmogorov, Arnold 和 Moser)定理, 由于扰动而使体系遭到破坏时, 存活的周期轨迹体现了体系的本质特征, 是体系的运动骨架. 这充分说明了周期轨迹的重要性. 我们的工作^[2]显示, 对于分子振动体系, 随着能量的增加, 轨迹虽然多为混沌的, 但仍有大量的残存周期轨迹. 这些周期轨迹与体系的量子化有一定的联系, 即周期轨迹中, 短周期的轨迹的作用量的量子化(整数值)正好与低能态有对应关系. 因此, 寻找周期轨迹, 成为研究体系动力学特性以及对混沌体系进行量子化的关键问题. 寻找周期轨迹有多种方法, 如 multiple shooting algorithms^[3], Monodromy method^[4], recurrence method^[5]. 我们常用寻找周期轨迹的方法有 3 种, 庞加莱截面方法, 线段迭代交点方法^[6], 牛顿拉夫申方法(Newton-Raphon method)^[7]. 本文结合具体例子, 对这些方法的应用分别加以说明.

^{*} 国家自然科学基金(批准号 20373030, 10347112)资助的课题.

[†] E-mail: wpj@tsinghua.edu.cn

2. 庞加莱截面方法

用经典的方法研究一个哈密顿量为 $H = H(q_s, p_s, q_t, p_t)$ 的体系, 其动力学特性由哈密顿运动方程给出, $\partial H / \partial p_\alpha = dq_\alpha / dt$, $\partial H / \partial q_\alpha = -dp_\alpha / dt$, $\alpha = s, t$, 这里的 (q_α, p_α) 是一对共轭坐标. 即给定不同的初始点 $(q_s, p_s, q_t, p_t)_0$, 由哈密顿运动方程随时间演化, 我们利用其在相空间中演化的轨迹 $(q_s, p_s, q_t, p_t)_t$ 来观察其动力学特性. 对于具有本征能量 E 的每一个能态, 可以由 $E = H(q_\alpha, p_\alpha)$ 求得每一本征态的相空间初始解. 对于自由度 $n = 2$, 我们要观察其 4 维的 (q_s, p_s, q_t, p_t) 相空间轨迹是很不方便的. 庞加莱提出用截面来观察多维相空间轨迹特性的方法, 这就是庞加莱截面方法^[8]. 对于在 4 维相空间运动的体系, 由于能量的守恒, 使得轨迹只在 3 维空间中的环面上运动. 这时, 如果只取某个截面, 例如 $q_t = \text{const}$ (const 是常数, 一般取为 0) 之截面作为观察的区间, 如图 1 的 X_p 截面, 则轨迹会是

$$X = (q_s, p_s),$$

此处 (q_s, p_s) 就是 X 在截面上之坐标. 这就是说当轨迹穿过截面时, 即在截面上留下一个痕迹. 在截面上, 会看到一系列的 X_n 点. 但 X_{n+1} 点不会由 X_n 点唯一决定, 这是因为哈密顿量或能量是 p_t^2 的函数, 能量的守恒, 不足以唯一确定 p_t . 为了弥补这个问题, 使得 X_{n+1} 由 X_n 唯一确定, 可要求当轨迹穿过截面时, 并且当 $p_t < \alpha$ (或 > 0 亦可) 才在截面上留下痕迹. 这样, 便可在截面上看到一系列唯一的痕迹. 这些痕迹忠实地反映着轨迹的本质特征. 一般地, 我们确定在 $q_t = 0, p_t < 0$ 的截面 $X = (q_s, p_s)$ 时, 需要注意在数值计算中, $q_t = \text{const}$ 是不可能精确实现的, 在附录中给出一个技巧, 并见文献 [9].

为了阐述的方便, 用 p^n 来表示一个在 (q_s, p_s)

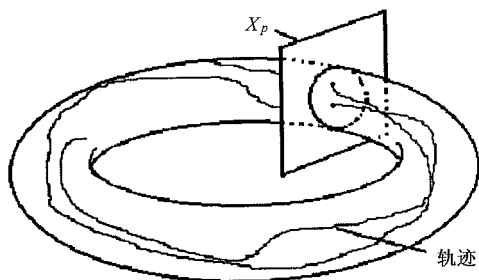


图 1 庞加莱截面, 如图中的 X_p 截面

上有 n 个截点的周期轨迹. 这就是说, 如果从 (q_s, p_s) 截面上观察这个周期轨迹, 它在该截面上留下 n 个截点, 我们就说它的周期是 n , 称它为周期 n 轨迹.

由 KAM 定理, 对于不可积体系, 大致有三种不同的运动: 周期, 准周期和混沌运动. 从庞加莱截面上观察, 周期运动对应于孤立的点, 准周期运动对应于连续的闭合的椭圆. 一般地, 周期运动多出现在由这些准周期运动组成的椭圆“岛屿”的中心, 并且在几个不同的这样的“岛屿”中心循环跳动. 混沌运动则对应于弥散在截面上的不规则的点. 因此通过观察庞加莱截面, 可以确定出对应于准周期“岛屿”中心的稳定的周期轨迹. 但是, 对于弥散于混沌轨迹“海洋”中间的不稳定的周期轨迹, 无法通过观察庞加莱截面获得, 这就需要用牛顿拉夫申迭代方法求取. 而且, 该方法只是粗略判断周期轨迹位置的方法, 并不能给出足够精度的周期轨迹的坐标.

对于 DCN 振动体系, 其具有两个莫尔斯 (Morse) 振子类型的伸缩键 D—C 和 C—N, 并且它们之间具有 1:1 和 2:3 共振. 其陪集哈密顿量可以表示成如下形式^[10]:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{st} + H_K, \\ H_0 &= \omega_s(n_s + 1/2) + \omega_t(n_t + 1/2) \\ &\quad + X_{ss}(n_s + 1/2)^2 + X_{tt}(n_t + 1/2)^2 \\ &\quad + X_{st}(n_s + 1/2)(n_t + 1/2), \\ H_{st} &= K_{st}(q_s q_t + p_s p_t), \\ H_K &= K[(q_s^2 - p_s^2) \left(\sqrt{2} q_t^3 - \frac{3n_t}{\sqrt{2}} q_t \right) \\ &\quad - 2q_s p_s \left(\sqrt{2} p_t^3 - \frac{3n_t}{\sqrt{2}} p_t \right)], \end{aligned} \quad (1)$$

其中, $n_s = (q_s^2 + p_s^2)/2$, $n_t = (q_t^2 + p_t^2)/2$, 下标 s 和 t 分别代表 D—C 和 C—N 两个伸缩键. ω 和 n 代表频率和量子数, X 是非谐项, H_{st} 和 H_K 分别是 s 和 t 这两个伸缩键之间的 1:1 和 2:3 共振项, K_{st} 和 K 分别为共振项的系数.

上述哈密顿量表达式中的各参数可以由计算的哈密顿量 H 的能级数据与实验所得的数据相拟合而确定下来^[11], 由哈密顿方程

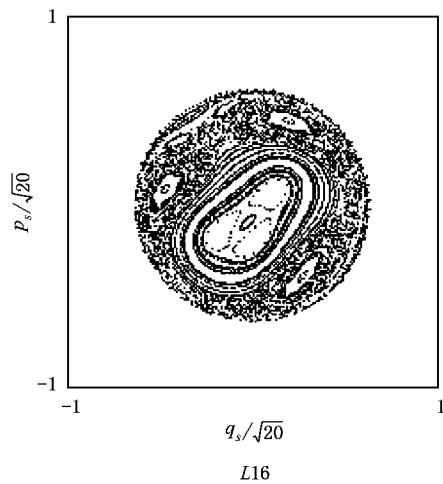
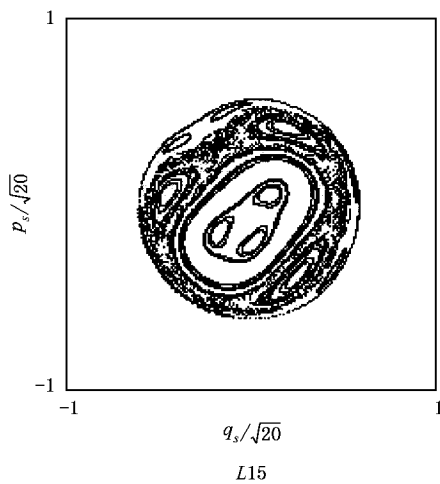
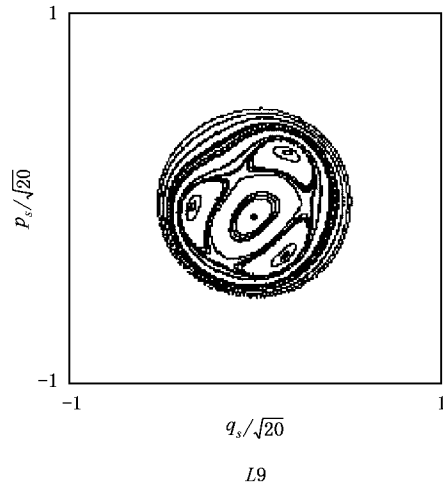
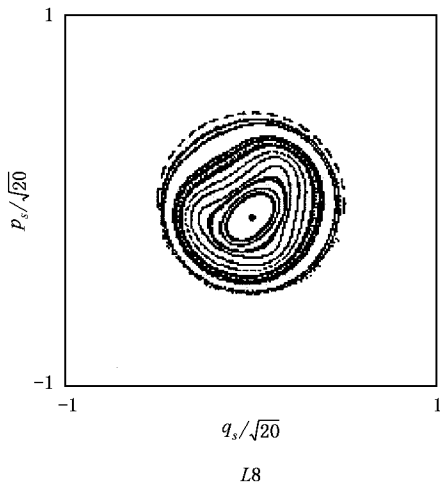
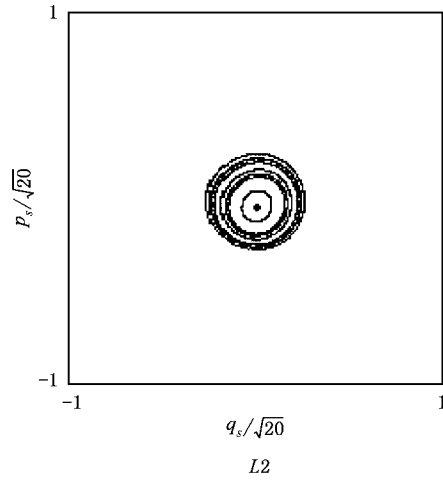
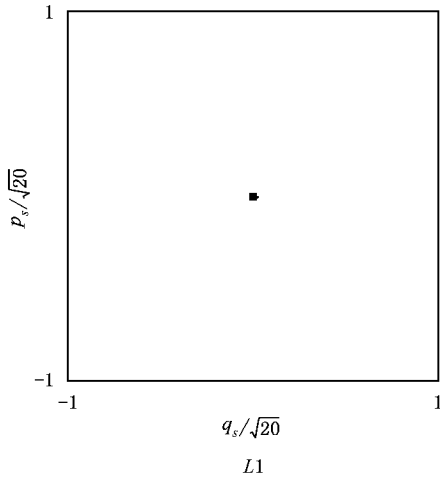
$$\begin{aligned} \partial H / \partial p_\alpha &= dq_\alpha / dt, \\ \partial H / \partial q_\alpha &= -dp_\alpha / dt \quad (\alpha = s, t) \end{aligned} \quad (2)$$

便可观察其动力学特性了. 对于已知的本征能量 E , 可从 $H(q_\alpha, p_\alpha) = E$ 方程中, 求取相空间的数值解, 得到 4 维的相空间初始点 $(q_s, p_s, q_t, p_t)_0$, 然

后由微分方程(2)出发,观察其在相空间中演化的轨迹,寻找那些由非线性引致的周期轨迹.我们运用庞加莱截面方法,压缩了体系运动空间的一个自由度,这给我们的研究带来很大的方便.可以直接观察某

个截面上的痕迹,由这些痕迹来判断某轨迹是否是周期轨迹.下面是对 DCN 的 66 个能级的庞加莱截面的一个初步观察.

对于 DCN 这样的混沌体系,大致有三种不同的



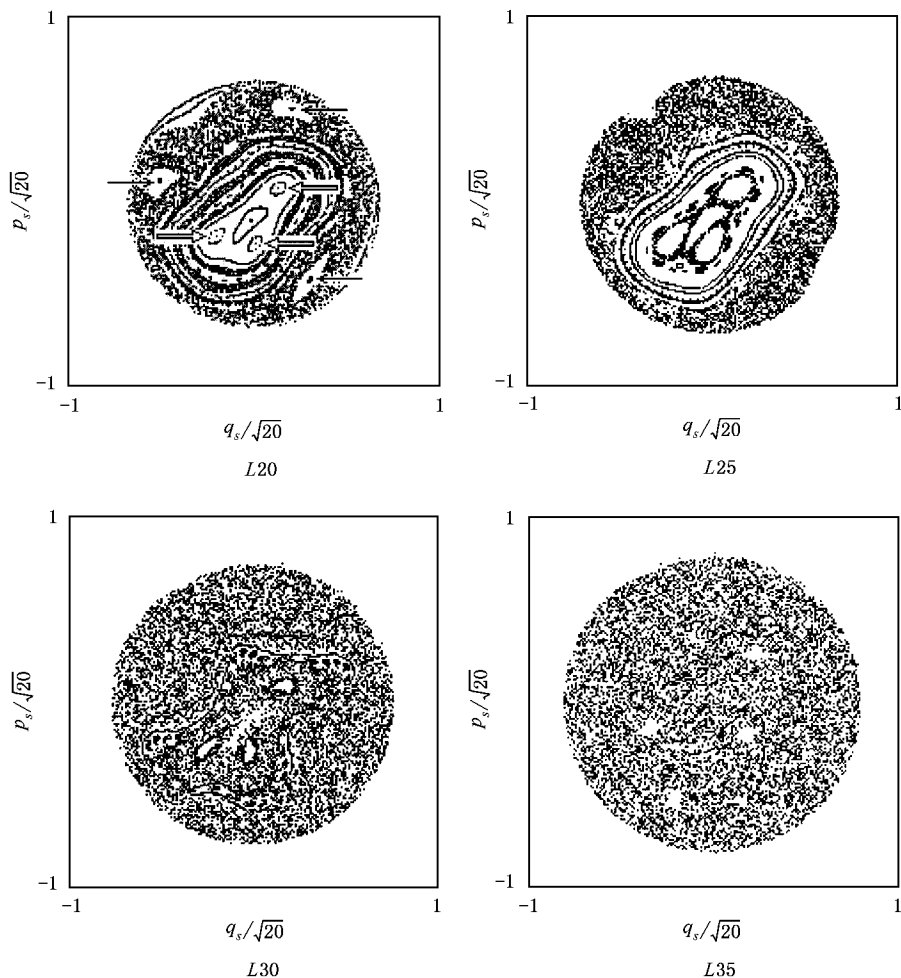


图 2 DCN 的不同能级下的庞加莱(q_s, p_s)截面(能级序号从基态算起,并用 $L \#$ 表示)

运动:周期、准周期和混沌运动。从庞加莱截面上观察,可以观测到周期运动对应于孤立的点。如图 2 的 $L20$ 的箭头所示。准周期运动对应于连续的闭合的椭圆。一般地,周期运动多出现在由这些准周期运动组成的环面“岛屿”的中心,并且在几个不同的这样的“岛屿”中心循环跳动。图 2 中 $L20$ 所示的实心,和空心箭头所指的分别是一个分布在截面外围和内围的周期 3 轨迹。而在截面的中心,则是一个不动点,即周期 1 轨迹。混沌运动则对应于弥散在截面上不规则的点。

由此可将体系的能级大体分为三类,从能级 1 到能级 15(2031cm^{-1} 至 11915cm^{-1}),主要是准周期运动。需要特别注意的是在基态,无论是准周期或是周期轨迹,它们都不可区分,所有的相空间轨迹在截面上都收缩成一点,此点即为不动点。当能级升高时,在截面上除了不动点外,还出现了准周期运动。能级 16 至 30(12502cm^{-1} 至 16820cm^{-1}),在截面上发

现除了有准周期运动外,还发现了新的周期运动,并且痕迹的混沌程度不断增加。在这个能级范围,周期、准周期运动与混沌运动并存的。对于 31 以上的能级,截面上显示的轨迹基本上都是混沌运动了。

值得注意的是,根据 Sarkovskii 定理:一个体系中,如果存在着周期 3 轨迹,则任何周期的轨迹都会存在,也包括周期为无穷大的混沌轨迹,因此体系是混沌了。即周期 3 意味着混沌。这只是 Sarkovskii 定理论上的推测,而我们在实际的 DCN 振动体系中观测到了这一结论。随着体系能级升高,不可积性增强,我们在第 9 能级观察到了周期 3 轨迹,并且发现在 DCN 体系中也确实出现了混沌。因此通过观察庞加莱截面,可以确定出对应于准周期“岛屿”中心的稳定的周期轨迹。但是,对于弥散于混沌轨迹“海洋”中的不稳定的周期轨迹,无法通过观察庞加莱截面获得,这就需要用线段迭代交点方法或者牛顿拉夫申迭代方法求取。

3. 线段迭代交点方法

对于线段迭代交点方法,仍然需要借助于庞加莱截面,首先在庞加莱截面上选取一段线段,即求得的初始点非常致密.一般地,选取的线段为庞加莱截面上的坐标轴.然后,让这些致密的初始点随哈密顿运动方程演化,等到它们分别再演化回到庞加莱截面上时,记录下它们分别在庞加莱截面上的值.一般地,如果体系不是完全遍历的混沌体系,这些致密的初始线段演化后仍然是一段致密的线段.接着继续随时间演化,并记录下一次它们分别演化到庞加莱截面上的值,初始线段第一次返回庞加莱截面,称第一次迭代,依次类推,直到第 n 次迭代.然后,将这 n 次的迭代值画在同一图上,它们的交点就是要寻找的体系的周期点.

具有两个振子耦合的 Henon-Heiles 体系是一个著名的混沌体系的例子^[12],其哈密顿可以写成

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + x^2 + y^2) + \lambda x \left(y^2 - \frac{1}{3}x^2 \right),$$

这里的 x 和 y 是振子的位置坐标,而 p_x 和 p_y 是对应的共轭动量, λ 是非谐耦合常数.可从 $H(q_a, p_a) = E$ 方程中,求取相空间的初始点 (q_s, p_s, q_t, p_t) 的数值解,通过对运动方程的数值积分,可以获得体系的轨迹在相空间的动力学行为.用线段迭代交点方法求解体系的周期轨迹时,需要选取的初始点应该在庞加莱截面上的某个坐标轴上的一段致密的线段,比如选择在 $q_t = 0, p_t < 0$ 的庞加莱截面 (q_s, p_s) ,此时初始点的形式为 $(q_s, 0, 0, p_t)$ (即此时取 $p_s = 0, q_t = 0$,再由 $H(q_s, p_s, q_t, p_t) = E$ 数值求解 q_s, p_t) 或者 $(0, p_s, 0, p_t)$ (即此时取 $q_s = 0, q_t = 0$,再由 $H(q_s, p_s, q_t, p_t) = E$ 数值求解 p_s, p_t) 然后,运用哈密顿运动方程随时间进行数值积分,求得任意演化时间的相空间解 (q_s, p_s, q_t, p_t) ,当初始点演化到 $q_t = 0, p_t < 0$ 的庞加莱截面 (q_s, p_s) 上时,记录所有的初始点在庞加莱截面上的数值.如图 3 所示,在 $E = 0.9986$,初始点线段 i_0 第 1 次,第 2 次和第 3 次演化到庞加莱截面的痕迹的交点 A, B, C 为周期 1 轨迹,而 A, C 是稳定的周期 1, B 为位于混沌轨迹中的不稳定周期 1 轨迹.如果要寻找其他的周期轨迹,须将初始点线段进行更多次的演化,如图 4 表示的是 $E = 7.8327$,初始点线段 i_0 (其形式为 $(0, p_s, 0, p_t)$) 前 6 次迭代到庞加莱截面的痕迹,其中黑色

圆点表示的是两个周期 6 轨迹.需要注意的是:不是做了几次迭代,就只能得到周期几的轨迹,别的更高周期的轨迹也会出现,只是未必明显而已.为了明确,最好能再核实所判定的轨迹是否就是所预期的周期的轨迹.

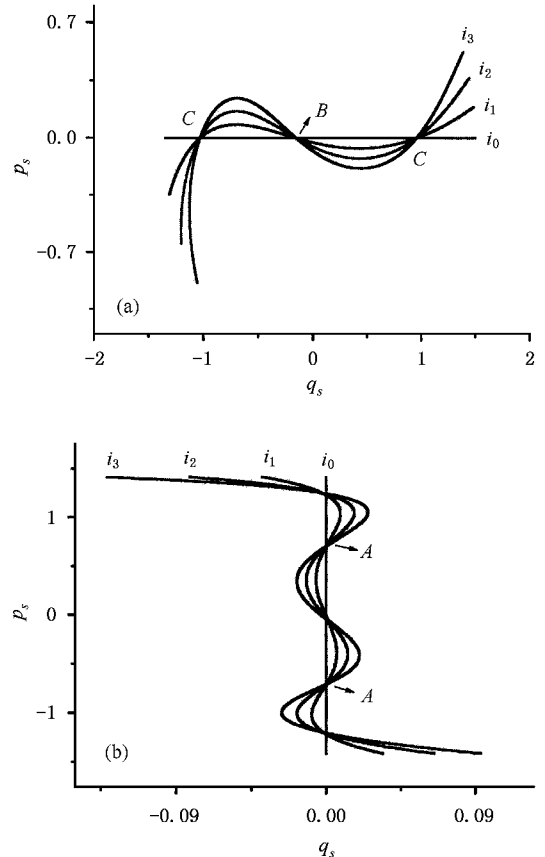


图 3 用线段迭代交点方法获得的 HH 体系的 $E = 0.9986$ 周期 1 轨迹(其中所示的线段的交点 A, C 是稳定的周期 1, B 为位于混沌轨迹中的不稳定周期 1 轨迹. i_0 指初始点线段, i_1, i_2, i_3 分别指初始点线段 i_0 第 1 次,第 2 次和第 3 次迭代到庞加莱截面的痕迹.这里取 $\lambda = (0.0125)^2$. 初始点的形式为 $(q_s, 0, 0, p_t)$ (a); $(0, p_s, 0, p_t)$ (b))

需要指出,该方法是一个快捷的寻找周期轨迹的方法,如果要求的精度不高,可以初步确定周期轨迹的初始位置,如果要求周期轨迹的精度高,则需要在选取初始线段的点应非常致密,这就增加了计算的时间.而且,该方法也有一定的适用范围,即对于可积体系,或近可积体系比较成功,若体系为近遍历的混沌体系,由混沌的对初始条件的敏感特性,则线段迭代后相互交错,不容易由庞加莱截面判断交点的位置.利用本方法寻找混沌体系 DKP (Diamagnetic Kepler Problem) 的周期轨迹就是一个不合适的例子.

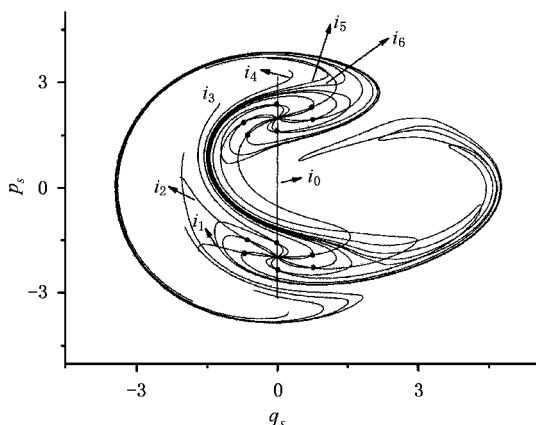


图 4 HH 体系在 $E = 7.8327$, 最初 6 次迭代到庞加莱截面的痕迹 (其中黑色圆点表示的是两个周期 6 轨迹, i_0 指初始点线段, i_1, i_2, i_3, \dots 分别指初始点线段 i_0 第 1 次, 第 2 次和第 3 次... 迭代到庞加莱截面的痕迹)

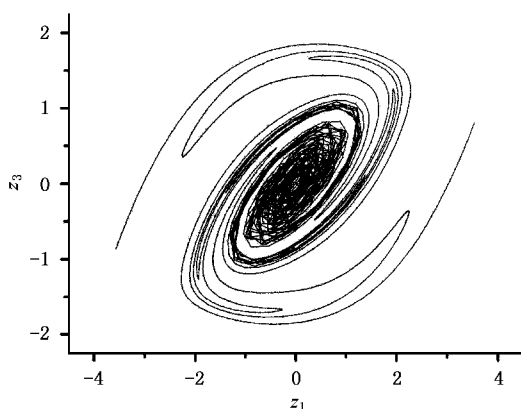


图 5 $\epsilon = -0.125$, 初始点的形式为 $(0, z_3, 0, z_4)$, 迭代一次后的庞加莱截面

DKP 标度化的哈密顿量可以表示为^[13]

$$H = \frac{1}{2}(p_\rho^2 + P_z^2) - \frac{1}{(\rho^2 + z^2)^2} + \frac{L^2}{2\rho^2} + \frac{1}{8}\rho^2,$$

其中 L 是 z 分量上的角动量, 为研究简单化, 取 $L = 0$ 的情况.

为了避开哈密顿量在 $r = 0$ 处的奇点, 进行如下正则坐标变换:

$$\begin{aligned} \rho &= z_1 z_2, \\ z &= \frac{1}{2}(z_2^2 - z_1^2), \\ p_\rho &= \frac{1}{z_1^2 + z_2^2}(z_1 z_4 + z_2 z_3), \\ p_z &= \frac{1}{z_1^2 + z_2^2}(z_2 z_4 - z_1 z_3). \end{aligned}$$

得到新的在某个标度化能量 ϵ 下的哈密顿量 H' , 且 H' 的质能量等于 2, 即

$$H' = \frac{1}{2}(z_3^2 + z_4^2) - \epsilon(z_1^2 + z_2^2) + \frac{1}{8}z_1^2 z_2^2(z_1^2 + z_2^2) \equiv 2,$$

如图 5 所示是 DKP 体系在 $\epsilon = -0.125$, 初始点的形式为 $(0, p_u, 0, p_v)$, 迭代一次后的庞家莱截面. 从中可以看出混沌体系对初始条件的敏感特性, 如果要找多次迭代后线段的交点, 显然是比较困难的. 因此, 要寻找类似 DKP 这样的混沌体系的周期轨迹, 交点迭代方法不再合适, 这就需要下节介绍的牛顿拉夫申方法.

4. 牛顿拉夫申方法

对于一个自由度为 N 的哈密顿体系, 为了简化数学方程式, 用 $x \equiv x(q_i, p_i)$ 表示体系运动相空间的一个点. 利用 x 可以写出哈密顿运动方程

$$\frac{dx(t)}{dt} = \dot{x}(t) = J \nabla H(x(t)), \quad (3)$$

$$J = \begin{pmatrix} 0_N & I_N \\ -I_N & 0_N \end{pmatrix}, \quad (4)$$

式中 0_N 和 I_N 分别是 $N \times N$ 的零矩阵和单位矩阵. 对于一个周期为 T 的周期轨迹, 满足

$$x(T) - x(0) = 0, \quad (5)$$

考虑到任意的坐标和动量的初始值 $s (s \equiv (q_i, p_i))$,

$$x(0) = s, \quad (6)$$

此时, 引入一个独立的变量 B ,

$$B(s; T) = x(T; s) - s, \quad (7)$$

我们用 s_* 表示方程 (7) 的根, 则

$$B(s_*; T) = 0, \quad (8)$$

因此, 如果 s 是靠近 s_* 的初始值, 通过对哈密顿运动方程 (1) 积分至周期 T , 求得函数 $B(s; T)$ 的值. 通过适当的修正初始值 s , 希望得到方程 (7) 的一个收敛的解, 即

$$s \rightarrow s_*, B \rightarrow 0.$$

一般地寻找方程 (8) 的根的方法就是牛顿拉夫申方法. 这是一个迭代方法, 在每次迭代 k 就更新一次轨迹的初始值,

$$s_{k+1} = s_k + \Delta s_k, \quad (9)$$

修正值 Δs_k 可以通过方程(7)的一次泰勒多项式展开获得

$$B(s_{k+1}; T) \approx B(s_k; T) + \frac{\partial B}{\partial s_k} \Delta s_k = 0, \quad (10)$$

对于第 k 次迭代,

$$B(s_k; T) = x_k(T; s_k) - s_k. \quad (11)$$

由此

$$B(s_k; T) + \left[\frac{\partial x_k(T; s_k)}{\partial s_k} - I_{2N} \right] \Delta s_k = 0, \quad (12)$$

其中雅可比矩阵(Jacobian matrix)

$$Z_k(T) = \frac{\partial x_k(T; s_k)}{\partial s_k} \quad (13)$$

是基本矩阵,其数值可以通过对方程(1)线性方程组的积分获得

$$\delta \dot{x}(t) = J \partial^2 H(x(t)) \delta x(t), \quad (14)$$

即

$$\dot{Z}(t) = J \partial^2 H(x(t)) Z(t). \quad (15)$$

所以,运用牛顿拉夫申方法进行第 k 次迭代时,利用已知的初始条件

$$\begin{aligned} x_k(0) &= s_k, \\ Z_k(0) &= I_{2N}, \end{aligned} \quad (16)$$

首先对微分方程

$$\begin{aligned} \dot{x}_k(t) &= J \nabla H(x_k(t)), \\ \dot{Z}_k(t) &= J \partial^2 H(x_k(t)) Z_k(t) \end{aligned} \quad (17)$$

进行积分至时间 T ,可以获得迭代至时间 T 后的 $x_k(T)$, $Z_k(T)$ 的值,进一步由(11)式可以得到 $B(s_k; T)$ 的值,然后,再求解线性代数方程

$$[Z_k(T) - I_{2N}] \Delta s_k = -B(s_k; T), \quad (18)$$

得到 Δs_k 的数值解.因为求解方程(18)的根是一个逼近过程,即要求 $\Delta s_k \rightarrow 0$,一般地,当满足一定的精度时,即 $\|\Delta s_k\| < \delta$, δ 为要求的一个很小的正数时,停止迭代,记录此时的 s_k ,它就是要寻找的周期为 T 的周期轨迹上的一个点.如果 $\|\Delta s_k\| > \delta$,利用(9)式,继续迭代并且积分,积分时间为周期 T ,依次类推进行计算求解 Δs_k .

此方法所需解的微分方程数目来自(17)式,总共是 $2N + 2N = 4N$.

对于周期轨迹,基本矩阵在时间 $t = T$ 时又叫单值矩阵(Monodromy matrix), $M = Z(T)$,单值矩阵的本征值可以用来分析周期轨迹的稳定性.

对于一个具体的自由度为 N 动力学体系,一般地,不知道体系的周期轨迹的周期 T ,而上述方法中必须先知道要寻找的周期轨迹的周期.这些问题

可以利用庞加莱截面来解决.

利用庞加莱截面,可以无须预先知道要寻找的周期轨迹的周期 T ;而且在求取单值矩阵 M (即 Jacobian matrix)时比较简便,需要进行积分运算的方程个数为 $2N + 2N(2N - 2) = 2N(N - 1)$.首先,要选取的初始点 s 都在庞加莱截面上选取,则 $x_k(0) = s$.由哈密顿运动方程随时间演化,当积分至庞加莱截面上时,记录初始点 s 在庞加莱截面上的积分值 $x_k(t)$,并由(11)式计算出 B , $B = x_k(t) - x_k(0)$.同时,计算得到 M 的数值(下文介绍利用庞加莱截面获得 M 的数值),由(18)式(即将 Z 矩阵由 M 取代)即可得到 Δs_k 的数值解,然后再进行迭代并重复上述过程.如果要记录的 $x_k(t)$ 是初始点 s 第一次积分至(不包含初始点)庞加莱截面上的积分值,则求出的周期轨迹是周期 1,如果是第 n 次积分至庞加莱截面上的积分值,则求出的周期轨迹是周期 n .

下面介绍如何利用庞加莱截面获得 M 的数值.用 M 在庞加莱截面上的小的位移矩阵 M^{fd} 来代替 M .这个方法也叫有限差方法(finite difference method).

通常,用 $x_k^0(t)$ 表示一条中心轨迹,上标 0 表示中心轨迹.在同一庞加莱截面上的 $2N - 2$ 独立的方向上分别偏离中心轨迹很小的偏差,作为新的 $2N - 2$ 个偏移轨迹的初始点.每个独立方向上的偏移记作 δ_i (一般地,实际计算中取各个方向上的偏差 δ_i 都相同).并且这新的 $2N - 2$ 个偏移轨迹随 $x_k^0(t)$ 在同样的哈密顿运动方程下一起随时间演化.用 $x_k^i(t)$ 表示新的 $2N - 2$ 个偏移轨迹, $i = 1, \dots, 2N - 2$.当中心轨迹 $x_k^0(t)$ 随时间演化返回庞加莱截面上时,新的 $2N - 2$ 个偏移轨迹 $x_k^i(t)$ 也一同随时间演化返回庞加莱截面,此时记录 $x_k^0(t)$ 的同时,也记录 $x_k^i(t)$ 的数值.而 M^{fd} 可以通过偏移轨迹 $x_k^i(t)$ 的各个分量与中心轨迹 $x_k^0(t)$ 的各个分量的最后偏差与初始偏差 δ_i 的比值求得

$$M_{ij}^{\text{fd}} = \frac{x_k^j - x_k^0}{\delta_i}, \quad (19)$$

其中 x_k^j 表示第 i 个轨迹演化后的第 j 个分量的数值. x_k^{0j} 表示中心轨迹演化后的第 j 个分量的数值.

在实际计算中,应注意初始偏差 δ_i 的选取,如果太大,则随指数变化的偏差将使偏移轨迹远离中心轨迹太大.如果太小,将会出现数值取整错误.一般地,体系坐标大小为个位数值时,初始偏差 δ_i 为

10^{-6} .

例如 DKP 体系例子,其经典哈密顿量

$$H' = \frac{1}{2}(z_3^2 + z_4^2) - \epsilon(z_1^2 + z_2^2) + \frac{1}{8}z_1^2 z_2^2(z_1^2 + z_2^2) \equiv 2,$$

这里 $(z_1, z_3), (z_2, z_4)$ 是两对共轭变量,所以自由度 $N = 2$.

共有 $2N$ 个哈密顿运动方程

$$\begin{aligned} \dot{z}_1 &= \frac{\partial H'}{\partial z_3} = z_3, \\ \dot{z}_3 &= -\frac{\partial H'}{\partial z_1} = 2\epsilon z_1 - \frac{1}{2}z_1^3 z_2^2 - \frac{1}{4}z_1 z_2^4, \\ \dot{z}_2 &= \frac{\partial H'}{\partial z_4} = z_4, \\ \dot{z}_4 &= -\frac{\partial H'}{\partial z_2} = 2\epsilon z_2 - \frac{1}{2}z_2^3 z_1^2 - \frac{1}{4}z_2 z_1^4. \end{aligned}$$

用 $x_k^0(t)$ 表示一条中心轨迹,其形式为 $(z_1, z_3, z_2, z_4) \equiv (z_1^0, z_3^0, z_2^0, z_4^0)$,上标 0 表示中心轨迹.选择 (z_1, z_3) 当 $(z_2 = 0, z_4 < 0)$ 时的截面为庞加莱截面.在 (z_1, z_3) 庞加莱截面上的 $2N$ ($\equiv 2N - 2$) 独立的方向上分别偏离中心轨迹很小的偏差 δ_1, δ_2 ,作为新的 2 个偏移轨迹 $x_k^1(t), x_k^2(t)$ 的初始点.则新的 2 个偏移轨迹的初始点的形式为

$$\begin{aligned} x_k^1(t) &(z_1^1, z_3^1, z_2^1, z_4^1) \equiv (z_1^0 + \delta_1, z_3^0, z_2^0, z_4^0), \\ x_k^2(t) &(z_1^2, z_3^2, z_2^2, z_4^2) \equiv (z_1^0, z_3^0 + \delta_2, z_2^0, z_4^0), \end{aligned}$$

它们随 $x_k^0(t) \equiv (z_1^0, z_3^0, z_2^0, z_4^0)$ 在同样的哈密顿运动方程下一起随时间演化,所以此时,需要进行积分运算的方程个数为 12 个 ($\equiv 2N(2N - 1)$).当它们第 n 次演化到 (z_1, z_3) 庞加莱截面上时,利用 (19) 式来计算 M_{ij}^{nl} , 则

$$M_{ij}^{nl} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_1^1 - z_1^0 & z_3^1 - z_3^0 \\ \delta_1 & \delta_1 \\ z_1^2 - z_1^0 & z_3^2 - z_3^0 \\ \delta_2 & \delta_2 \end{bmatrix}.$$

注意,此时的符号 $(z_i^j (i = 1, 3; j = 0, 1, 2))$ 上标 0 代表中心轨迹,1, 2 代表 2 个偏移轨迹,下标 i 表示的是分量,它们是随时间第 n 次演化到 (z_1, z_3) 庞加莱截面上后的点.此时,求得的周期轨迹是周期 n 轨迹.

在 (z_1, z_3) 庞加莱截面上(此时 $(z_2 = 0, z_4 < 0)$) 时 (18) 式中的初始点偏离周期轨迹的偏差 Δs_k 是

二维的,即 $\Delta s_k = \begin{bmatrix} \Delta z_1 \\ \Delta z_3 \end{bmatrix}$,我们给出一个初始点,即

$$(z_1, z_3, z_2, z_4)^0 \equiv (-0.088498, -0.261826, 0.000000, -1.981204).$$

表 1 最后 15 次迭代时 Δs_k 的值

Δz_1	Δz_3
-0.000008348453	0.000015510088
-0.000006069336	0.000009669605
-0.000004639234	0.000007752171
-0.000003479587	0.000007229123
-0.000002436987	0.000002268690
-0.000002099353	0.000002969187
-0.000001652672	0.000003294704
-0.000001178211	0.000001022371
-0.000001038705	0.000000211735
-0.000001019030	-0.00000082117
-0.000000990421	0.000004744260
-0.000000290747	0.000001690226
-0.00000040543	0.000000610456
0.000000050812	0.000000229112
0.000000086105	0.00000094896

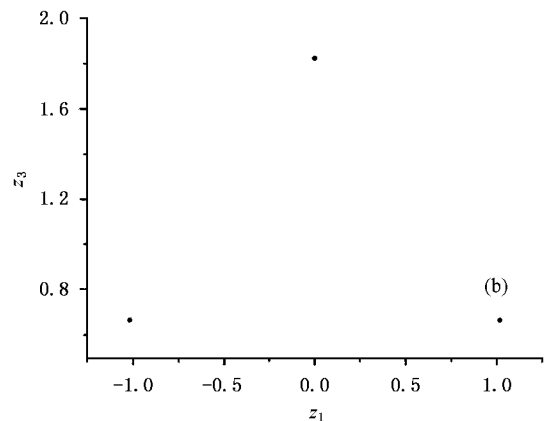
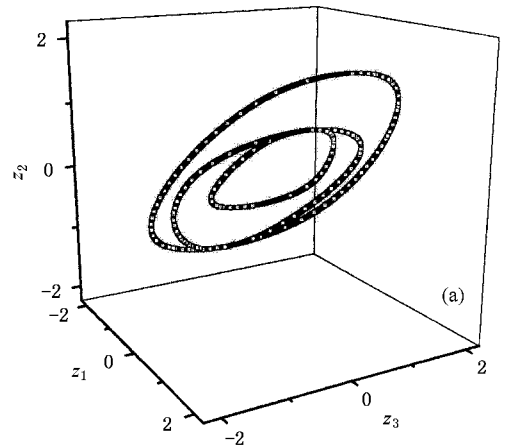


图 6 DKP 体系,在 $\epsilon = -0.4$ 时周期 3 轨迹 (a) 的三维相空间轨迹 (b) 在 (z_1, z_3) 庞加莱截面上(此时 $(z_2 = 0, z_4 < 0)$) 的截点

由上述改进的有限差方法,经过 62 次迭代,得到精度满足 $\|\Delta s_k\| \leq 0.0000001$ 的周期 3 轨迹 $((z_1, z_3, z_2, z_4)^3 \equiv (-1.018233232617, 0.664589608612, 0, -1.651932303904))$. 表 1 给出了最后 15 次迭代时 Δs_k 的值,从中可以看出该初始点是逐渐收敛到周期轨迹上的情况.

如图 (a) 所示是牛顿拉夫申方法求出的 DKP 体系的周期 3 轨迹的三维相空间轨迹以及在 (z_1, z_3) 庞加莱截面上(此时 $(z_2 = 0, z_4 < 0)$)的截面(如图 (b)).

5. 总 结

本文上述的三种不同的求周期轨迹的方法中,庞加莱截面方法比较直观,但是不能获得不稳定的周期点.而且,只适用于自由度比较低($N = 2, 3$)的近可积体系,同时,不能直接获得足够精度的周期轨迹位置坐标.线段迭代交点方法比较快捷,而且求得的周期点比较准确(要求初始线段非常致密),同时能够找到稳定的和不稳定的周期点.同样地,也只适用于自由度比较低($N = 2, 3$)的混沌体系.当体系的自由度较高($N > 3$),并且完全遍历时,便无法利用该方法求得周期轨迹.牛顿拉夫申方法是一个比较普遍的求取周期轨迹的方法,理论上可以适用于任意自由度的体系,同时,我们可以给定控制精度的参数,以寻找满足需要的精度的周期轨迹坐标.并且适用于完全遍历的混沌体系,这是该方法的重大优势所在.需要注意的是,该方法对初始点的要求比较高,即初始点尽可能在周期点收敛区域,如果初始点随机选取,则需要尝试更多的点.而且,由于计算需要长时间迭代,计算量较大.对于自由度较低的体系,如果对于周期轨迹的精度要求不高的情况下,没

有前两种方法快捷直观.

附录 庞加莱(Poincare)截面的数值计算中的一个技巧

这是一个由 Henon^[12]提出的计算动力学系统的庞加莱截面时使用的的一个很有效的小技巧,有利于更准确地确定庞加莱截面上的点的数值.

对于本文研究的哈密顿系统,需要确定 $q_- = \text{const}$ (const 是常数,多取为 0 时($p_- < 0$ 或 > 0))的庞加莱截面(q_+, p_+).而在数值计算中 $q_- = \text{const}$ 是不可能精确实现的.事实上,需要观察的是($q_- - \text{const}$)的数值改变正、负号时的情形:当发现 $[q_-(t_{j+1}) - \text{const}] \times [q_-(t_j) - \text{const}] < 0$ 时,利用以下方法可以得出最接近 $q_- = \text{const}$ 时(q_+, p_+)的数值,即以 $q_-(t_{j+1})$ 为一个独立变量对 $q_+(t_{j+1}), p_+(t_{j+1})$ 倒退回去,积分一次,如果能量守恒在控制精度范围内仍然满足,则所得的 q_+, p_+ 就是所需要的数值.具体步骤如下:

因为

$$dq_{\pm} / dt = \partial H_{\text{eff}} / \partial p_{\pm},$$

$$dp_{\pm} / dt = -\partial H_{\text{eff}} / \partial q_{\pm},$$

所以

$$\frac{dq_+}{dq_-} = \frac{\partial H_{\text{eff}} / \partial p_+}{\partial H_{\text{eff}} / \partial p_-},$$

$$\frac{dp_+}{dq_-} = -\frac{\partial H_{\text{eff}} / \partial q_+}{\partial H_{\text{eff}} / \partial p_-}.$$

于是可以得到

$$\frac{q_+^* - q_+(t_{j+1})}{q_-^* - q_-(t_{j+1})} = \frac{\partial H_{\text{eff}} / \partial p_+}{\partial H_{\text{eff}} / \partial p_-},$$

$$\frac{p_+^* - p_+(t_{j+1})}{q_-^* - q_-(t_{j+1})} = -\frac{\partial H_{\text{eff}} / \partial q_+}{\partial H_{\text{eff}} / \partial p_-}.$$

在这里将 q_-^* 取值为 $q_-^* = \text{const}$, 并代入以上算式,得到的 q_+^*, p_+^* 就是相应于 $q_- = \text{const}$ 时的庞加莱截面上的数值:

$$q_+^* = \frac{\partial H_{\text{eff}} / \partial p_+}{\partial H_{\text{eff}} / \partial p_-} [\text{const} - q_-(t_{j+1})] + q_+(t_{j+1}),$$

$$p_+^* = -\frac{\partial H_{\text{eff}} / \partial q_+}{\partial H_{\text{eff}} / \partial p_-} [\text{const} - q_-(t_{j+1})] + p_+(t_{j+1}).$$

这样对庞加莱截面取值,显然比直接用 $q_+(t_j)$ 和 $p_+(t_j)$, 或者用 $q_+(t_{j+1})$ 和 $p_+(t_{j+1})$ 作为截面上的数值要精确许多.

[1] Gutzwiller M C 1990 *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (New York: Springer-Verlag) p30
 [2] Wang P J and Wu G Z 2003 *Chem. Phys. Lett.* **375** 279
 [3] Farantos S C 1995 *J. Mol. Struct.* **341** 91
 [4] Baranger M, Davies K T R and Mahoney J H 1988 *Annals of Physics* **186** 95
 [5] Auerbach D 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2387
 [6] Gao J and Delos J B 1994 *Phys. Rev. A* **49** 869
 [7] Marcinek R and Pollak E 1994 *J. Chem. Phys.* **100** 5894

[8] Ott E 1992 *Chaos in Dynamical Systems* (Cambridge: Cambridge Univ. Press) p212—302
 [9] Henon M 1982 *Physica* **5D** 412
 [10] Wu G Z and Ding X 1996 *Chem. Phys. Lett.* **262** 421
 [11] Baggott J E, Caldwell G L and Mills I M 1988 *J. Chem. Soc. Faraday Trans. II* **84** 1407
 [12] Henon M 1983 *Numerical Exploration of Hamiltonian Systems* (North-Holland)
 [13] Delos J B, Knudson S K and Noid D W 1984 *Phys. Rev. A* **30** 1208

Methods of finding periodic orbit in chaotic systems^{*}

Wang Pei-Jie¹⁾ Wu Guo-Zhen²⁾

¹⁾Center for Advanced Study, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

²⁾Department of Physics, Key Laboratory of Atomic and Molecular Nanosciences, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 21 October 2004 ; revised manuscript received 22 November 2004)

Abstract

The dynamics of a chaotic system is full of chaotic orbits, especially for higher levels where resonances are strong enough to destroy most periodic and/or quasiperiodic trajectories. Though the remnant periodic orbits are scarce, they are not to be neglected because they form the invariant skeleton of the dynamical phase space. For instance, we can quantize a nonintegrable system by its periodic orbits, which implies the important role of periodic orbits. Therefore, the locating of periodic orbits becomes one of the key points in the study of the dynamics of chaotic systems. Based on explicit examples, we list three methods for locating the periodic orbits in this paper, and conclude that the Newton method is the optimal choice.

Keywords : periodic orbit, numerical algorithm, chaos

PACC : 0545, 0547

^{*} Project supported by the Natural Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 20373030 and 10347112).