

# 对初始方向使用优化方法计算异宿轨

陈子恒

May 7, 2018

## 1 目前可用于测试的样例

1. 一个简单的一维/二维问题，它们的 Hamilton 量分别是

$$H_1 = \frac{1}{2}p^2 + p(q - q^3)$$

$$H_2^{(L)} = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2} + p_1(q_1 - q_1^3) + p_2(q_2 - q_2^3) + [(q_2^2 - 1)q_1^2 - L(q_1^2 - 1)q_2^2]^2$$

对应的解析解分别为

$$(q, p) = (t, 2(t^3 - t)), t \in [-1, 0]$$

$$(q_1, q_2, p_1, p_2) = \left( t \sqrt{\frac{L}{1 + (L - 1)t^2}}, t, 2(q_1^3 - q_1), 2(t^3 - t) \right), t \in [-1, 0]$$

2. 二维问题，其 Hamilton 量为

$$H = A + \tilde{g}(q_2)^{-1}[A + b^{-1}(e^{p_1} - 1)][\tilde{f}(q_2) - A]$$

这里  $A = q_2(e^{-p_2} - 1) + \gamma q_1(e^{-p_1} - 1) + \gamma b q_1(e^{p_2} - 1)$ 。

根据问题的背景我们可以将这个问题做近似  $q_1 = \mathcal{O}(\gamma^{-1})$ ,  $p_1 = -\ln(1 + b - b e^{p_2})$ ，得到一维的简化问题

$$H_r = (z^{-1} - 1) \left\{ p_2 + \left[ p_2 + \frac{z}{b(z - 1) - 1} \right] \left[ \frac{\tilde{f}(p_2) - p_2(z^{-1} - 1)}{\tilde{g}(p_2)} \right] \right\}, z = e^{p_2}$$

3. 二维问题，其 Hamilton 量为

$$H = p_1 q_2 + p_2 \left[ \frac{1}{4} p_2 + f'(q_1) q_2 \right] - (q_2 - f(q_1))^2$$

这里  $f$  具有至少两个零点。

## 2 算法概述

算法实现如下：

```

Data: Hamilton 量  $H$  , 平衡点  $(q_1, p_1), (q_2, p_2)$ 
Result: 异宿轨解
while 搜索初始方向  $(u, v)$  do
    估算解的最大范围;
    以  $(q_1, p_1) + d(u, v)$  为初始点开始求解重参数化的 Hamilton 方程组;
    while 解的末端位置在边界范围内 do
        使用某种辛格式的数值格式积分一步;
        if 解的末端位置与另一个平衡点非常接近 then
            记录  $(u, v)$  为可以进一步优化的初始方向;
            停止搜索;
        end
    end
end
foreach 上一步记录的  $(u, v)$  do
    从  $(u, v)$  出发, 使用优化方法寻找使得解的末端与另一个平衡点最近
    的初始方向
end

```

**Algorithm 1:** 异宿轨的简单求解算法

我们逐个考虑上述算法的具体实现。

### 2.1 初始方向的可能集合

考虑重参数化后的轨线  $(q, p) = (q(s), p(s))$  在  $s \rightarrow \{0, 1\}$  的行为。

假定  $\lim_{s \rightarrow 0} \frac{q(s) - q(0)}{p(s) - p(0)}$  与  $\lim_{s \rightarrow 1} \frac{q(s) - q(1)}{p(s) - p(1)}$  存在。令  $\delta q(s) = q(s) - q(0), \delta p(s) = p(s) - p(0)$ , 由于

$$\begin{aligned}
 \delta \dot{q}(s) &= \dot{q}(s) \frac{dt}{ds} = H_p(s) \frac{dt}{ds} \\
 &= (H_p(0) + H_{pp}\delta p(s) + H_{pq}\delta q(s) + \mathcal{O}(s^2)) \frac{dt}{ds} \\
 &= (H_{pp}\delta p(s) + H_{pq}\delta q(s)) \frac{dt}{ds} + \mathcal{O}(s^2) \\
 \delta \dot{p}(s) &= -(H_{qp}\delta p(s) + H_{qq}\delta q(s)) \frac{dt}{ds} + \mathcal{O}(s^2)
 \end{aligned}$$

于是  $\lim_{s \rightarrow 0} \mathbf{normal}(\delta q(s), \delta p(s)) = (u, v)$  是如下特征值问题的解：

$$\lambda \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = L_H(0) \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}, L_H = \begin{bmatrix} \partial_{pq} & \partial_{pp} \\ -\partial_{qq} & -\partial_{qp} \end{bmatrix} H$$

这里  $\mathbf{normal}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}$ 。

如果  $L_H$  是可对角化的, 那么  $\lim_{s \rightarrow 0} (\delta q(s), \delta p(s))$  应当落在  $L_H(0)$  的最大特征

值对应的特征子空间，而  $\lim_{s \rightarrow 1}(\delta q(1), \delta p(1))$  应当落在  $L_H(1)$  的最小特征值（此时应是负的）对应的特征子空间。

## 2.2 初始方向的搜索

考虑如果这个 Hamilton 系统是  $(q, p)$  各一维的，那么  $L_H$  仅有一个正特征值和一个负特征值，于是  $(u, v)$  没有其他的选择，至多差一个正负号。

如果这个系统是  $(q, p)$  各两维的，那么可能会出现如下的三种情况：

1.  $L_H$  有两个不相等的正特征根，于是  $(u, v)$  应取为  $L_H(0)$  的最大特征值对应的特征向量。
2.  $L_H$  有两个相等的正特征根，对应的特征向量为  $w_1$  与  $w_2$ ，于是  $(u, v)$  应取为  $\sin(\varphi)w_1 + \cos(\varphi)w_2$ 。
3.  $L_H$  有一个正特征根，两个共轭的纯虚根，???

我们着力考察上述的第二种情况。由于我们对于平衡点和  $H$  的性质没有太多的假设，我们必须对  $\varphi \in [0, 2\pi)$  做大范围的搜索，确定可能的  $\varphi$  的取值范围后才能使用优化策略求解。这里的搜索是做等分的细网格。

## 2.3 辛格式的选取

由于这是一个 Hamilton 系统，因此如果简单地使用一阶算法，通常不能够保证 Hamilton 量的守恒性质。这里插一张一阶前向的 **H** 图基于此，我们需要使用具有保能量性质的数值格式。这里我们有两种选择：

1. 带预估修正的一阶 **Euler** 格式。
2. 隐式二阶 **Runge-Kutta** 格式。

然而由于这些格式都是隐式的，所以我们需要进行一些简单的迭代步骤获得它们的中间解。步骤如下：

**Data:** 初始点  $x$  与步长  $h$

**Result:** 更新点  $x^*$

wawa

**Algorithm 2:** 带预估修正的一阶 Euler 格式的数值实现

**Data:** 初始点  $x$  与步长  $h$

**Result:** 更新点  $x^*$

blbla

**Algorithm 3:** 隐式二阶 Runge-Kutta 格式的数值实现

## 2.4 解的终止条件

与简单的打靶法不同，在搜索过程中我们并不知道轨线的总长度，因此必须采取其他的方法确定轨线是否已经到另一个平衡点  $(q_r, p_r)$  附近。这里我们有如下几种可能的终止条件：

- 距离充分接近。即当  $|(q_i, p_i) - (q_r, p_r)| < \epsilon$  时认为轨线已经到达右边的平衡点。
- 与右端点在目标子空间上的投影分量足够接近 **1**。

## 2.5 初始方向的优化方法

由于从初始方向到轨线最终的残差的映射是一个流映射，因此我们几乎无法求得这个流映射的梯度，只能够使用一维的二分法或者三分法进行估算。

## 3 数值结果

### 3.1 非平凡解的存在性问题

### 3.2 辛格式的精度

### 3.3 数值格式步长的选取