对初始方向使用优化方法计算异宿轨

陈子恒

April 8, 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

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

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

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 $q_1 = \mathcal{O}(\gamma^{-1}), p_1 = -\ln(1 + b - be^{p_2})$ ，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 $s \to \{0, 1\}$ 的行为。
假定 $\lim_{s\to 0}\dfrac{q(s)-q(0)}{p(s)-p(0)}$ 与 $\lim_{s\to 1}\dfrac{q(s)-q(1)}{p(s)-p(1)}$ 存在。令 $\delta q(s) = q(s) - q(0), \delta p(s) = p(s) - p(0)$，由于

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

于是 $\lim_{s\to 0}\mathbf{normal}(\delta q(s), \delta p(s)) = (u, v)$ 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 $\mathbf{normal}(\mathbf{x}) = \dfrac{\mathbf{x}}{||\mathbf{x}||}$ 。
如果 L_H 是可对角化的，那么 $\lim_{s\to 0}(\delta q(s), \delta p(s))$ 应当落在 $L_H(0)$ 的最大特征

值对应的特征子空间，而 $\lim_{s\to 1}(\delta q(1), \delta p(1))$ 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 φ 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. 带预估矫正的一阶 **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: 带预估矫正的一阶 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