

- [8] G. Chen, X. Dong, *IEEE Trans. Circuit Syst.*, **40** (1993), 591.
- [9] S. Rajaseker, M. Lakshmanan, *Int. J. Bifur. Chaos*, **2** (1992), 201.
- [10] B. Peng, V. Petrov, K. Showalter, *J. Phys. Chem.*, **95** (1991), 4957.
- [11] H. Gang, H. Kaifen, *Phys. Rev. Lett.*, **71**(1993), 3794.
- [12] W. L. Ditto, S. N. Raueo, M. L. Spano, *Phys. Rev. Lett.*, **65**(1990), 3211.
- [13] E. R. Hunt, *Phys. Rev. Lett.*, **67**(1991)1953.
- [14] T. L. Carrol, I. Triandaf, I. Schwartz et al., *Phys. Rev. A*, **46**(1992), 6159.
- [15] R. Roy, T. W. Murphy, T. D. Maier et al., *Phys. Rev. Lett.*, **68**(1992), 1259.
- [16] Y. Wang, S. Singer, H. H. Bau, *J. Fluid Mech.* **237** (1992), 479.
- [17] A. Azevedo, S. M. Rezende, *Phys. Rev. Lett.*, **66**(1991), 1342.
- [18] V. Petrov, M. J. Crowley, K. Showalter, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 2955.
- [19] A. Garfinkel, M. L. Spano, W. L. Ditto et al., *Science*, **257**(1992), 1230.
- [20] S. J. Schiff, K. Jerger, D. H. Duong et al., *Nature*, **370** (1994), 615.

## 混沌和李雅谱诺夫特征指数\*

李尧亭 蔡诗东

(中国科学院物理研究所, 北京 100080)

**摘要** 混沌现象是非线性学科中的重要课题之一. 文章深入浅出地介绍了李雅谱诺夫特征指数和混沌系统的关系以及如何计算李雅谱诺夫特征指数, 强调了李雅谱诺夫特征指数在判断混沌系统过程中的重要性, 同时, 还简单介绍了李雅谱诺夫特征指数与容量维数之间的关系.

**关键词** 混沌, 李雅谱诺夫特征指数, 测度熵, 分数维

### 1 混沌和混沌状态的判断

非线性科学(nonlinear science)是当今科技界非常活跃的学科之一, 非线性现象在许多领域受到越来越多的科学工作者的关注, 这种复杂的运动现象引起了人们的浓厚兴趣. 在众多的非线性现象中, 混沌(chaos)运动显得尤其突出, 也是人们研究较多的几个非线性运动现象之一. 有人又认为奇异吸引子(strange attractor)就是混沌, 但是也有人不同意这一观点, 为了区别于其他类型的平凡吸引子, 本文暂采用混沌吸引子的说法. 在混沌这个领域中, 洛伦兹(Lorentz)<sup>[1]</sup>最早以混沌吸引子为依据, 提出了大气运动的长期不可预测性, 这是洛伦兹对混沌运动研究的最大贡献, 他的这个贡献引发了混沌运动研究这一新兴学科. 到目前为止, 许多学科都发现具有混沌性质的这一现象.

混沌运动, 是在确定论基础上产生的与随

机运动有相似方面的复杂现象, 混沌运动现象的发现正逐步改变着我们对自然的看法, 通过剖析、研究复杂运动方式, 迫使人类用更高、更深的观点面对我们生存的这个世界. 拉普拉斯(Laplace)那种‘只要给我初始条件, 我就可以决定未来一切’的时代已经过去.

混沌运动是一种高级的复杂运动形式, 它的最重要的特点就是对初值的高度敏感性. 初值的微小差别将导致系统状态的巨大差异, 可以用下面的比喻说明这个意思: 如果在欧洲的一个蝴蝶煽动了一下翅膀, 这个微小的扰动能决定数天或数小时后出现在我们头顶的是蓝天白云, 还是狂风暴雨. 这就是洛伦兹模型所要说明的事情. 混沌运动受确定性系统规律的制约, 它既不同于布朗运动的随机涨落, 也不同于有规律的定轨线运动.

混沌是耗散和非线性相互作用的结果, 由

\* 1994年11月30日收到初稿, 1995年3月25日收到修改稿.

于耗散的作用,混沌系统在整体上和大范围内表现为稳定和相体积的收缩,而非线性作用的结果使轨道局部不稳定,这种不稳定性又使轨道局部分离,整体的稳定和局部的不稳定形成了混沌运动的奇异行为,表现出复杂的运动形态.混沌运动具有无穷层次的自相似结构.由于二维混沌系统必然引起相轨道相交,而二维自治系统非奇点邻近轨道的拓扑结构不能相交,所以,通常认为自治系统出现混沌的最少维数是三维.

目前,一方面,对混沌运动现象的研究正在逐渐增强,越来越多的人在这一领域进行着探索和研究.另一方面,混沌运动的研究依然存在有不少问题,有待我们努力解决.

如何判断一个给定系统是否处于混沌运动状态,是非线性研究的重要问题之一.同样,如何从数值上证实混沌状态也是数值研究的重点内容,对于大量的数据必须要用特征指数来说明系统的状态,如果仅仅从演化时间序列或相空间图的不规则形态直观判断一系统是否混沌是不科学的,也没有足够的说服力.众所周知,目前有几个常用的判断混沌状态的方法,它们分别是:(1)李雅谱诺夫指数(Lyapunov exponent)<sup>[2-8]</sup>;(2)分维数(fractal dimension)<sup>[2-5,8]</sup>;(3)功率谱(power spectrum)<sup>[3,7]</sup>;(4)邦加莱截面(Poincare map)<sup>[2-8]</sup>;(5)测度熵(metric entropy)<sup>[3-5,7,8]</sup>;(6)蝴蝶效应(butterfly effect).上述方法中,李雅谱诺夫指数、分维数和测度熵是定量化表示,具有其独特的优点,而其中的测度熵和容量维数又可通过李雅谱诺夫指数得到,在后面将作一点介绍.功率谱是傅里叶变换后功率随频率变化的谱线,混沌系统的功率谱应该是连续的和变化的.邦加莱截面是相空间的某个截面,相轨线每穿过截面一次,就在该截面上留下一个点.对混沌系统而言,这些点之间具有分形结构,不能够填满整个截面.蝴蝶效应是混沌系统时间序列的比较,两个很相近的初值,在较短时间之后的演化结果会有很大的差异,它形象地反映了混沌系统对初值的敏感性,但是,这几种

方法只能从图形上作直观判断,使用当中很难掌握一个明确的标准,在实际工作中有一定困难,尤其对初接触混沌研究的人比较难掌握其准确尺度.因而,李雅谱诺夫指数和分维数在某种意义上讲对判别混沌系统是有严格性的.这里简要介绍一下李雅谱诺夫指数在判别混沌系统时的应用.

## 2 李雅谱诺夫特征指数

李雅谱诺夫特征指数(简称  $LE$ )的早期应用可追溯到 1959 年 L. Cesari<sup>[9]</sup>的工作,1968 年  $LE$  被 Oseledec<sup>[10]</sup>正式使用在动力系统和各态历经理论的研究中.1964 年 Henon 和 Heiles<sup>[11]</sup>首次在研究混沌系统的相空间相邻轨道的发散时,引入了  $LE$  的数值计算,在以后的文献<sup>[12-14]</sup>中有大量关于  $LE$  的使用、探讨和研究,在当今非线性问题的研究中  $LE$  指数得到了越来越多的应用.

混沌运动的相轨线具有类随机运动的特点,初始时刻靠得很近的两条轨线,随着时间的增长将按指数规律发散,如果我们能够定量刻画描述这种近邻轨道的发散性,那就意味着能够给混沌运动一个确切的量化的定义.

李雅谱诺夫特征指数就是表示相空间近邻轨道的平均指数发散率的定量化指数.为了便于理解,我们用下面的一个例子来形象地说明这个问题:假定有一城市的两辆汽车同时沿着两条永不相交的公路出发,一定时间之后两辆汽车之间的距离将越来越远,这两条公路就相当于两条相邻的轨线,两辆汽车相当于我们考察的点,所不同的是,两辆汽车之间的距离由两条公路之间的距离确定,而我们考察的两点之间的距离由相轨线之间的距离确定,两条公路之间的距离一般没有固定的规律,但相轨线之间的距离是按指数规律增加的,这个指数增长率就是李雅谱诺夫特征指数.这里需要说明的是上面举的例子仅是为了便于读者理解,实际的混沌运动空间必须大于二维,其轨道变化远比两条公路复杂得多, $n(n>2)$ 维空间中的某一

时刻,两条相邻的轨线之间的距离可以分解在  $n$  个不同的方向(这  $n$  个方向是按轨线定义的)上,这  $n$  个不同的方向上的距离增长率是不同的,每个增长率就是一个  $LE$  特征指数,这  $n$  个指数可以取不同的值,既可以大于零,也可以小于或等于零.对于混沌系统,至少有一个  $LE$  指数必须大于零( $LE > 0$ ),这是区分混沌吸引子与其他吸引子的主要特征.下面具体介绍  $N$  维自洽系统中  $LE$  指数的计算方法.

对  $N$  维自洽动力系统

$$\frac{dX_i}{dt} = V_i(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (1)$$

而言,选两条起始点相近的轨线  $L_1, L_2$ ,起始点分别为  $x_0, x_0 + W$ ,以  $x_0$  为初始值的轨线我们称为基准轨线,以  $x_0 + W$  为初始值的轨线我们叫做近邻轨线.这样取的矢量  $W(x_0, t)$  将和欧几里德范数  $\|W\|$  一起随时间演化.  $W$  随时间的演化可以由(1)式来确定,正象前面讲的那样,  $W$  将在  $N$  个方向上按各自不同指数规律变化,则两个相邻轨道的平均指数发散率为

$$LE(x_0, W) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|W\|}{\|W_0\|}, \quad (2)$$

式中  $W_0 = W(x_0, 0)$ .  $W$  空间称为切空间,它是(1)式线性化量,因而  $W$  必需足够小,以满足线性化的要求,在实际计算中应当注意这一点.对于任意  $W$ ,存在  $N$  维基底  $\{e_i, i=1, \dots, N\}$ ,由于  $W$  空间的  $N$  维基底随  $W$  的演化而改变,所以  $LE_i$  定义的方向也随  $W$  的演化而转动,这一具有普遍意义的描述较难理解,因为大家通常习惯于在固定的直角坐标系中研究问题,为简单起见,可以把  $N$  维系统看成三维系统,就容易理解多了,也更易于想象.这时,  $N$  维基底变成三维,由该基底构成的坐标系随着轨线上考察点的移动而变化.换句话说,  $W$  的坐标系是随轨线变化的坐标系,是一个运动坐标系.  $LE$  在每个基底  $e_i$  上都有一个分量值  $LE_i$ ,所以  $N$  维系统有  $N$  个  $LE$  指数,正的  $LE$  表示该方向上的发散,负的  $LE$  表示该方向上的收缩,我们可以把这些指数 ( $LE_i$ ) 按大小次序排列为

$$LE_1 \geq LE_2 \geq \dots \geq LE_N. \quad (3)$$

这里需要说明的是,近邻轨道的要求必须保证  $\|W\|$  足够小.我们可以直观看出,由于相邻轨道将按指数分离,所以  $\|W\|$  将随着时间的演化会逐渐增大,相邻轨道会远离基准轨道,足够长时间后的  $W$  不能再由(1)式来确定,因而在实际计算时,如果  $W$  偏离了基准轨道太远,应当重新设定  $W$ ,使  $\|W\|$  足够小,这样才能保证计算的正确性.

### 3 最大李雅谱诺夫特征指数的计算

正像上节提到的那样,  $N$  维系统有  $N$  个  $LE$  指数,正的  $LE$  是表示系统处于混沌运动状态的重要判据,一个系统只要有一个正的  $LE$ ,我们就可以认为该系统是作混沌运动.基于这个原因,在识别混沌系统的实际应用中,往往不需要计算出系统所有的  $LE$  值,通常只要知道最大的  $LE$  值就可以达到识别系统是否是混沌运动的目的,这样可以大大减少计算量.实际上,前面用范数定义的  $LE$  就是最大的  $LE$ ,下面我们讨论一下这个问题.

首先,将  $W_0$  在  $N$  维基底  $\{e_i, i=1, \dots, N\}$  上展开,得到

$$W_0 = \sum_{i=1}^N c_i e_i. \quad (4)$$

$W$  将在  $N$  维空间按指数  $LE_i$  增长或减小,  $\|W\|$  为

$$\|W\| = \left\| \sum_{i=1}^N c_i e_i e^{LE_i t} \right\|. \quad (5)$$

在  $LE_i > 0$  的方向上,相邻轨道将逐渐与基准轨道分离,但每个方向上的分离速度不同,正是因为这个原因,  $W$  在最大的  $LE (LE_1)$  方向上增长,最终远大于其余分量的增长.这样一来,按(2)式定义的李雅谱诺夫特征指数将趋于  $LE_1$ ,把(4)、(5)式代入(2)式,就可以得到这个结果.

正如前面讲到的,为了保证轨道的近邻要求,在通常的计算中,每一步都重新取一个  $W$ ,这样就可以把发散的轨道拉回来,从而保  
物理

证了 $\|W\|$ 足够小.

下面介绍计算中的具体做法,首先需要说明的是下面介绍的算法的主要目的是为了保证 $W$ 能由(1)式的线性化所确定,从而使 $\|W\|$ 足够小,换句话说,也就是计算邻近轨线相对于基准轨线的发散率.同时,计算中所得到的 $LE_1$ 也可理解成对基准轨线上各点发散率的统计平均.为了简单起见,如第二节那样取两条相近轨道 $L_1$ 和 $L_2$ ,超始值分别为 $x_0$ 和 $y_0$ ,两起始点之间的距离 $d_0 = |x_0 - y_0|$ , $x_0$ 和 $y_0$ 将沿各自的轨道 $L_1, L_2$ 运动,经过时间 $\Delta t$ 之后,分别运动到 $x_1$ 和 $y_1$ 点,这时距离为 $d_1 = |x_1 - y_1|$ ,在 $x_1$ 到 $y_1$ 之间取一点 $y'_1$ ,并使其满足 $d_0 = |x_1 - y'_1|$ , $x_1$ 和 $y'_1$ 分别在轨道 $L_1$ 和 $L_2$ 上,再以 $x_1$ 和 $y'_1$ 为起始点,再经过时间 $\Delta t$ 之后,分别运动到 $x_2$ 和 $y_2$ 点,这时距离为 $d_2 = |x_2 - y_2|$ ,如此循环下去,经过 $m$ 个 $\Delta t$ 后得到 $m$ 个 $d_i$  ( $i=1, 2, \dots, m$ ),其中 $d_i = |y_i - x_i|$ .只要保证 $m$ 足够大,就可以用下面的公式计算出最大的 $LE_1$ ,即

$$LE_1 = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m\Delta t} \sum_{i=1}^m \ln \frac{d_i}{d_0}, \quad (6)$$

式中 $\Delta t$ 是积分步长,为了便于理解,可以参看图1.

从上述计算过程中可以看出, $LE_1$ 的获得

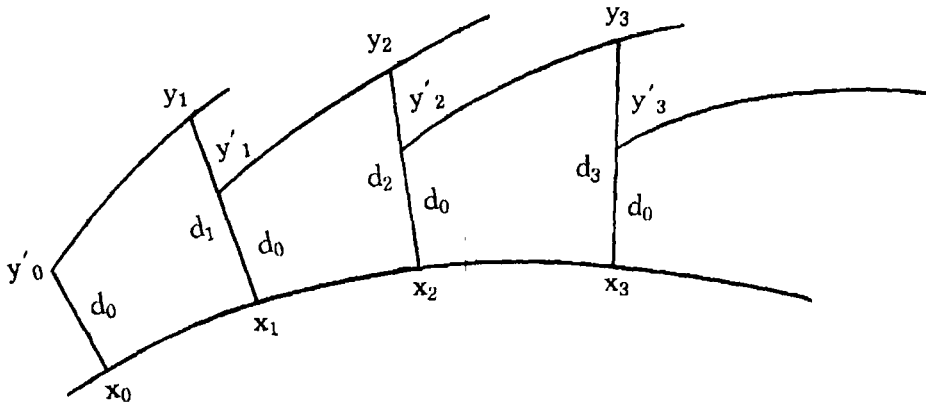


图1 李雅谱诺夫特征指数的计算示意图

容量维与李雅谱诺夫特征指数被认为具有下列关系:

是轨道各处指数发散率的统计平均,统计的要求使我们必需具备足够的信息量,因此实际计算中上述变换的次数 $m$ 也必需相当大.

#### 4 李雅谱诺夫特征指数和容量维的关系

维数是一个重要的几何特征量.混沌系统的轨道发散性,使系统的相轨线不能填满整个相空间,所以它的维数小于系统的真实维数.因此,混沌吸引子具有非整数维数.维数的定义有许多种类.例如,容量维数、关联维数、信息维数和相似维数等等.理论上讲,混沌吸引子具有无穷层次自相似结构,这种自相似的几何结构是一种离散的结构,可以用维数来刻画它的离散程度.相轨道的自相似结构使其不能填满整个相空间,形成混沌系统特有的分形结构,这种分形结构具有分数维数的特征,因而分数维数也是判别混沌运动的有效工具.容量维数又称为hausdorff维数,是一种有较简单释义的维数.用一边长为 $\epsilon$ 的 $N$ 维立方体去测量给定的空间,所测得的立方体个数为 $L(\epsilon)$ ,则容量维定义是

$$D_c = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln L(\epsilon)}{\ln 1/\epsilon}. \quad (7)$$

$$D_c = j + \sum_{i=1}^j \frac{LE_i}{-LE_i + 1}, \quad (8)$$

式中  $j$  满足下列条件:

$$LE_1 \geq LE_2 \geq \dots \geq LE_j \geq 0 \\ \geq LE_{j+1} \geq \dots \geq LE_N. \quad (9)$$

如果上式包含等于零的  $LE$ , 则  $j$  中还应该加上这些等于零的  $LE$  的个数.

### 参 考 文 献

- [1] E. N. Lorenz, *J. Atmos. Sci.*, **20**(1963), 130.  
 [2] T. Kapitaniak, *Chaos in Systems with Noise*, World Scientific, Singapore, (1990).  
 [3] M. Marek, I. Schreiber, *Chaotic Behaviour of Deterministic Dissipative Systems*, Cambridge University Press, (1991).  
 [4] A. V. Holden (ed), *Chaos*, Manchester University Press, (1986).  
 [5] S. N. Rasband, *Chaotic Dynamics of Nonlinear Systems*, eds. John Wiley & Sons, New York, (1990).  
 [6] E. Infeld, G. Rowlands, *Nonlinear Waves, Solitons and Chaos*, Cambridge University Press, (1990).  
 [7] A. J. Lichtenberg, M. A. Lieberman, *Regular and Stochastic Motion*, Springer-Verlag, New York, (1983).  
 [8] R. Z. Sagdeev, D. A. Usikov, G. M. Zaslavsky, *Nonlinear Physics, From the Pendulum to Turbulence and Chaos*, Harwood Academic Publishers, (1988).  
 [9] L. Cesari, *Asymptotic Behaviour and Stability Problems in Ordinary Differential Equations*, Springer, (1959).  
 [10] V. L. Oseledec, *Trans. Moscow Soc.*, **19**(1968), 197.  
 [11] M. Henon and C. Heiles, *Astron. J.*, **69**(1964), 73.  
 [12] B. V. Chirikov, *Phys. Reports*, **52**(1979), 263.  
 [13] J. Ford, *The Statistical Mechanics of Classical Analytic Dynamics*, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics*, North-Holland, Amsterdam, (1985).  
 [14] A. Wolf, *Quantifying Chaos with Lyapunov Exponents*, in *Chaos*, ed. A. V. Holden, MUP, Manchester, (1986).

## $I_h$ 点群及其在分子振动谱分析中的应用\*

姜宗福 杨丽佳

(国防科技大学应用物理系, 长沙 410073)

**摘 要** 系统介绍了  $I_h$  点群的对称操作、类和不可约特征标表, 给出了  $I_h$  群及其主要子群的相  
关系表. 应用  $I_h$  群对  $H_{13}$ ,  $C_{20}H_{20}$  和  $C_{60}$  分子振动谱的红外活性和拉曼活性进行了分析.

**关键词**  $I_h$  群, 振动谱分析, 原子团簇

在三维欧拉空间的有限点群中,  $I_h$  群是具有最高对称性的群. 它有120个对称操作, 其中包含了6个五度轴. 由于在晶体点群中不存在五度轴, 所以它没有  $I_h$  群. 而在分子物理中除了极少数分子 ( $B_{12}H_{12}^{-2}$  和  $C_{20}H_{20}^{[1-2]}$ ) 之外, 一般分子都不具有  $I_h$  对称性. 所以在一般有关群论在物理化学中应用的著作中很少介绍到  $I_h$  群. 自从准晶被发现, 特别是近年来在团簇物理研究中发现许多原子团簇, 如其典型代表  $C_{60}^{[3]}$ , 具有  $I_h$  群对称性之后<sup>[4,5]</sup>, 人们开始越来越关注  $I_h$  群的应用<sup>[6]</sup>.

本文将对  $I_h$  群的操作元、类的构造及特征标表作系统的介绍. 应用  $I_h$  群对  $H_{13}$ ,  $C_{20}H_{20}$  和

$C_{60}$  等具有代表性的原子团簇的振动谱进行分析.

### 1 $I_h$ 点群

$I_h$  群可以是 1 个由正五边形构成的正十二面体群, 或是由正三角形构成的正二十面体群. 正二十面体有12个顶点, 20个正三角面, 30个棱. 每一对顶点的连线为 1 个五度轴  $C_5$ , 共有6个五度轴, 产生24个  $C_5^k$  ( $k=1, 2, 3, 4$ ) 操作元; 每一对三角形的中心连线为 1 个三度轴

\* 1995年1月23日收到初稿, 1995年5月2日收到修改稿.