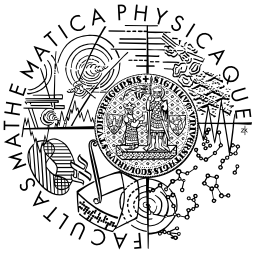


MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ FAKULTA
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Jakub Novotný

Řád a chaos v jednoduchém modelu molekulárních vibrací

Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: FOF

Praha 2020

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V ..... dne ....

Podpis autora

Za odborné vedení mé bakalářské práce, všestrannou pomoc, velikou ochotu a podnětné rady a připomínky děkuji vedoucímu Mgr. Pavlu Stránskému, Ph.D.

Název práce: Řád a chaos v jednoduchém modelu molekulárních vibrací

Autor: Jakub Novotný

Katedra: Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D., Ústav částicové a jaderné fyziky

Abstrakt:

Tato práce se připojuje k usilovnému hledání propojení mezi klasickým a kvantovým chaosem. Zabývá se analýzou klasického chaosu v klasické limitě kvantového modelu jednoduchých molekulových vibrací, sestaveného na základě dynamických symetrií algebry u(3). Pro tento model adaptuje metody pro studium projevů klasického chaosu (Lyapunovův exponent, Poincarého řezy, podíl chaotického objemu ve fázovém prostoru). Práce ukazuje, že chaotičnost modelu netriviálně závisí na síle vnějšího pole i na energii systému, a připravuje půdu pro porovnání s kvantovými indikátory chaosu.

Klíčová slova: klasický chaos, vibrace molekul, vibronový model, algebra $u(3)$, algebraický model, klasická limita, Lyapunovův exponent, Poincarého řez

Title: Order and chaos in a simple model of molecular vibrations

Author: Jakub Novotný

Department: Institute of Particle and Nuclear Physics

Supervisor: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D., Institute of Particle and Nuclear Physics

Abstract:

In this work we join the struggle to find a connection between classical and quantum chaos. We study the classical chaos in the classical limit of a simple algebraic model of molecular vibrations, based on the dynamical symmetry of u(3) algebra. We employ several methods for the classical chaos analysis, namely the Lyapunov exponents, the Poincaré sections, and the chaotic fraction of the classical phase space. It is shown that the chaoticity of the model depends nontrivially both on the strength of the external field and on the energy of the system. This work prepares the ground for a future comparison of classical and quantum chaos indicators.

Keywords: classical chaos, molecular vibrations, vibron model, $u(3)$ algebra, algebraic model, classical limit, Lyapunov exponent, Poincaré section

Obsah

Úvod **2**

1 Teorie **4**
1.1 Algebraická teorie molekul 4
1.1.1 Mnohočásticové systémy 4
1.1.2 Grupy a algebry 5
1.1.3 Algebraický model 7
1.1.4 Vibronový model 8
1.1.5 Klasická limita 10
1.2 Klasický chaos 12
1.2.1 Hamiltonovské systémy 13
1.2.2 Definice chaosu 15
1.2.3 Lyapunovův exponent 16
1.2.4 Výpočet maximálního Lyapunovova exponentu 19
1.2.5 Poincarého řez 20

2 Studium modelu **22**
2.1 Provedení klasické limity 22
2.2 Numerické techniky 23
2.2.1 Numerický výpočet Lyapunovova exponentu 23
2.2.2 Provedení Poincarého řezu 27
2.3 Struktura fázového prostoru 27
2.4 Určení chaotičnosti nadplochy fázového prostoru 35
2.4.1 Popis metody 36
2.4.2 Diskuze metody 39
2.4.3 Numerické výsledky 44

Závěr **49**

Seznam použité literatury **50**

Seznam obrázků **52**

Seznam tabulek **56**

Úvod

Řád a chaos jsou v běžné řeči protiklady. Řád evokuje představu existence jasných pravidel, která pak udávají chování systému. Chaos naopak představuje zdánlivě náhodné chování, které nejsme schopni předvídat. Matematická teorie chaosu však přináší na první pohled neintuitivní závěr. I jednoduché pravidlo může definovat složité chování, které je navíc velmi citlivé na změnu počátečních podmínek, což způsobuje praktickou nemožnost předpovědí na dlouhé časy. Představa, že znalost pravidla, které určuje chování, implikuje možnost předpovědí, se zhroutila už při studiu jednoduchých diferenciálních a diferenčních rovnic. Jejich řešení, která nebyla analytická, vykazovala velkou nestabilitu. Ukázalo se, že této jejich vady na matematické kráse se nelze zbavit ani libovolně velkou přesností provedení výpočtu (Tabor, 1989). Bylo proto nutné se smířit s existencí nové třídy chování, které je sice přesně definované, ale přesto neintuitivní, nepředvídatelné. Takové, které si zaslouží označení *chaotické*.

Chaos je nyní matematickou disciplínou a jeho projevy lze studovat nejen ve fyzikálních systémech, ale také v biologii nebo ekonomii. Citlivost na změnu počátečních podmínek hamiltonovských systémů byla studována již v 19. století. Henri Poincaré naráží při studiu problému tří těles na nestabilitu jeho řešení, která se ukazuje být jeho fundamentální vlastností. Dochází tak k narušení představy, že přibližná znalost přítomnosti vede na přibližnou znalost budoucnosti. Chaos v klasických mechanických systémech však začal být studován až v polovině minulého století v souvislosti s velkou složitostí modelů počasí (Lorenz, 1962). Od té doby došlo k jasné definici klasického chaosu a rozvoji metod pro jeho studium. V posledních desetiletích jsou projevy chaosu hledány i v kvantových systémech. Linearita kvantové mechaniky a unitarita časové evoluce způsobují, že vzdalování dvou blízkých stavů nezávisí na čase. Kvantové systémy by tak neměly být citlivé na změnu počátečních podmínek. Ukazuje se však, že chaos se v kvantové mechanice projevuje jen jinými způsoby (např. různá rozdělení hladin). Snahou je tak nejen lépe pochopit kvantový chaos, ale také najít jeho spojení s tím klasickým. K tomu je zapotřebí studovat systémy, které lze popsat kvantově i v klasické limitě.

Jedním z těchto systémů je jednoduchý model molekulových vibrací. Jedná se o kvantový model, který vykazuje zajímavé jevy, jakým je například kvantový fázový přechod. Tento model byl prezentován v práci (Iachello a Oss, 1996). Je to algebraický model s dvěma stupni volnosti, který je učen na základě požadovaných symetrií pomocí teorie Lieových grup a algeber. Využitím symetrií algebry $u(3)$ se výrazně zjednodušuje popis jevů. Vibrace molekuly tak nepopisujeme pomocí pohybů jednotlivých částic, ale pomocí excitací systému jako celku. Tento jednoduchý model je také schopný popsat tzv. „bending“ vibrace molekuly vody ((Larese a kol., 2013)).

Zásadní výhoda tohoto algebraického modelu spočívá v tom, že jeho kvantová verze „žije“ na konečném Hilbertově prostoru (to souvisí s omezeným fázovým prostorem klasické verze). Tato skutečnost výrazně zjednodušuje kvantové výpočty (například určení energetického spektra).

Studiem spektra modelu molekulových vibrací nebo korelací veličin v různých časech můžeme studovat projevy kvantového chaosu. Nabízí se proto provést klasickou limitu, a získat tak hamiltonovský systém, pro který máme dostatečné množství nástrojů na detailní prostudování klasického chaosu. Pak bude možné využít těchto výsledků a porovnat chování indikátorů kvantového chaosu s projevy klasického, což by mohlo přinést nová spojení mezi těmito dvěma obrazy přírody.

1. Teorie

Chystáme se studovat algebraický model jednoduchých molekulových vibrací. V této části proto nejprve zavedeme formalismus popisu mnohočásticových systémů v kvantové mechanice. Poté se podíváme na algebraickou teorii molekul, která pomocí teorie Lieových grup a algeber představuje nástroj k sestavení jednoduchých mnohočásticových systémů a pomocí které byl vytvořen i námi studovaný model. Pole kvantové mechaniky pak opustíme návodem na provedení klasické limity algebraických modelů. Následně vneseme do této práce *chaos* a ukážeme možnosti, jak jej v klasických systémech studovat. Teoretickou sekci zakončíme svižným objasněním toho, proč při studiu chaotičnosti kvantového systému má smysl i klasický pohled.

1.1 Algebraická teorie molekul

1.1.1 Mnohočásticové systémy

V kvantové mechanice můžeme popsat systém interagujících bosonů nebo fermionů stavem z Fockova prostoru $\mathcal{F}$. My budeme studovat bosonový systém, proto se omezíme jen na bosonové výrazy. Fermionový prostor lze však zavést obdobně (Cejnar, 2013). Hilbertův prostor k nerozlišitelných bosonů budeme značit $\mathcal{H}^{(k)}$. Fockův prostor je pak dán jako

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{k=0} \mathcal{H}^{(k)}.$$

Ve Fockově prostoru zavádíme bázi ze stavů $|n_1,n_2,\ldots\rangle$, kde n_i je počet bosonů v jednočásticovém stavu i. Dále definujeme bosonové kreační a anihilační operátory $\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_i$, jejichž působením dochází k vytvoření, nebo zničení částice v i-tém stavu

$$\begin{aligned}
\hat{b}_i^\dagger \,|n_1,n_2,\ldots,n_i,\ldots\rangle &= \sqrt{n_i+1}\,|n_1,n_2,\ldots,(n_i+1),\ldots\rangle\,,\\
\hat{b}_i \,|n_1,n_2,\ldots,n_i,\ldots\rangle &= \sqrt{n_i}\,|n_1,n_2,\ldots,(n_i-1),\ldots\rangle\,.
\end{aligned}$$

Částicemi zde označujeme obecně kvanta energie, která nemusí představovat běžné částice, jakými jsou například elektrony. Částicový popis je platný i pro kvazičástice, které představují obecnou excitaci systému (fonony, vibrony atd.).

Zavedené operátory splňují známé komutační relace

$$[\hat{b}_i,\hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \qquad [\hat{b}_i^\dagger,\hat{b}_j^\dagger] = [\hat{b}_i,\hat{b}_j] = 0. \tag{1.1}$$

Počet částic v i-tém stavu zjistíme operátorem počtu částic $\hat{N}_i \equiv \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$

$$\hat{N}_i \,|n_1,n_2,\ldots,n_i,\ldots\rangle = n_i \,|n_1,n_2,\ldots,n_i,\ldots\rangle\,. \tag{1.2}$$

Pomocí kreačních a anihilačních operátorů lze přecházet mezi stavy mnohočásticového systému a dokážeme jimi vyjádřit působení obecného operátoru,

který zachovává počet částic. Hamiltonián $\hat{H}$ mnohočásticového systému s neměnným počtem částic tak můžeme psát jako

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \sum_{i,j,k,l} \nu_{ijkl} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_l, \tag{1.3}$$

kde první suma odpovídá kinetickým členům a jednočásticovým interakcím s vnějšími poli a druhá suma popisuje dvoučásticové interakce v systému. Členy vyšších řádů by pak odpovídaly vícečásticovým interakcím, které však neuvažujeme. Konkrétní systém je pak určen konstantami ε_{ij} a ν_{ijkl}.

1.1.2 Grupy a algebry

Algebraická teorie nám pomáhá sestavit jednoduché modely kvantových systémů s využitím poznatků z teorie grup a algeber. Spojovacím článkem mezi těmito matematickými objekty a pozorovaným světem je symetrie.

Formulujme Schrödingerovu rovnici pro obecný systém s vlastními stavy $|\psi_k\rangle$

$$\left(\hat{H} - i\frac{\partial}{\partial t}\right)|\psi_k\rangle = 0.$$

Existují-li operátory $\hat{g}_{kl}$, které splňují

$$\left(\hat{H} - i\frac{\partial}{\partial t}\right)\sum_l \hat{g}_{kl}\,|\psi_l\rangle = 0, \tag{1.4}$$

nazýváme je transformacemi symetrie, neboť původní řešení $|\psi_k\rangle$ transformují na nové. Pro nás bude podstatný případ, kde tyto operátory tvoří tzv. Lieovu algebru. Lieova algebra je tvořena operátory, které generují prvky příslušné Lieovy grupy.

Tento myšlenkový postup osvětlíme na příkladu rotace kolem osy. Operátory rotace kolem osy dané jednotkovým vektorem $\boldsymbol{n}$ o úhel ϕ, které označíme jako $\hat{R}_{\boldsymbol{n}\phi}$, tvoří grupu dle následující definice.

Definice 1. ***Grupou*** **G** *nazveme množinu prvků* $\{g_i\}$*, která je uzavřená na operaci skládání*

$$g_i, g_j \in G \implies g_i g_j \in G \quad \forall i,j,$$

a splňuje:

- $(g_i g_j) g_k = g_i (g_j g_k)$ — ***asociativita***
- $\exists e \in G : g_i e = e g_i$ *pro* $\forall g_i \in G$ — ***jednotkový prvek***
- $\forall g_i \in G\ \exists g_i^{-1} : g_i g_i^{-1} = g_i^{-1} g_i = e$ — ***inverzní prvky***.

V našem případě indexujeme operátory $\hat{R}_{\boldsymbol{n}\phi}$ úhlem ϕ. Operace skládání je pak sčítání úhlů: $\hat{R}_{\boldsymbol{n}\phi_i}\hat{R}_{\boldsymbol{n}\phi_j} = \hat{R}_{\boldsymbol{n}(\phi_i+\phi_j)}$. Asociativita je u skládání otočení kolem osy splněna. Jednotkovým prvkem je otočení o plný úhel 2π a inverzním prvkem otočení o úhel ϕ je otočení o úhel $-\phi$.

Operátor rotace je generován jiným operátorem, a sice operátorem momentu hybnosti $\hat{\boldsymbol{J}}$, jako $\hat{R}_{\boldsymbol{n}\phi} = e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{\boldsymbol{J}}\cdot\boldsymbol{n})\phi}$. Moment hybnosti je vyjádřen vektorovým operátorem, jehož složky díky komutačním relacím $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k$, kde ϵ_{ijk} je Levi-Civitův symbol, tvoří Lieovu algebru:

Definice 2. ***Lieovou algebrou*** $\mathfrak{g}$ *nazveme množinu operátorů* $\{\hat{G}_i\}$*, která splňuje*

- $[\hat{G}_i,\hat{G}_j] = \sum c_{ij}^k \hat{G}_k, \quad c_{ij}^k = -c_{ji}^k$ ***komutační relace***
- $[[\hat{G}_i,\hat{G}_j],\hat{G}_k] + [[\hat{G}_j,\hat{G}_k],\hat{G}_i] + [[\hat{G}_k,\hat{G}_i],\hat{G}_j] = 0$ ***Jacobiho identita***

Konstanty c_{ij}^k se nazývají *strukturními konstantami* příslušné algebry a plně určují její strukturu. Různé sady operátorů, které splňují komutační relace se stejnými strukturními konstantami, tak představují jen dvě reprezentace jedné algebry.

Podíváme se, jak se algebraické vlastnosti projeví na výsledné symetrii řešení. Zvolíme otočení kolem konkrétní osy. Vybereme například osu z,
tedy $\boldsymbol{n_z} = (0,0,1)$. Operátor rotace je pak generován z-tovou složkou momentu hybnosti

$$\hat{R}_{\boldsymbol{n_z}\phi} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\phi}.$$

Mějme takový systém zadaný hamiltoniánem $\hat{H}$, že $\hat{J}_z$ je operátorem transformace symetrie ze vztahu (1.4). Pak $\hat{J}_z$ musí splňovat

$$[\hat{H},\hat{J}_z] - i\frac{\partial \hat{J}_z}{\partial t} = 0.$$

Zjednodušme si ukázku a uvažujme systém s časově nezávislou z-tovou složkou momentu hybnosti. Pak $\hat{J}_z$ komutuje s hamiltoniánem $\hat{H}$ a platí

$$0 = [\hat{H},\hat{J}_z] = [\hat{H},e^{\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\phi}] = [\hat{H},\hat{R}_{\boldsymbol{n_z}\phi}].$$

Nečasovou Schrödingerovu rovnici tedy řeší nejen stav $|\psi_k\rangle$, ale i $\hat{R}_{\boldsymbol{n_z}\phi}|\psi_k\rangle$

$$\hat{H}\hat{R}_{\boldsymbol{n_z}\phi}|\psi_k\rangle = \hat{R}_{\boldsymbol{n_z}\phi}\hat{H}|\psi_k\rangle = E\hat{R}_{\boldsymbol{n_z}\phi}|\psi_k\rangle .$$

Nakonec tak dostáváme osově symetrické řešení kolem osy z. Tato symetrie tak byla generována už na začátku prvky z Lieovy algebry. Jedná se o algebru $o(2)$, která je tvořena jen jedním operátorem, v našem případě $\hat{J}_z$, který generuje symetrii vůči otočení kolem osy z.

Pro nás podstatným zjištěním je, že hamiltonián $\hat{H}$, který komutuje se všemi prvky G_i Lieovy algebry $\mathfrak{g}$

$$[\hat{H},\hat{G}_i] = 0, \qquad \forall \hat{G}_i \in \mathfrak{g}, \tag{1.5}$$

je invariatní vůči transformacím dané algebry, respektive jí příslušné grupy.

Každé Lieově algebře odpovídá příslušná Lieova grupa, která popisuje nějakou symetrii. Běžně používáme Cartanovu klasifikaci, která rozděluje Lieovy algebry a grupy do několika základních tříd. Pro podrobný seznam odkážeme čtenáře do (Gilmore, 2012) s podrobnějším úvodem do teorie Lieových grup a algeber a uvedeme zde jen základní dva typy, a to sice *unitární* (popisuje transformace, které lze vyjádřit unitárními maticemi) a *ortogonální* (popisuje transformace, které lze popsat ortogonálními maticemi) grupy, resp. algebry. Pojmenování grup se běžně značí velkými písmeny, zatímco pojmenování algeber malými. Unitární

algebře $u(n)$ tak odpovídá grupa $U(n)$ a ortogonální grupa $O(n)$ má prvky generované operátory z algebry $o(n)$. Číslo n bývá označováno jako *rank* dané grupy nebo algebry.

Výše jsme uvedli první příklad Lieovy algebry, která je tvořena složkami momentu hybnosti $\hat{\boldsymbol{J}}$. Již jsme zmínili, že algebra $o(2)$, např. tvořená operátorem $\hat{J}_z$, generuje symetrii vůči rotaci kolem osy z. Symetrie vůči rotaci v prostoru, tedy kolem obecné osy, generuje algebra $o(3)$. K ní je izomorfní algebra $su(2)$, neboť mají stejnou algebraickou strukturu operátorů (strukturními konstantami jsou složky již zmíněného Levi-Civitova tenzoru). Písmeno s v názvu značí slovo *speciální*, což znamená, že příslušná grupa $SU(n)$ popisuje transformace s jednotkovým determinantem.

Typ algebry také určuje počet operátorů, kterými je tvořena. Algebry $su(n)$ a $o(n)$ obsahují n^2-1, resp. $n(n+1)/2$ operátorů. Dále pro nás bude podstatné, že unitární algebra $u(n)$ obsahuje n^2 operátorů.

Často dochází k tomu, že podmnožina prvků dané algebry $\mathfrak{g}$ také splňuje definici Lieovy algebry, a tvoří tak podalgebru $\mathfrak{g}'$ algebry $\mathfrak{g}$. Tato podalgebra může obsahovat vlastní podalgebry a pak mluvíme o řetězci podalgeber původní algebry $\mathfrak{g}$

$$\mathfrak{g} \supset \mathfrak{g}' \supset \mathfrak{g}'' \ldots . \tag{1.6}$$

Původní algebra může těchto řetězců obsahovat více. Jedná se každopádně o vyřešený problém, takže celou dílčí strukturu dané algebry si lze pro popis algebraického problému vyhledat (viz (Iachello, 2015)).

Z prvků $\hat{G}_i$ daná algebry $\mathfrak{g}$ můžeme sestavit operátory $\hat{C}_k$, které splňují

$$[\hat{C}_k,\hat{G}_i] = 0 \qquad \forall \hat{G}_i \in \mathfrak{g}. \tag{1.7}$$

Takové operátory nazýváme *Casimírovými operátory algebry* $\mathfrak{g}$. Index k udává mocninu $\hat{G}_i$, ve které se v $\hat{C}_k$ objevují. Každá algebra má svou vlastní charakteristickou sestavu Casimírových operátorů a naštěstí pro nás je znám explicitní tvar každého z nich. o tom všem a mnoha dalších vlastnostech Lieových grup a algeber se lze dočíst například v (Gilmore, 2012) nebo (Iachello, 2015).

1.1.3 Algebraický model

Spojovacím článkem popisu mnohočásticových systémů a algebraické teorie jsou kreační a anihilační operátory. Jejich kombinace totiž tvoří operátory, které splňují definici Lieovy algebry. Uvažujme n typů kreačních a anihilačních operátorů $\hat{b}_i^\dagger$, $\hat{b}_i$, kde $i \in \{1,\ldots,n\}$. Pak můžeme sestavit n^2 operátorů ve tvaru

$$\hat{G}_{ij} \equiv \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j \qquad i,j \in \{1,\ldots,n\}. \tag{1.8}$$

Za použití (1.1) ověříme[1], že tvoří Lieovu algebru $u(n)$, neboť platí

$$[\hat{G}_{ij},\hat{G}_{kl}] = \hat{G}_{il}\delta_{jk} + \hat{G}_{jk}\delta_{il}. \tag{1.9}$$

Prvky algebry budeme číslovat dvěma indexy vzhledem k jejich původu z kreačních a anihilačních operátorů.

[1] Typ algebry už nám bude muset čtenář věřit, nebo se podívat do (Iachello a Levine, 1995).

Je-li nějaký mnohočásticový systém invariatní vůči transformacím grupy $U(n)$, pak generátory $\hat{G}_{ij}$ této grupy jsou transformacemi symetrie daného systému. Srovnáním vztahů (1.5) a (1.7) zjistíme, že hamiltonián takového systému lze vyjádřit jako kombinace Casimírových operátorů

$$\hat{H} = \sum_i k_i \hat{C}_i. \tag{1.10}$$

Systémy, které bychom chtěli popsat, nemají vždy symetrie $U(n)$. V takovém případě lze využít něčeho, co se v literatuře označuje jako *dynamické symetrie*[2]. Problém opět formulujeme pomocí generátorů $\hat{G}_{ij}$ tvořených kreačními a anihilačními operátory, které tvoří algebru $\mathfrak{g}$. Nechť $\mathfrak{g}'$ je její podalgebrou jako ve vztahu (1.6). Pak hamiltonián sestavený z Casimírovách operátorů $\hat{C}_i[\mathfrak{g}]$ a $\hat{C}_i[\mathfrak{g}']$ dané algebry a její podalgebry

$$\hat{H}' = \sum_i k_i \hat{C}_i[\mathfrak{g}] + \sum_i k'_i \hat{C}_i[\mathfrak{g}'] \tag{1.11}$$

má symetrie dané podalgebrou $\mathfrak{g}'$, ale stejné vlastní vektory jako hamiltonián symetrický vůči transformacím algebry $\mathfrak{g}$. Casimírovými operátory podgrupy jsme narušili degeneraci prostorů tvořených vlastními stavy $\hat{G}_{ij}\left|\psi_k\right\rangle$ původního hamiltoniánu $\hat{H}$ se stejnou energií E_k

$$\hat{H}\left|\psi_k\right\rangle = E_k\left|\psi_k\right\rangle, [\hat{H},\hat{G}_{ij}] \implies \hat{H}\hat{G}_{ij}\left|\psi_k\right\rangle = E_k\hat{G}_{ij}\left|\psi_k\right\rangle.$$

Podalgebra $\mathfrak{g}'$ však může obsahovat vlastní podalgebry jako v (1.6) a její symetrie tak lze narušit Casimírovy operátory těchto podalgeber. Takový hamiltonián tak bude invariantní vůči transformacím poslední algebry v tomto řetězci. Poslední algebru v řetězci nazýváme *spektrum generující algebrou* a je to algebra příslušející grupě symetrií (například invariance vůči rotaci v prostoru - algebra $o(3)$), které splňuje nějaký námi popisovaný systém, jehož model se snažíme sestavit. Počáteční algebru $\mathfrak{g}$ v řetězci někdy označujeme jako *algebru dynamických symetrií*, neboť je tvořena operátory $\hat{G}_{ij}$, kterými je formulován celý problém.

Krátké shrnutí této techniky by mohlo znít následovně. Mějme kvantový systém, který je invariatní vůči transformacím grupy generované prvky algebry $\mathfrak{g}_s$. Hamiltonián tohoto systému sestavíme z n sad kreačních a anihilačních operátorů, které podle (1.8) tvoří prvky algebry $u(n)$. Jedná se tak vlastně o zjednodušenou formulaci problému pomocí n netriviálně vázaných harmonických oscilátorů. Najdeme řetězec podalgeber algebry $u(n)$, který obsahuje i $\mathfrak{g}_s$

$$\mathfrak{g} \supset \mathfrak{g}' \cdots \supset \mathfrak{g}_s. \tag{1.12}$$

Hamiltonián pak zformulujeme pomocí Casimírových operátorů algeber z tohoto řetězce.

1.1.4 Vibronový model

Studovaným modelem v této práci je dvourozměrný model molekulových vibrací prezentovaný Iachellem a Ossem v článku (Iachello a Oss, 1996).

[2] Anglický termín je *dynamical symmetries*. Viz (Frank a kol., 2009)

Autoři obecný dvourozměrný problém formulují pomocí algebry $u(3)$, kde používají dvě sady bosonových operátorů $\hat{\tau}_x, \hat{\tau}_x^\dagger$ a $\hat{\tau}_y, \hat{\tau}_y^\dagger$ a dodatečný skalární operátor $\hat{\sigma}$ a $\hat{\sigma}^\dagger$. Molekula je orientovaná podél osy z a jsou posány vibrace částice molekuly v rovině xy. Bosonové operátory jsou zaváděny pro každý prostorový stupeň volnosti. Dodatečný skalární operátor slouží k odlišení modelů se stejnou algebraickou strukturou, ale různým počtem excitací. Bosonové operátory kreují a anihilují právě tyto excitace. Nezajímáme se proto přímo o částice (atomová jádra a elektrony) tvořící danou molekulu, ale o kvazičástice, které odpovídají vibračním excitacím části molekuly. Takové kvazičástice nazýváme *vibrony*.

Stav systému je tak popsán třemi kvantovými čísly, z nichž jedno lze využít k odlišení systémů se stejnou symerií. Význam tohoto dodatečného kvantového čísla N se může lišit v závislosti na problému, který řešíme. V molekulové fyzice bývá fixováno celkovým počtem excitací v systému, než dojde k rozpadu molekuly, zatímco v jaderné fyzice udává počet párů valenčních nukleonů v jádře (viz model interagujících bosonů založený na algebře $u(6)$). Detailněji je to popsáno třeba v pracech Iachella (Iachello a Levine, 1995; Iachello a Arima, 1987). Zavedení dodatečné sady skalárních operátorů s novým kvantovým číslem není pro popis systému nutné, ale ukáže se jako vhodné pro jednoduché provedení klasické limity.

Z bosonových a skalárních operátorů jsou tvořeny prvky algebry $u(3)$. Formulace a následná interpretace je snazší se sférickými tvary bosonových operátorů, které jsou zavedeny jako

$$\hat{\tau}_\pm^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\tau}_x^\dagger \pm i\hat{\tau}_y^\dagger), \qquad \hat{\tau}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\tau}_x \mp i\hat{\tau}_y). \tag{1.13}$$

Algebra $u(3)$ lze sestavit z následujících devíti operátorů:

$$\begin{aligned}
\hat{n} &= \left(\hat{\tau}_+^\dagger\hat{\tau}_+ + \hat{\tau}_-^\dagger\hat{\tau}_-\right) & \hat{D}_+ &= \sqrt{2}\left(\hat{\tau}_+^\dagger\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^\dagger\hat{\tau}_-\right) \\
\hat{l} &= \left(\hat{\tau}_+^\dagger\hat{\tau}_+ - \hat{\tau}_-^\dagger\hat{\tau}_-\right) & \hat{D}_- &= \sqrt{2}\left(-\hat{\tau}_-^\dagger\hat{\sigma} + \hat{\sigma}^\dagger\hat{\tau}_+\right) \\
\hat{Q}_+ &= \sqrt{2}\left(\hat{\tau}_+^\dagger\hat{\tau}_-\right) & \hat{R}_+ &= \sqrt{2}\left(\hat{\tau}_+^\dagger\hat{\sigma} + \hat{\sigma}^\dagger\hat{\tau}_-\right) \\
\hat{Q}_- &= \sqrt{2}\left(\hat{\tau}_-^\dagger\hat{\tau}_+\right) & \hat{R}_- &= \sqrt{2}\left(\hat{\tau}_-^\dagger\hat{\sigma} + \hat{\sigma}^\dagger\hat{\tau}_+\right) \\
\hat{n}_s &= \left(\hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma}\right). & &
\end{aligned} \tag{1.14}$$

Jedná se o vhodně uspořádané operátory ze vztahu (1.8) tak, že některým dokážeme přiřadit význam fyzikální veličiny. Jmenovitě $\hat{n}$ a $\hat{n}_s$ jsou operátory počtů částic, $\hat{l}$ představuje rotaci kolem osy z kolmé na rovinu xy, ve které dochází k pohybu částic, $\hat{Q}$ hrají roli operátorů kvadrupólu a $\hat{D}$ jsou dipólové operátory.

K vibracím v modelu dochází pouze v rovině xy. Takový systém by měl být invariantní vůči otočení kolem osy z, tedy transformacím grupy $O(2)$. Spektrum generující algebrou je tak algebra $o(2)$, zatímco algebrou dynamických symetrií je algebra $u(3)$. Algebra $u(3)$ obsahuje dva řetězce podalgeber, které obsahují požadovanou algebru $o(2)$

$$\begin{aligned}
&u(3) \supset u(2) \supset o(2) \quad \text{I. řetězec,} \\
&u(3) \supset o(3) \supset o(2) \quad \text{II. řetězec,}
\end{aligned} \tag{1.15}$$

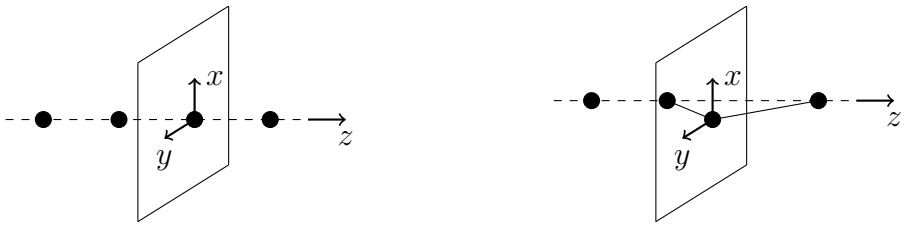
s následujícím složením operátorů

$$\begin{aligned}
u(2) &= \{\hat{n},\hat{l},\hat{Q}_+,\hat{Q}_-\}, \\
o(3) &= \{\hat{W} \equiv (\hat{D}_+,\hat{D}_-,\hat{l})\}, \\
o(2) &= \{\hat{l}\}.
\end{aligned} \tag{1.16}$$

Každý z řetězců algeber určuje jiný hamiltonián vyjádřený Casimírovými operátory. Oba jsou invariantní vůči transformacím grupy $O(2)$. Popisují systém s rotační symetrií kolem osy z.

Hamiltonián prvního řetězce popisuje vibrace v rovině xy atomu, který je součástí lineární molekuly rovnoběžné s osou z (obr. 1.1a).

Druhý řetězec definuje hamiltonián, který popisuje rotace a vibrace v rovině xy atomu, který je také součástí lineární molekuly rovnoběžné s osou z, ale narozdíl od předchozího případu je tento atom od osy vychýlen (obr. 1.1b).



(a) Řetězec I (b) Řetězec II

Obrázek 1.1: Systémy popsané řetězci podalgeber algebry $u(3)$.

Iachhello a Oss ve svém článku představují hamiltonián s jedním reálným parametrem ξ

$$\hat{H} = (1-\xi)\hat{C}_1[u(2)] - \frac{\xi}{(N-1)}\hat{C}_2[o(3)], \tag{1.17}$$

kde N je počet vibronů, tedy počet vázaných stavů v tomto systému harmonických oscilátorů.

Tento hamiltonián je tvořen Casimírovy operátory z obou řetězců

$$\hat{C}_1[u(2)] = \hat{n}, \tag{1.18}$$

$$\hat{C}_2[o(3)] \equiv \hat{W}^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{D}_+\hat{D}_- + \hat{D}_-\hat{D}_+\right) + \hat{l}^2. \tag{1.19}$$

Změna parametru $0 \leq \xi \leq 1$ tak vyjadřuje dislokaci atomu z řetízkové molekuly a přechod mezi situací na obrázku 1.1a, které odpovídá $\xi \in \langle 0; \frac{1}{5}\rangle$, a tvarem molekuly na obrázku 1.1b, kterému odpovídá $\xi \in \langle \frac{1}{5}; 1\rangle$. Pro hodnotu parametru $\xi = 1/5$ dochází k tzv. kvantovému fázovému přechodu, což je další motivace ke studiu tohoto modelu.

Takový hamiltonián, který určuje třídu systémů molekulových vibrací, nás bude zajímat po zbytek této práce. Máme v plánu studovat klasický chaos. K tomu je zapotřebí provést klasickou limitu tohoto kvantového systému.

1.1.5 Klasická limita

Při provádění klasické limity obecného algebraického modelu lze využít toho, že v něm dokážeme identifikovat soustavy harmonických oscilátorů. Obecnou sadu kreačních a anihilačních operátorů můžeme vyjádřit pomocí operátorů kanonicky sdružených souřadnic polohy $\hat{q}_k$ a hybnosti $\hat{p}_k$.

$$\hat{b}_k^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2\hbar_{\text{eff}}}}\left(\hat{q}_k - i\hat{p}_k\right), \qquad \hat{b}_k = \sqrt{\frac{1}{2\hbar_{\text{eff}}}}\left(\hat{q}_k + i\hat{p}_k\right), \tag{1.20}$$

kde $\hbar_{\text{eff}}$ je efektivní Plankcova konstanta. Klasické limitě pak odpovídá limita

$$\hbar_{\text{eff}} \to 0.$$

V našem případě hraje roli efektivní Planckovy konstanty inverze počtu vibronů N^{-1}, což odpovídá přechodu ke klasickému chování systému s velkým počtem excitací

$$N \to \infty.$$

Počet vibronů N jsme získali jako dodatečné kvantové číslo při přechodu od algebry $u(n)$ k $u(n+1)$ zavedením nové sady skalárních operátorů. Číslo N je vlastním číslem operátoru počtu částic ze vztahu (1.2), který po zavedení operátorů $\hat{\tau}$ a $\hat{\sigma}$ má tvar

$$\hat{N} = \hat{\sigma}^\dagger\hat{\sigma} + \sum_{k=1}^{n} \hat{\tau}_k^\dagger\hat{\tau}_k. \tag{1.21}$$

My ještě provedeme jednu transformaci těchto kreačních a anihilačních operátorů

$$\{\hat{b}_k,\hat{b}_k^\dagger\} \to \{\hat{a}_k,\hat{a}_k^\dagger\}$$

k nové sadě, kde operátory $\{\hat{a}_0,\hat{a}_0^\dagger\}$ budou udávat celkový počet excitací

$$\hat{N} = \hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0$$

a zbylé $\{\hat{a}_k,\hat{a}_k^\dagger\}, k = 1,\ldots,n$ budou nést informaci o dynamice systému. Tím se zbavíme problému při interpretaci skalárních operátorů po provedení klasické limity (původně bychom ze tří sad kreačních a anihilačních operátorů po provedení limity získali tři sady kanonicky sdružených poloh a hybností netriviálně provázaných kvůli zachování počtu vibronů N). Transformace, kterou použijeme, se nazývá Holstein-Primakovova [3]

$$\hat{a}_0^\dagger = \sqrt{\frac{\hat{N}}{\hat{b}_0^\dagger\hat{b}_0}}\hat{b}_0^\dagger \quad \hat{a}_k^\dagger = \hat{b}_0\sqrt{\frac{1}{\hat{b}_0^\dagger\hat{b}_0}}\hat{b}_k^\dagger(\text{ pro } k > 0), \tag{1.22}$$

kde v našem případě $\{\hat{b}_0,\hat{b}_0^\dagger\} \equiv \{\hat{\sigma},\hat{\sigma}^\dagger\}$ a $\{\hat{b}_k,\hat{b}_k^\dagger\} \equiv \{\hat{\tau}_k,\hat{\tau}_k^\dagger\}$.

Obrazy generátorů algebry $u(n+1)$ po provedení Holstein-Primakovova mapování a klasické limity jsou uvedeny v článku (Macek a kol., 2019) a my zde vše podstatné máme v tabulce 1.1.

[3] Anglicky Holstein-Primakoff transformation (Holstein a Primakoff, 1940)

Tabulka 1.1: Tabulka provedení klasické limity. Obecný operátor vyjádřený pomocí kreačních a anihilačních operátorů je po transformaci vyjádřen klasickými kanonicky sdruženými polohami a hybnostmi. Zdroj (Macek a kol., 2019).

k	l	Symetrické generátory $\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l + \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_k$	Antisymetrické generátory $i\left(\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l - \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_k\right)$
>0	>0	$N\left(q_k q_l + p_k p_l\right)$	$N\left(p_k q_l - q_k p_l\right)$
>0	$=0$	$N q_k \sqrt{2 - \sum_{m=1}^{n}\left(q_m^2 + p_m^2\right)}$	$N p_k \sqrt{2 - \sum_{m=1}^{n}\left(q_m^2 + p_m^2\right)}$
$=0$	>0	$N q_l \sqrt{2 - \sum_{m=1}^{n}\left(q_m^2 + p_m^2\right)}$	$-N p_l \sqrt{2 - \sum_{m=1}^{n}\left(q_m^2 + p_m^2\right)}$
$=0$	$=0$	$N\left[2 - \sum_{m=1}^{n}\left(q_m^2 + p_m^2\right)\right]$	0

Kvantový problém jsme tak schopni v limitě převést na klasický systém s dynamikou určenou na fázovém prostoru ve tvaru $2n$ dimenzionální koule o poloměru $R = \sqrt{2}$, což plyne z podmínky na reálnost transformačního výrazu $\sqrt{2 - \sum_{m=1}^{n}\left(q_m^2 + p_m^2\right)}$.

1.2 Klasický chaos

Pomocí limity jsme z kvantového problému dostali klasický. V něm se nyní budeme snažit studovat takzvaný *klasický chaos*. Jeho nejznámějším projevem, a to nejen ve vědecké, ale i populární kultuře[4], je citlivost chaotických systémů na změnu počátečních podmínek. Systémy v podobných počátečních stavech se postupem času svým chování stále více odlišují. To nám například znemožňuje předvídat chování systému pro dlouhé časy.

Chování může být popsáno diskrétní, nebo spojitou funkcí. U diskrétních funkcí mluvíme o studio chaosu na tzv. mapách, kde trajektorie vývoje je dána po krocích. Biologové se takto dostali k chaosu, když se v jejich diskrétních modelech populací zvířat začala objevovat velice složitá chování. Nás ale bude zajímat chaotičnost trajektorií na fázovém prostoru. Budeme studovat hamiltonovský systém, jehož vývoj je plně určen Hamiltonovými pohybovými rovnicemi.

Jeden z dalších obecně známých jevů spojených s chaosem je *efekt motýlých křídel*. Jeho populární znění je takové, že mávnutí křídel motýla v Japonsku může způsobit hurikán v Kalifornii. To má přiblížit velkou citlivost na změnu počátečních podmínek atmosféry, kterou lze považovat za chaotický hamiltonovský systém. Jedná se však o systém, ve kterém se nezachovává energie. Díky tomu v něm existují *atraktory*, které na sebe vážou určité třídy trajektorií, které pak lze charakterizovat nějakým chováním. Nejznámějším příkladem je Lorenzův atraktor, který vypadá právě jako motýl. Atraktory ale v našem vibronovém modelu nenajdeme, neboť v něm se energie zachovává a jednotlivé trajektorie leží na nadplochách s konstantní energií E.

Chaos vytváří obecně na fázovém prostoru velmi komplikovanou strukturu. Hlavní vlastností chaotické funkce je její mísení fázového prostoru. Vezmeme-li

[4]Např. ve filmu Jurský park. Vysvětlování teorie chaosu je zde dokonce použito ke svádění. Neúspěšně.

si dvě jeho podoblasti a necháme-li je vyvíjet v čase, začnou se do sebe zaplétat a celý proces bude připomínat hnětení těsta nebo rozplývání kapky inkoustu ve vodě. To je způsobeno tím, že chaotické trajektorie mají tendenci projít okolím každého bodu v chaotické oblasti. Charakterizaci chování systému je tak ještě více ztížena, neboť za nekonečný čas si systém „vyzkouší“ skoro každé chování.

Ukazuje se, že studovat chaotičnost systému, tedy zjišťovat, jestli jeho trajektorie vývoje jsou chaotické, můžeme pomocí zkoumání vzdalování blízkých orbit. Díky mísení dochází k jejich exponenciálnímu vzdalování, což lze interpretovat jako extrémní citlivost na změnu počátečních podmínek nebo na poruchy. Na dané orbitě budeme sledovat, jak se roztahuje malý element fázového prostoru s těmito blízkými trajektoriemi.

Motivací ke studiu chaosu v klasické limitě kvantového systému je snaha o bližší porozumění *kvantového chaosu*. Ukazuje se, že některé kvantové systémy vykazují speciální chování, které by bylo možné považovat za chaotické. Kvantový chaos však stále není jednoznačným pojmem. Linearita kvantové mechaniky a unitarita časové evoluce způsobují, že vzdalování vyvíjených stavů nezávisí na čase. Citlivost na změnu počátečních podmínek tak, jak jsme ji chápali pomocí vzdalování blízkých trajektorií na fázovém prostoru, v kvantovém systému nenajdeme. Nicméně se ukazuje, že chaotické vlastnosti klasického modelu fyzikálního systému se projeví i v kvantovém (např. souhrnný článek (Fortes a kol., 2019)). Spektra chaotických systémů mají jiná statistická rozdělení hladin než nechaotické. Velikost Lyapunovova exponentu, který udává míru vzdalování blízkých trajektorií, a podíl chaotické a regulární oblasti klasického systému například ovlivňuje chování tzv. OTOCů [5], které charakterizují korelaci dvou veličin reprezentovaných v kvantovém modelu hermitovskými operátory v různých časech. Zmapování chaosu v klasickém obrazu systému nám pomůže osvětlit propojení mezi klasickým a kvantovým chaosem.

1.2.1 Hamiltonovké systémy

Jak už bylo řečeno výše, chaos budeme studovat jen v klasických dynamických systémech s n stupni volnosti popsaných Hamiltonovými rovnicemi a navíc s časově nezávislým hamiltoniánem

$$H(q_1,\dots,q_n,p_1,\dots,p_n) = konst$$

jako v (Skokos, 2010), kde je uveden kondenzovaný úvod do studia chaosu. Pracujeme pak na $2n$ rozměrném fázovém prostoru $\mathcal{S}$ poloh q_i a hybností $p_i, i = 1,\dots,n$. Stav systému je dán bodem na fázovém prostoru $\mathbf{x} = (q_1,\dots,p_1,\dots)$. Časová evoluce je dána Hamiltonovými rovnicemi

$$\dot{\mathbf{x}} = \left(\frac{\partial H}{\partial p_1},\dots,-\frac{\partial H}{\partial q_1},\dots\right),$$

což jen přepíšeme do tvaru

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{J}_{2n}\cdot\mathbf{DH}(\mathbf{x}), \tag{1.23}$$

[5] Z anglického názvu *Out-of-Time-Ordered Correlator*

kde

$$\mathbf{DH}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial H}{\partial q_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial H}{\partial p_1} \\ \vdots \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{J}_{2n} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix}.$$

$\mathbf{DH}(\mathbf{x})$ je vektor prvních derivací hamiltoniánu v bodě $(\mathbf{x})$, $\mathbf{0}$ je nulová matice $n \times n$ a $\mathbf{I}$ je jednotková matice $n \times n$. Řešení této diferenciální rovnice zapíšeme formálně pomocí toku na fázovém prostoru $\Phi^t : \mathcal{S} \to \mathcal{S}$

$$\mathbf{x}(t) = \Phi^t(\mathbf{x}(0)), \tag{1.24}$$

kde počáteční bod $\mathbf{x}(0)$ je zobrazen po orbitě určené pohybovými rovnicemi a parametrizované časem na bod $\mathbf{x}(t)$. Při studiu chaosu nás bude zajímat právě chaotičnost tohoto toku na fázovém prostoru a na jeho podoblastech V. Tu budeme určovat podle míry vzdalování nejbližších orbit. V bodě $\mathbf{x}(0)$ jsou blízké trajektorie dány body $\mathbf{x}(0) + \mathbf{w}(0)$, kde $\mathbf{w}$ je nějaký infinitezimálně malý vektor. V každém bodě $\mathbf{x}$ prostoru $\mathcal{S}$ tyto vektory tvoří tečný prostor $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$, $\mathbf{w}(0) \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$. Míru vzdalování blízkých trajektorií pak udává norma vektoru $\mathbf{w}$ v čase t.

Časový vývoj vektoru $\mathbf{w}$, je dán

$$\dot{\mathbf{w}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{J}_{2n} \cdot \mathbf{DH}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{w} = \mathbf{J}_{2n} \cdot \mathbf{D^2H}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{w}, \tag{1.25}$$

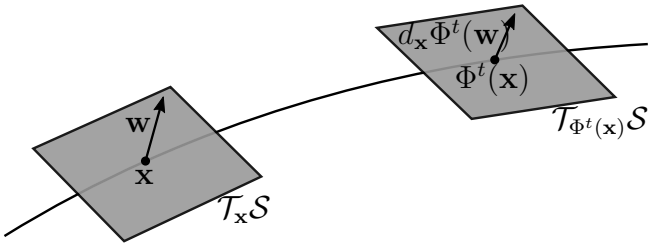
kde

$$\mathbf{D^2H}(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{ij}, \qquad \mathbf{x} = (q_1, \dots, p_1, \dots)$$

je matice druhých derivací hamiltoniánu podle prostorových souřadnic a hybností.Díky lineritě výrazu na velikosti vektoru $\mathbf{w}$ nezáleží. Řešení rovnice zapíšeme pomocí zobrazení na tečných prostorech $d_{\mathbf{x}}\Phi^t : \mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S} \to \mathcal{T}_{\Phi^t(\mathbf{x})}\mathcal{S}$

$$\mathbf{w}(t) = d_{\mathbf{x}}\Phi^t(\mathbf{w}(0)). \tag{1.26}$$

Souhrnně je evoluce na fázovém prostoru znázorněna na obrázku 1.2.



Obrázek 1.2: Namapování tečných prostorů na dané orbitě fázového prostoru $\mathcal{S}$. Bod $\mathbf{x}(0)$ je zobrazen zobrazením Φ^t do bodu $\mathbf{x}(t)$.Tečný prostor $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$ je zobrazen zobrazením $d_{\mathbf{x}}\Phi^t$ na prostor $\mathcal{T}_{\Phi^t\mathbf{x}}\mathcal{S}$.

1.2.2 Definice chaosu

Zatím jsme mluvili jen o některých projevech chaosu. Nyní jej zavedeme formálně. Uvedeme zde definici chaosu z (Skokos, 2010), resp. (Devaney, 1989).

Definice 3. *Nechť $f : v \to V$ je zobrazení na množině V. Řekneme, že f je* ***chaotická*** *na množině V, pokud*

- *f je citlivé na změnu počátečních podmínek,*
- *f je topologicky tranzitivní,*
- *periodické body jsou husté ve V.*

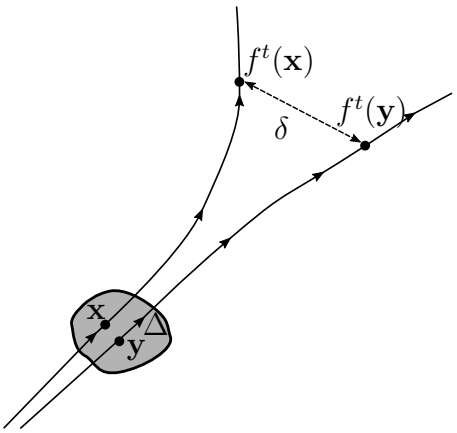
Použité pojmy v definici teď blíže vysvětlíme.

Definice 4. *Zobrazení $f : v \to V$ je* ***citlivé na změnu počátečních podmínek****, pokud existuje $\delta > 0$ taková, že pro všechna $\mathbf{x} \in V$ a jejich libovolná okolí $\Delta \subset V$ existuje prvek z těchto okolí $\mathbf{y} \in \Delta$ a $t \geq 0$, které splňují*

$$|f^t(\mathbf{x}) - f^t(\mathbf{y})| > \delta,$$

kde f^t značí t-krát aplikování zobrazení f pro diskrétní zobrazení a vývoj bodů do času t pro spojitá.

Zobrazení je tedy citlivé na změnu počátečních podmínek, pokud v libovolné blízkosti každého bodu $\mathbf{x}$ existuje bod $\mathbf{y}$, jehož obraz se po konečném počtu aplikací zobrazení vzdálí od obrazu $\mathbf{x}$ o pevnou nenulovou vzdálenost δ (obr. 1.3).



Obrázek 1.3: Znázornění citlivosti na změnu počátečních podmínek. Libovolně blízké body $\mathbf{x}$ a $\mathbf{y}$ se po t aplikacích zobrazení f vzdálí minimálně o pevné δ.

Definice 5. *Zobrazení $f : v \to V$ je* ***topologicky tranzitivní***[6]*, pokud pro každý pár otevřených množin U,$W \in V$ existuje $t \geq 0$ takové, že*

$$f^t(U) \cap W \neq \emptyset.$$

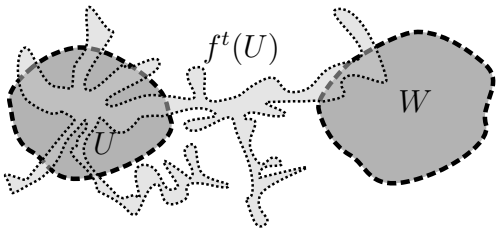
Aby bylo zobrazení f chaotické na celém V, musí se některé body z libovolné otevřené podmnožiny zobrazit na každou otevřenou podmnožinu ve V (obr. 1.4). Pokud tuto podmínku aplikujeme na otevřená okolí bodů, obrazy bodů z libovolného okolí Δ bodu $\mathbf{x}$ se zobrazí do libovolného okolí všech ostatních bodů z V.

Poslední bod v definici chaosu 3 říká, že na V existuje ještě speciální třída periodických bodů, které jsou po nějakém počtu t aplikací zobrazení f, případně po čase t, zobrazeny zpět na sebe

$$\mathbf{x} = f^t(\mathbf{x}).$$

Aby byla splněna definice chaosu, musí být tyto body husté ve V, tedy v libovolném okolí každého bodu najdeme nějaký periodický.

[6] Anglicky *topologically transitive* nebo též *mixing*.



Obrázek 1.4: Jednoduché znázornění topologické tranzitivity funkce f. Ta alespoň částečně „promísí“ libovolné dvě otevřené podmnožiny U a W po t aplikacích, případně vývoje do času t.

Chaotické zobrazení tak vytváří na množině V zajímavou strukturu. Nyní se podíváme, jak se chaos projeví v hamiltonovském systému. Budeme se dívat na zobrazení Φ^t a jeho chaotičnost na nějaké podoblasti fázového prostoru $\mathcal{S}$. Pracujeme jen s fázovými prostory s konečným objemem, které se vzhledem k časové nezávislosti hamiltoniánu nemění.

Nejprve zdůrazníme, že dynamický systém obecně nemusí být chaotický. V takovém případě se jedná o *integrabilní systém*. V něm jsme schopni nalézt stejný počet nezávislých integrálů pohybu jako stupňů volnosti a najít explicitní řešení pro orbity ze vztahu (1.24). Takové orbity nevykazují chování popsané v definici 3.

Není-li systém integrabilní, nebo integrabilitu narušíme nějakou poruchou, stává se systém *chaotickým*. Podrobnější klasifikaci včetně upřesnění některých pojmů a vlastností lze nalézt v (Contopoulos, 2002) a (J. Horák, 2003). Obecně se jedná o systém s rozděleným fázovým prostorem na oblasti s chaotickými orbitami a oblasti s regulárními orbitami, které chaotické chování nevykazují. V chaotických oblastech mohou existovat množiny stabilních periodických orbit s malými regulárními oblastmi a naopak v regulárních oblastech se mohou vyskytovat nestabilní periodické orbity obklopené ostrůvky chaosu.

v této práci budeme studovat právě tyto vlastnosti a budeme se zajímat o to, jak se v závislosti na poruše, která způsobí ztrátu integrability systému, mění regulární a chaotické oblasti a jejich objem. Chaos totiž do systému vnáší nemožnost předpovídat jeho dlouhodobé chování.

v praxi lze k odlišení regulárních a chaotických orbit na fázovém prostoru použít Lyapunovův exponent, který zevedeme v následující sekci.

1.2.3 Lyapunovův exponent

Lyapunovův exponent měří asymptotické natahování nebo smršťování fázového prostoru na okolí dané trajektorie. Lze jej tak využít jako míru závislosti na změně počátečních podmínek, neboť charakterizuje vzdalování blízkých trajektorií. Zadefinujeme Lyapunovův exponent pro orbity na fázovém prostoru hamiltonovského systému.

Definice 6. ***Lyapunovův charakteristický exponent prvního řádu*** *zobrazení $d_{\mathbf{x}}\Phi^t$ ve směru vektoru $\mathbf{w} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$ definujeme jako*

$$\chi(d_{\mathbf{x}}\Phi^t,\mathbf{w}) = \limsup_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln ||d_{\mathbf{x}}\Phi^t(\mathbf{w})||.$$

Lyapunovův charakteristický exponent prvního řádu, který nyní blíže prozkoumáme, budeme někdy označovat anglickou zkratkou LCE, nebo jen Lyapunovovým exponentem.

Mějme bod $\mathbf{x}$ na fázovém prostoru a k němu infinitezimálně blízký bod $\mathbf{x} + \mathbf{w}$, kde $\mathbf{w} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$. Bod $\mathbf{x}$ a jeho okolí budeme vyvíjet v čase zobrazením Φ^t a bu-

deme sledovat, jak se orbity počátečních bodů $\mathbf{x}$ a $\mathbf{x}+\mathbf{w}$ vzdalují. Výraz v předchozí definici 6 charakterizuje právě asymptotické vzdalování po nekonečném čase původně blízké orbity, a tedy vývoj vektoru $\mathbf{w}$ zobrazením $d_{\mathbf{x}}\Phi^t$. Lze to také chápat jako míru deformace okolí počátečního bodu. Nenulovost Lyapunovova exponentu pak značí exponenciální divergenci blízkých orbit spojenou se silnou citlivostí na změnu počátečních podmínek. Neexponenciálnímu (např. polynomiálnímu) vzdalování naopak odpovídá nulový Lyapunovův exponent s výrazem $\ln(t)/t$, který je v limitě $t \to \infty$ nulový.

Hodnota LCE nezávisí na velikosti vektoru a je stejná pro ekvivalentní normy, neboť pro $c > 0$

$$\chi(d_{\mathbf{x}}\Phi^t,c\mathbf{w}) = \limsup_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln ||d_{\mathbf{x}}\Phi^t(c\mathbf{w})|| = \limsup_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln ||d_{\mathbf{x}}\Phi^t(\mathbf{w})|| + \frac{1}{t} \ln |c|$$

$$\xrightarrow{t\to\infty} \qquad \chi(d_{\mathbf{x}}\Phi^t,c\mathbf{w}) = \chi(d_{\mathbf{x}}\Phi^t,\mathbf{w}). \tag{1.27}$$

Lze zavést i Lyapunovovy exponenty vyšších řádů p, kde místo normy vektoru sledujeme asymptotický vývoj objemu rovnoběžnostěnu určeného sadou p vybraných vektorů, viz (Skokos, 2010).

V definici 6 pracujeme s limitou suprema výrazu, neboť existence samotné limity není samozřejmá. Limita však bude existovat, pokud existuje limita

$$\lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln ||\det d_{\mathbf{x}}\Phi^t||,$$

což je pro náš hamiltonovský systém splněno[7]. Lyapunovův exponent tak můžeme počítat jako

$$\chi(d_{\mathbf{x}}\Phi^t,\mathbf{w}) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln ||d_{\mathbf{x}}\Phi^t(\mathbf{w})||. \tag{1.28}$$

Zatím jsme počítali Lyapunovův exponent, a tedy míru natažení fázového prostoru ve směru nějakého konkrétního vektoru $\mathbf{w}$. Vzhledem ke studiu citlivosti dané orbity na změnu počátečních podmínek nás bude zajímat maximální míra deformace elementu fázového prostoru podél této orbity. Ukážeme, že tato maximální míra bude určovat rozpínání téměř v každém směru.

Opět uvažujme orbitu na fázovém prostoru, která prochází bodem $\mathbf{x}$ s tečným prostorem $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$. Místo $\chi(d_{\mathbf{x}}\Phi^t\mathbf{w})$ budeme zkráceně psát jen $\chi(\mathbf{w})$. Pro součet dvou vektorů $\mathbf{w}_1$ a $\mathbf{w}_2$ platí

$$\chi(\mathbf{w}_1+\mathbf{w}_2) \leq \max\{\chi(\mathbf{w}_1),\chi(\mathbf{w}_2)\}, \tag{1.29}$$

což plyne z

$$\begin{aligned}\chi(\mathbf{w}_1+\mathbf{w}_2) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln ||d_{\mathbf{x}}\Phi^t(\mathbf{w}_1+\mathbf{w}_2)|| \\ &\leq \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln(2\max\{||d_{\mathbf{x}}\Phi^t(\mathbf{w}_1)||,||d_{\mathbf{x}}\Phi^t(\mathbf{w}_2)||\}) \\ &= \max\{\chi(\mathbf{w}_1),\chi(\mathbf{w}_2)\},\end{aligned}$$

[7] To je ukázáno v (Oseledets, 1968).

kde jsme v odhadu použili linearity zobrazení $d_{\mathbf{x}}\Phi^t$ a trojúhelníkové nerovnosti. Čísla 2 v logaritmu jsme se zbavili díky (1.27).

Ze vztahů (1.27) a (1.29) plyne, že množina vektorů

$$\{\mathbf{w} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}, \chi(\mathbf{w}) \leq r\}, r \in \mathbb{R}$$

tvoří lineární vektorový podprostor $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$, protože pokud do ní patří vektory $\mathbf{w}_1$ a $\mathbf{w}_2$, pak i vektor

$$c_1\mathbf{w}_1 + c_2\mathbf{w}_2 \in \{\mathbf{w} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}, \chi(\mathbf{w}) \leq r\}, \quad \forall c_1,c_2 \in \mathbb{R}.$$

Toto rozdělení tečného prostoru na podprostory s danou maximální mírou rozpínání nám poslouží k lepšímu pochopení chování fázového prostoru podél zvolené trajektorie. Z toho totiž plyne, že Lyapunovův exponent vektorů z $2n$ rozměrného tečného prostoru může nabývat nejvýše $2n$ hodnot ν_i. Pro dokázání tohoto tvrzení uvažujme opačnou situaci. Mějme množinu $2n+1$ vektorů $\{\mathbf{w}_i\}_{i=1}^{2n+1}$, které jsou uspořádány tak, že pro hodnoty ν_i jejich Lyapunových exponentů platí

$$\nu_1 < \cdots < \nu_{2n} < \nu_{2n+1}.$$

Pro každou z těchto hodnot zavedeme vektorový podprostor

$$L_i = \{\mathbf{w} \in \mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}, \chi(\mathbf{w}) \leq \nu_i\}.$$

Vztah (1.29) nedovoluje, aby nějaké dva prostory L_i a L_j, $i \neq j$ měli stejnou dimenzi. Pak ale L_{2n} musí být vektorový prostor dimenze $2n$ a je tak izomorfní s tečným prostorem $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$. Vektor $\mathbf{w}_{2n+1}$ proto leží v prostoru L_{2n}, a tedy $\nu_{2n+1} \leq \nu_{2n}$. Tím jsme se dostali do sporu s původním předpokladem existence $2n+1$ různých hodnot rozpínání vektorů z $2n$ rozměrného prostoru.

Spor nastává právě proto, že lineární struktura vektorových podprostorů nedovoluje větší počet různých směrů rozpínání než je dimenzionalita daného podprostoru. Obecně se mohou některé hodnoty ν_i rovnat a nabývají tak méně než $2n$ hodnot

$$\nu_1 < \cdots < \nu_s, \qquad 1 \leq s \leq 2n.$$

Jejich soubor nazýváme *spektrem* a popisuje míru deformace tečného prostoru ve všech směrech. Hodnoty ν_i se ve spektru vyskytují v párech $\nu_i = -\nu_{2n-i+1}$, kdy jedna charakterizuje rozpínání v nějakém směru, kterému odpovídá smršťování v druhém směru tak, aby se zachovával objem každého elementu fázového prostoru. Získali jsme alespoň základní představu o dynamice fázového prostoru.

Jaký je Lyapunovův exponent náhodně vybraného vektoru z $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$? Odpověď najdeme opět pomocí rozložení tečného prostoru na podprostory L_i. Největší podprostor $L_s = \mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$ přísluší i nejvyšší hodnotě Lyapunovova exponentu ν_s. Vektory právě s touto hodnotou Lyapunovova exponentu tvoří množinu L_s/L_{s-1}. Vektory s menší hodnotou LCE tvoří podprostor L_{s-1}, který je však v $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$ pouze množinou míry nula. s pravděpodobností 1 tak vybereme z tečného prostoru vektor s maximálním Lyapunovovým exponentem.

Pro účely této práce je to dobrá zpráva, neboť na základě hodnoty maximálního Lyapunovova exponentu (zkratka mLCE) lze rozhodnout o chaotičnosti, nebo regularitě dané neperiodické orbity.

$$\text{mLCE}\begin{cases} > 0 & \textbf{chaotická trajektorie} \\ = 0 & \textbf{regulární trajektorie} \end{cases}$$

Periodická orbita může mít také nenulový mLCE. Není chaotická, ale jen nestabilní, protože v jejím okolí dochází k exponenciální divergenci orbit. Míra periodických orbit v chaotickém prostoru je obecně nula, proto není pravděpodobné, že bychom na nějaké při studiu fázového prostoru narazili.

Každá neperiodická orbita z dané chaotické oblasti je v ní hustá. Chaotická oblast je tak vyplněna orbitami se stejným mLCE.

Maximálním Lyapunovovým exponentem χ lze zavést Lyapunovův čas

$$t_L = \frac{1}{\chi}.$$

Jedná se o čas, po kterém se blízké orbity rozejdou o vektor velikosti e a po kterém se systém začne chovat chaoticky (pozorujeme exponenciální rozchod blízkých orbit).

1.2.4 Výpočet maximálního Lyapunovova exponentu

Výpočet Lyapunovova exponentu náhodného vektoru z $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$ pomocí vztahu (1.28) vede na výpočet mLCE, jak jsme ukázali v předchozí části textu. V praxi řešíme (1.28) numericky. V tomto tvaru však není ideální pro numerický výpočet, protože případný exponenciální růst argumentu logaritmu může způsobovat potíže. Problém vyřešíme tak, že vektor budeme vyvíjet po menších krocích τ.

Při výpočtu mLCE provádíme limitu výrazu

$$X(t) = \frac{1}{t} \ln \frac{||d_{\mathbf{x}(0)}\Phi^t \mathbf{w}(0)||}{||\mathbf{w}(0)||}$$

Výpočet pro časový interval t provedeme po krocích τ. Postupně tak budeme vyvíjet trajektorii i deviační vektor z tečného prostoru. Pokud $t = k\tau$, budeme pracovat se zobrazeními

$$\begin{aligned} \Phi^t &= \Phi^{k\tau} = \Phi^\tau \circ \cdots \circ \Phi^\tau \\ d_{\mathbf{x}(0)}\Phi^t &= d_{\mathbf{x}((k-1)\tau)}\Phi^\tau \circ \cdots \circ d_{\mathbf{x}(\tau)}\Phi^\tau \circ d_{\mathbf{x}(0)}\Phi^\tau. \end{aligned}$$

Pak můžeme psát

$$\begin{aligned} X(t) = \frac{1}{t} \ln \frac{||d_{\mathbf{x}(0)}\Phi^t \mathbf{w}(0)||}{||\mathbf{w}(0)||} &= \frac{1}{k\tau} \ln \frac{||\mathbf{w}(k\tau)||}{||\mathbf{w}((k-1)\tau)||} \cdots \frac{||\mathbf{w}(\tau)||}{||\mathbf{w}(0)||} \\ &= \frac{1}{k\tau} \sum_{i=1}^{k} \ln \frac{||\mathbf{w}(i\tau)||}{||\mathbf{w}((i-1)\tau)||}, \end{aligned}$$

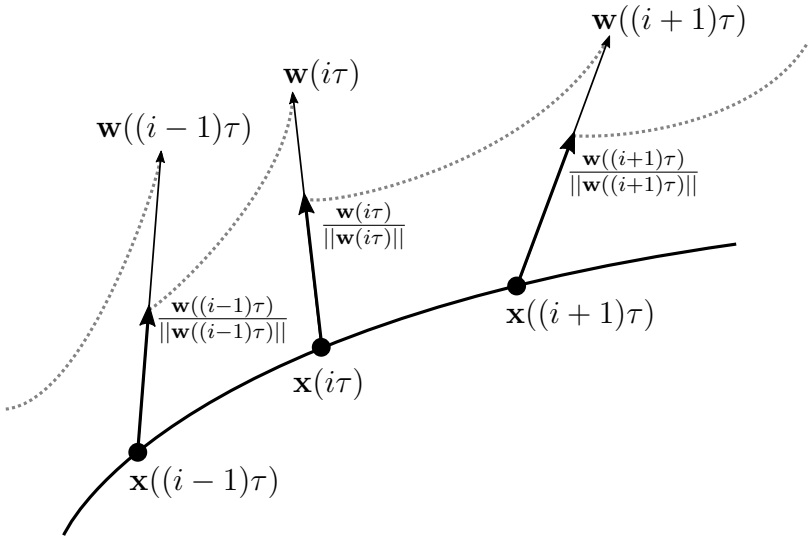
kde

$$||\mathbf{w}(i\tau)|| = ||d_{\mathbf{x}((i-1)\tau)}\Phi^\tau \mathbf{w}((i-1)\tau)||.$$

Maximální Lyapunovův exponent tak spočítáme jako

$$\chi = \lim_{k\to\infty} X(k\tau) = \lim_{k\to\infty} \frac{1}{k\tau} \sum_{i=1}^{k} \ln \left|\left| d_{\mathbf{x}((i-1)\tau)} \Phi^{\tau} \left(\frac{\mathbf{w}((i-1)\tau)}{||\mathbf{w}((i-1)\tau)||} \right) \right|\right| \tag{1.30}$$

Tento vztah nám říká, že pro výpočet mLCE nemusíme vyvinout vektor z počátečního bodu do nekonečného času a tam se dívat na jeho normu. Stejný výsledek dostaneme jako součet nekonečné řady. V daném bodě $\mathbf{x}((i-1)\tau)$ (obr. 1.5) vyvineme jednotkový tečný vektor do tečného prostoru bodu $\mathbf{x}(i\tau)$. Logaritmus normy zobrazeného vektoru je i-tým členem nekonečné řady mLCE. Vektor znovu nanormujeme na jednotku a postup opakujeme. Numerický výpočet nám nedovoluje provést nekonečný počet kroků. Nakonec tedy počítáme *Lyapunovův exponent v konečném čase*, který slouží jen jako odhad skutečné hodnoty Lyapunovova exponentu. Pro krátké časy součet řady osciluje a běžně až po nějakém čase začíná konvergovat k předpokládané hodnotě Lyapunovova exponentu. o tom ale více v sekci 2.2.1, kde numerický výpočet implementujeme.



Obrázek 1.5: Znázornění výpočtu mLCE pomocí řady. Z bodu $\mathbf{x}((i-1)\tau)$ je vyvíjen jednotkový vektor $\mathbf{w}((i-1)\tau)/||\mathbf{w}((i-1)\tau)||$ do bodu $\mathbf{x}(i\tau)$. Logaritmus normy obrazu vektoru je i-tým členem nekonečné řady mLCE. Vektor znovu nanormujeme a postup opakujeme do dalšího bodu vzdáleného o čas τ.

1.2.5 Poincarého řez

Výstupem studia chaosu v daném systému může být hodnota Lyapunovova exponentu chaotických oblastí, případně poměr objemu chaotických oblastí a objemu celé energetické nadplochy, na které leží. Kromě těchto čísel bychom si chtěli často mnohorozměrný fázový prostor s chaotickými strukturami prohlédnout. K tomu slouží *Poincarého řezy*. Jedná se o dvourozměrný řez fázovým prostorem, který jsme si tak schopní prohlédnout na papíře, což bude ostatně ukázáno i v této práci.

Na Poincarého řezu pozorujeme obvykle body, jež jsou průnikem orbit na fázovém prostoru s danou plochou řezu. Orbita může plochu řezu protnou i vícekrát.

Každému bodu jsme schopni přiřadit množinu bodů z řezu na jeho trajektorii vývoje. Pokud se s tímto zobrazením omezíme jen na rovinu řezu, získáme diskrétní zobrazení po konečných krocích. Dostáváme tak chaotickou mapu, o které jsme mluvili v úvodu.

Podstatné je, že i na tomto řezu rozpoznáme regulární a chaotické orbity. Zatímco body regulárních orbit tvoří uzavřené obrazce, body příslušející chaotickým neperiodickým orbitám se zdají být rozmístěny nahodile. To je způsobeno tím, že takové trajektorie jsou husté v dané chaotické oblasti. Pro větší informační hodnotu můžeme při vykreslení barevně označit body dle hodnoty Lyapunovova expenentu jejich trajektorie.

Správnou projekci chaotické struktury však dostáváme jen uřezů fázových prostorů systémů se dvěma stupni volnosti, což je ostatně i náš případ. U dvourozměrných řezů vícerozměrnými prostory dochází k překrytí chaotických a regulárních oblastí po projekci na rovinu, čímž se ztrácí požadovaná informace o chaotické struktuře.

2. Studium modelu

Náplní této práce je studium chaosu v modelu jednoduchých vibrací s kvantovým hamiltoniánem ze vztahu (1.17). Ten je tvořen Casimírovými operátory algeber $u(2)$ a $o(3)$. Takový hamiltonián komutuje s operátorem $\hat{l}$, který tvoří podalgebru $o(2)$ obou zmíněných algeber. v systému se tak zachovává jedna složka momentu hybnosti, což z něj společně se zachováním energie dělá systém integrabilní. Abychom mohli studovat chaos, musíme integrabilitu narušit.

To provedeme pomocí nově zavedených dipolóvých operátorů $\hat{D}_x$ a $\hat{D}_y$, které zadefinujeme původními dipólovými operátory ze vztahu (1.14) jako

$$\hat{D}_\pm = \hat{D}_x \pm i\hat{D}_y, \tag{2.1}$$

$$\hat{D}_x = \frac{1}{2}(\hat{D}_+ + \hat{D}_-), \qquad \hat{D}_y = \frac{-i}{2}(\hat{D}_+ - \hat{D}_-). \tag{2.2}$$

Přidání těchto operátorů k hamiltoniánu odpovídá působení vnějšího pole ve směru osy x, resp. y. Například interakci obecného systému s elektrickým polem s elektrickou intenzitou $\mathcal{E}$ lze popsat přidáním členu

$$-\hat{\mathbf{D}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}$$

k původnímu hamiltoniánu, kde $\hat{\mathbf{D}}$ je dipólový operátor. Pokud směřuje elektrické pole např. ve směru osy x, $\boldsymbol{\mathcal{E}} = (\mathcal{E},0,0)$, interakční člen s elektrickým polem v hamiltoniánu má tvar

$$-\mathcal{E}\hat{D}_x.$$

Volíme obecnější tvar hamiltoniánu, který budeme studovat po zbytek této práce, ve tvaru

$$\hat{H} = A\hat{n} + \frac{B}{(N-1)}\hat{W}^2 + C\hat{D}_x. \tag{2.3}$$

Reálné konstanty A,B,C určují vlastnosti systému. Poměr A/B udává v původním modelu Iachella a Osse přechod mezi situacemi na obrázcích 1.1a a 1.1b a konstanta C udává míru poruchy (intenzitu vnějšího pole). Pro $C = 0$ je systém plně integrabilní, a tedy nechaotický.

Nejprve provedeme klasickou limitu tohoto hamiltoniánu a poté se pustíme do studia chaosu, jeho míry v systému, a struktur, které vytvořil na fázovém prostoru.

2.1 Provedení klasické limity

Od operátorů $\hat{n}, \hat{W}^2$ a $\hat{D}_x$ přejdeme k vyjádření hamiltoniánu pomocí dvou sad kanonicky sdružených poloh q_i a hybností p_i dle tabulky 1.1. k transformaci použijeme vyjádření operátorů pomocí kartézských operátorů $\hat{\tau}_x$, $\hat{\tau}_y$ a skalárního operátoru $\hat{\sigma}$

$$\hat{n} = \hat{\tau}_x^\dagger \hat{\tau}_x + \hat{\tau}_y^\dagger \hat{\tau}_y,$$
$$\hat{W}^2 = \left[i(\hat{\tau}_x^\dagger \hat{\sigma} + \hat{\sigma}^\dagger \hat{\tau}_x) \right]^2 + \left[i(\hat{\tau}_y^\dagger \hat{\sigma} - \hat{\sigma}^\dagger \hat{\tau}_y) \right]^2 + \left[i(\hat{\tau}_y^\dagger \hat{\tau}_x - \hat{\tau}_x^\dagger \hat{\tau}_y) \right]^2,$$
$$\hat{D}_x = i(\hat{\tau}_y^\dagger \hat{\sigma} - \hat{\sigma}^\dagger \hat{\tau}_y).$$

Nyní provedeme klasickou limitu dle tabulky 1.1 s označením operátorů

$$\{\hat{\sigma},\hat{\tau}_x,\hat{\tau}_y\} \to \{\hat{b}_0,\hat{b}_x,\hat{b}_y\}.$$

Dostáváme tak vyjádření pomocí dvou sad $\{q_x,p_x\}$ a $\{q_y,p_y\}$ kanonicky sdružených poloh a hybností

$$\begin{aligned}
\hat{n} &\to \frac{N}{2} \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2), \\
\hat{W}^2 &\to N^2(p_x^2 + p_y^2)\left(2 - \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2)\right) + N^2(p_y q_x - q_y p_x)^2, \\
\hat{D}_x &\to \sqrt{2} N p_y \sqrt{2 - \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2)}.
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Klasická limita odpovídá velkému počtu částic $N \to \infty$. Nebudeme proto určovat energii celého systému N vibronů, která diverguje, ale omezíme se na energii jedné částice H/N. Dostáváme tak klasický hamiltonián H_{cl}

$$\begin{aligned}
\frac{H}{N} = H_{\mathrm{cl}} = A\left[\sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2) \right] + B\Bigg[(p_x^2 + p_y^2)\left(2 - \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2)\right) \\
+ (p_y q_x - q_y p_x)^2 \Bigg] + C\left[p_y \sqrt{2 - \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2)} \right].
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Nyní už můžeme přistoupit ke studiu chaosu, počítání Lyapunovových exponentů a vykreslování Poincarého řezů. k tomu si již nevystačíme s analytickými metodami, ale využijeme těch numerických.

2.2 Numerické techniky

Většina výpočtů byla provedena pomocí programovacího jazyka *Julia* (viz (The Julia)). Ta nabízí v současné době jeden z nejpokročilejších nástrojů na řešení soustav diferenciálních rovnic a numerickou integraci v podobě knihovny *DifferentialEquations.jl* (viz (DifferentialEquations.jl)). Tu využijeme k řešení pohybových rovnic a evoluční rovnice deviačního vektoru pro napočítání Lyapunovova exponentu trajektorií. Použité metody nyní ve stručnosti předvedeme.

2.2.1 Numerický výpočet Lyapunovova exponentu

Jak už bylo řečeno v teoretické sekci (Výpočet maximálního Lyapunovova exponentu), při numerickém výpočtu počítáme jen odhad Lyapunovova exponentu do určitého času. My výpočet ukončíme, pokud už se hodnota exponentu nebude rychle měnit, tedy pokud poměr odchylky $\Delta\chi$ a střední hodnoty $\langle\chi\rangle$ souboru

l hodnot Lyapunovových exponentů vypočítaných v posledních l krocích bude menší než zvolená hodnota Δ

$$\frac{\Delta\chi}{\langle\chi\rangle} \leq \Delta.$$

Samotný výpočet je pak jen implementací postupu ze sekce (Výpočet maximálního Lyapunovova exponentu) a vztahu (1.30). Shrnut je v následující tabulce.

Tabulka 2.1: Algoritmus pro numerický výpočet Lyapunovova exponentu.

Vstup	• Evoluční rovnice (1.23) a (1.25) dané hamiltoniánem H_{cl} (vektor jeho prvních derivací $\mathbf{DH}(\mathbf{x})$ a matice druhých $\mathbf{D^2H}(\mathbf{x})$) • Vybraná trajektorie, jejíž Lyapunovův exponent chceme určit, zadaná vektorem počátečních podmínek $\mathbf{x}(0)$ • Náhodný počáteční jednotkový deviační vektor $\mathbf{w}(0)$ • Zvolené Δ pro ukončení výpočtu.
Krok 1	v bodě $\mathbf{x}(k\tau)$ s jednotkovým vektorem $\mathbf{w}(k\tau)$ napočítáme $\mathbf{DH}(\mathbf{x}(k\tau))$ a $\mathbf{D^2H}(\mathbf{x}(k\tau))$. Numericky zintegrujeme vztahy (1.23) a (1.25), čímž se dostaneme do nového bodu $\mathbf{x}((k+1)\tau)$ s deviačním vektorem $\mathbf{w}((k+1)\tau)$. Délku kroku τ volíme dle požadované přesnosti, případně podle integrační metody.
Krok 2	Vypočteme $k+1$ člen řady Lyapunovova exponentu $$\ln \|\|\mathbf{w}((k+1)\tau)\|\|.$$ Přičteme jej k řadě $$\chi_{k+1} = \left[\chi_k k\tau + \ln \|\|\mathbf{w}((k+1)\tau)\|\|\right]\frac{1}{(k+1)\tau}$$
Krok 3	Pokud má řada dostatek členů $k+1 > l$, spočítáme odchylku $\Delta\chi$ a střední hodnotu $\langle\chi\rangle$ posledních l součtů χ_i řady. Pokud $$\frac{\Delta\chi}{\langle\chi\rangle} \leq \Delta,$$ výpočet ukončíme. Jinak postupujeme opět od kroku 1.
Krok 4	Výstupem je Lyapunovův exponent χ_t v čase t.

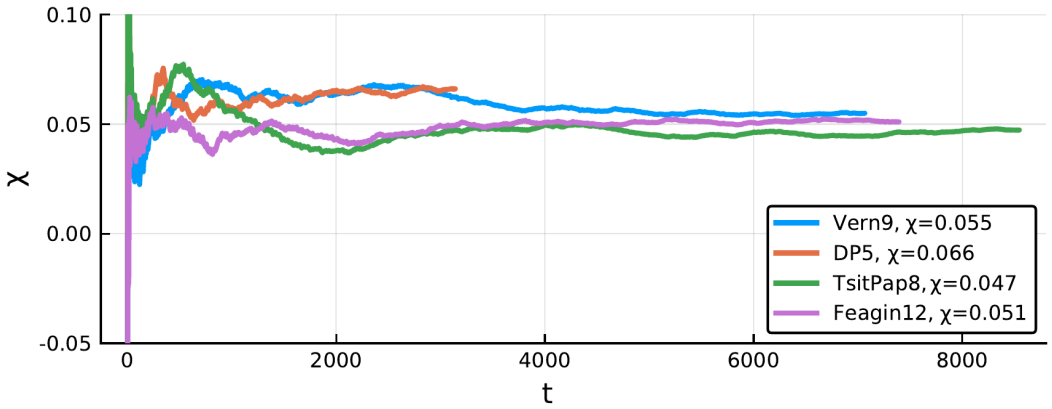
Výsledná hodnota konečného Lyapunovova exponentu dáné trajektorii se tak bude lišit podle času t, ve kterém bude výpočet ukončen. Dále se ukazuje, že

podstatnou roli hraje i metoda použitá pro numerickou integraci. Knihovna *DifferentialEquations.jl* jich nabízí opravdu širokou škálu. Pro ukázku jsme vybrali čtyři metody. Jedná se o Rungeovy-Kuttovy metody s adaptivním krokem, což znamená, že krok τ není konstantní. Číslo v jejich názvu pak udává řád metody (viz (ODE Solvers)). Testovat je budeme na populárním chaotickém Hénonově-Heilesově hamiltoniánu

$$H_{\text{Hénon-Heiles}} = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \left(x^2 y - \frac{y^3}{3}\right).$$

Jedná se o detailně prostudovaný systém, na kterém jsme schopni ověřit správnost numerických výpočtů integračních metod.

Napočítaný Lyapunovův exponent pro chaotickou trajektorii s počátečními podmínkami $\mathbf{x} = (x; y; p_x; p_y) = (0; 0; 0{,}35; 0{,}35)$ vybranými metodami je na obrázku 2.1



Obrázek 2.1: Konečný Lyapunovův exponent χ v čase t orbity Hénonova-Heilesova hamiltoniánu s počátečními podmínkami $\mathbf{x} = (0; 0; 0{,}35; 0{,}35)$. Exponent byl určen postupně čtyřmi integračními metodami *Vern9, DP5, TsitPap8* a *Feagin12*. Parametry pro ukončení výpočtu byly voleny $l = 400$, $\Delta = 10^{-7}$. Uveden je i výsledný exponent χ určený danou metodou.

Hodnoty Lyapunovova exponentu určené různými metodami se tak liší hodnotou, průběhem i časem, ve kterém byl výpočet ukončen. K rozhodnutí o tom, která z metod dává nejlepší odhad skutečné hodnoty využijeme srovnání Poincarého řezů napočítaných těmito metodami[1]. Ty jsou na obrázcích 2.2.

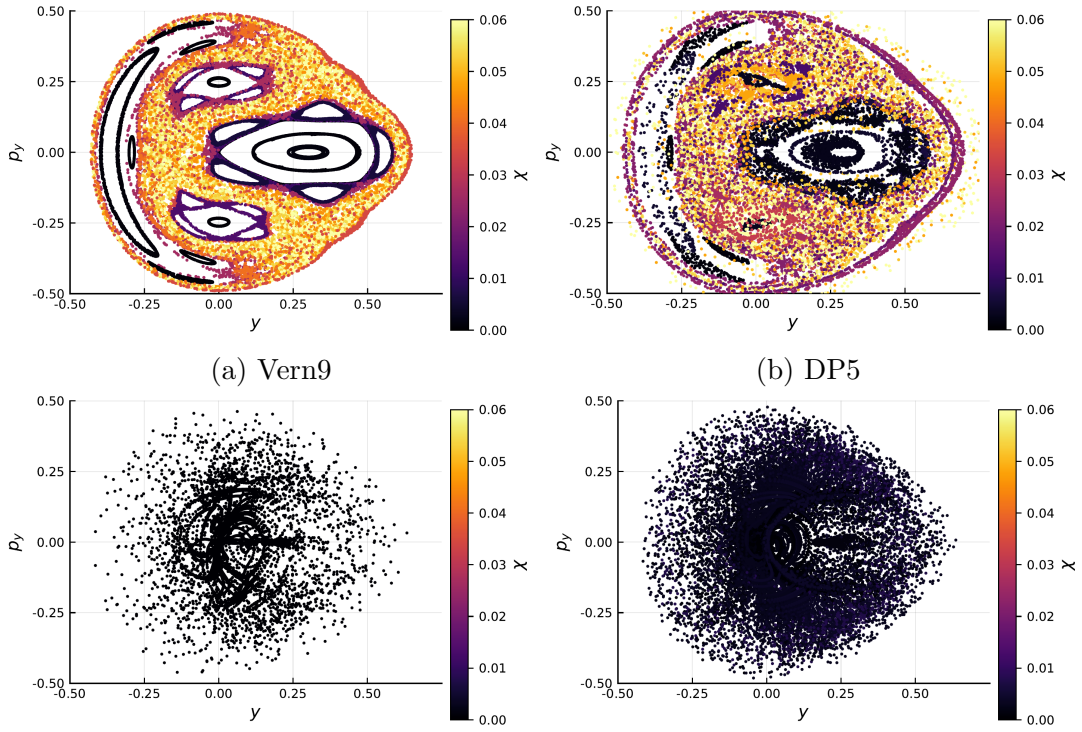
Byť se jedná o stejné řezy fázovým prostorem, různé metody dávají naprosto odlišné výsledky. Nejlepší odhad jsme získali metodou *Vern9*, což dokazuje i srovnání s výsledky z jiných prací (např. Poincarého řezy v (Zotos, 2015)).

Na obrázku 2.2a vidíme předpokládanou strukturu řezu. Body regulárních trajektorií s nulovým Lyapunuvovým exponentem tvoří uzavřené křivky, nebo izolované body (množiny míry nula na ploše řezu), zatímco chaotické body vyplňují zbylý prostor bez zjevného pravidla. Body v chaotické oblasti mají téměř

[1]Viz (ODE Solvers).
Verne9 - Vernova „nejefektivnější“ Runge-Kutta 9. řádu
DP5 - Dormandova-Princova Runge-Kutta 5. řádu
TsitPap8 - Tsitourasova-Papakostasova Runge-Kutta 8. řádu
Feagin12 - Feaginova Runge-Kutta 12. řádu

stejnou hodnotu Lyapunovova exponentu. Mírné odchylky jsou způsobeny tím, že počítáme jeho hodnotu v konečném čase a hodnota každé trajektorie konverguje s různou rychlostí. Zajímavé jsou oblasti, kde se stýkají regulární a chaotické oblasti. Lyapunovův exponent není nulový, ale je nižší než hodnota v chaotické oblasti. To je opět důsledek numerické integrace, kdy normu deviačního vektoru $\mathbf{w}$ nepočítáme v příslušném bodě $\mathbf{x}$ dané trajektorie, ale v nějakém blízkém bodě $\mathbf{x} + \delta$ kvůli numerické nepřesnosti. v prostoru mezi regulární a chaotickou oblastí tak při výpočtu exponentu „přeskakujeme“ mezi regulárními a chaotickými orbitami. To lze omezit například snížením parametru Δ nebo integračního kroku τ. S tím je však spojeno zvýšení časové náročnosti výpočtu. Přesto se tohoto efektu nelze zbavit. Přechod mezi chaotickou a regulární oblastí je totiž tvořen fraktální strukturou, kde se tyto své oblasti vzájemně proplétají.

Metoda *Vern9* má dobrý poměr kvality výpočtu a jeho časové náročnosti (srovnání s dalšími metodami z *Differential equations.jl* zde již neuvádíme), a proto ji budeme používat pro další výpočty. Pro možnou reprodukci výsledků z celé práce uvádíme hodnoty dalších parametrů integrační metody, které ovlivňují délku integračního kroku a udávají relativní a absolutní toleranci: `reltol` $= 10^{-10}$, `abstol` $= 10^{-10}$.



(a) Vern9

(b) DP5

(c) TsitPap8

(d) Feagin12

Obrázek 2.2: Poincarého řezy energetické nadplochy $E = 0{,}1225$ fázového prostoru Hénonova-Heilesova hamiltoniánu rovinou $x = 0$. Řezy byly napočítány metodami *Verne9, DP5, TsitPap8* a *Feagin12*. Parametry pro ukončení výpočtu byly voleny $l = 400$, $\Delta = 10^{-6}$. Hodnota Lyapunovova exponentu χ je vyznačena barevnou škálou.

2.2.2 Provedení Poincarého řezu

Vrátíme se ještě v výpočtům Poincarého řezů. Vibronový i Hénonův-Heilesův hamiltonián z minulé sekce určují čtyřrozměrný fázový prostor. Poincarého řez je pak typicky určen energetickou nadplochou $H_{\text{cl}} = E$ a volbou roviny ve fázovém prostoru. Například na obrázku 2.2a byla volena $x = 0$.

Volba energetické nadplochy a roviny řezu určuje na fázovém prostoru dvourozměrnou plochu a my si vybereme, jakou její projekci zobrazíme. na obrázku 2.2a jsme volili projekci do roviny yp_y. Jelikož se v hamiltoniánu $H_{\text{Hénon-Heiles}}$ nachází hybnost p_x ve druhé mocnině, v Poincarého řezu zobrazujeme jen jednu větev řešení. na již zmíněném obrázku jsme zobrazovali jen body s $p_x \geq 0$. Jedná se tedy skutečně o pohled na dvourozměrnou plochu umístěnou ve trojrozměrném prostoru.

Vibronový hamiltonián je však mnohem složitější, a vytváří tak na fázovém prostoru komplikovanější struktury. Hamiltonián jako funkce jedné vybrané proměnné může mít až čtyři kořeny. U Poincarého řezů v těchto oblastech tak nestačí brát kladnou, nebo zápornou hybnost, ale musíme se omezit na konkrétní větev řešení třetí souřadnice (např. maximální p_x, minimální kladná p_x, maximální záporná p_x a minimální p_x). v řezech uvedených v této praxi jsme vybrali vždy maximální hodnotu třetí souřadnice.

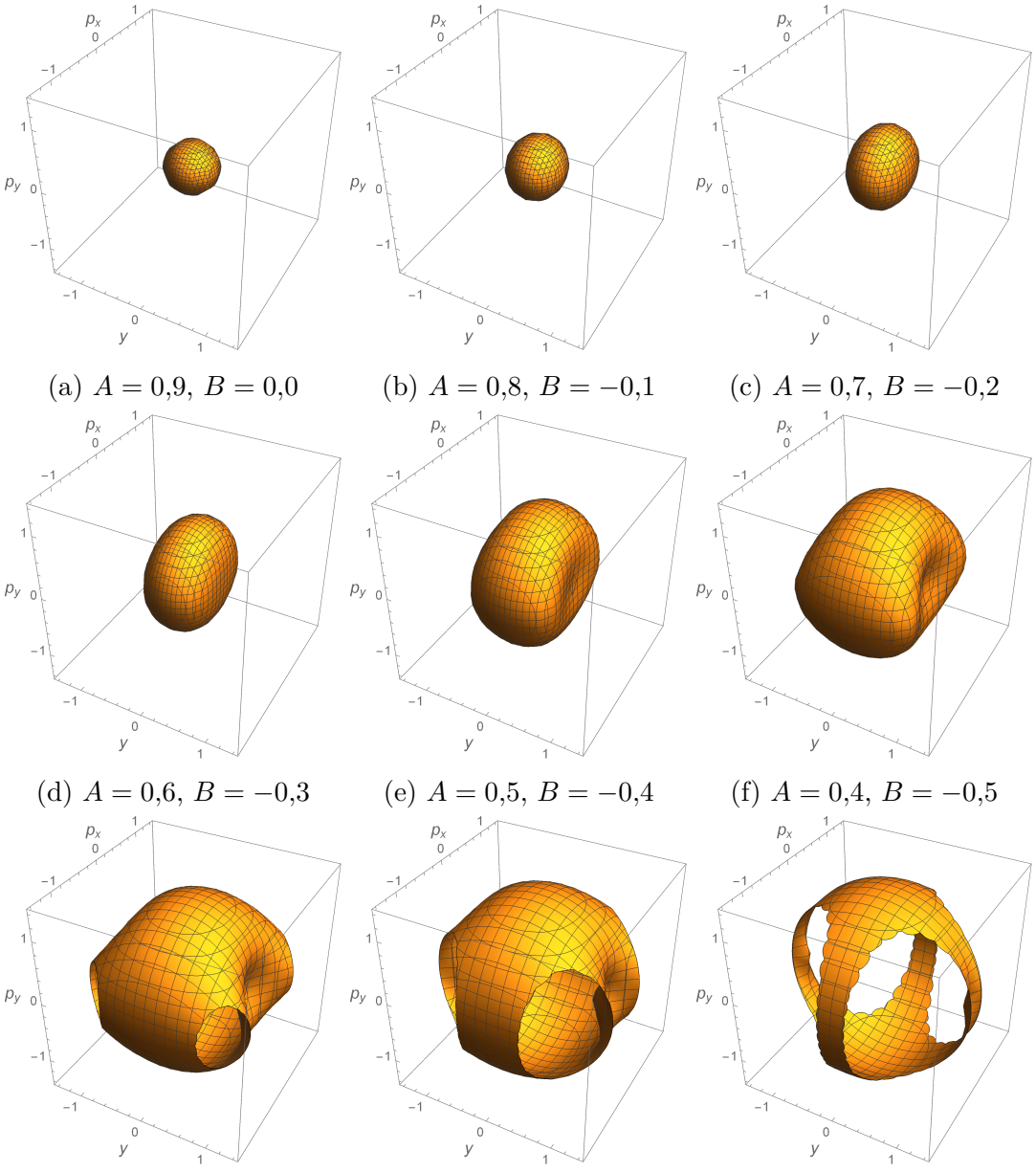
Počáteční podmínky vyvíjených trajektorií jsou rovnoměrně rozdělené body na kartézské síti daného řezu. Celkový počet se odvíjí od tvaru konkrétního řezu. na dále uvedených Poicarého řezech bylo vyvíjeno vždy 200 až 300 trajektorií.

Tyto struktury ve fázovém prostoru nyní trochu více prozkoumáme.

2.3 Struktura fázového prostoru

Podstatnou vlastností fázového prostoru určeného hamiltoniánem (2.5) je jeho konečnost. Tvoří čtyřrozměrnou kouli o poloměru $\sqrt{2}$, což plyne z podmínky

$$\sqrt{2 - \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2)} \in \mathbb{R}.$$



(a) $A = 0{,}9$, $B = 0{,}0$ (b) $A = 0{,}8$, $B = -0{,}1$ (c) $A = 0{,}7$, $B = -0{,}2$

(d) $A = 0{,}6$, $B = -0{,}3$ (e) $A = 0{,}5$, $B = -0{,}4$ (f) $A = 0{,}4$, $B = -0{,}5$

(g) $A = 0{,}3$, $B = -0{,}6$ (h) $A = 0{,}2$, $B = -0{,}7$ (i) $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$

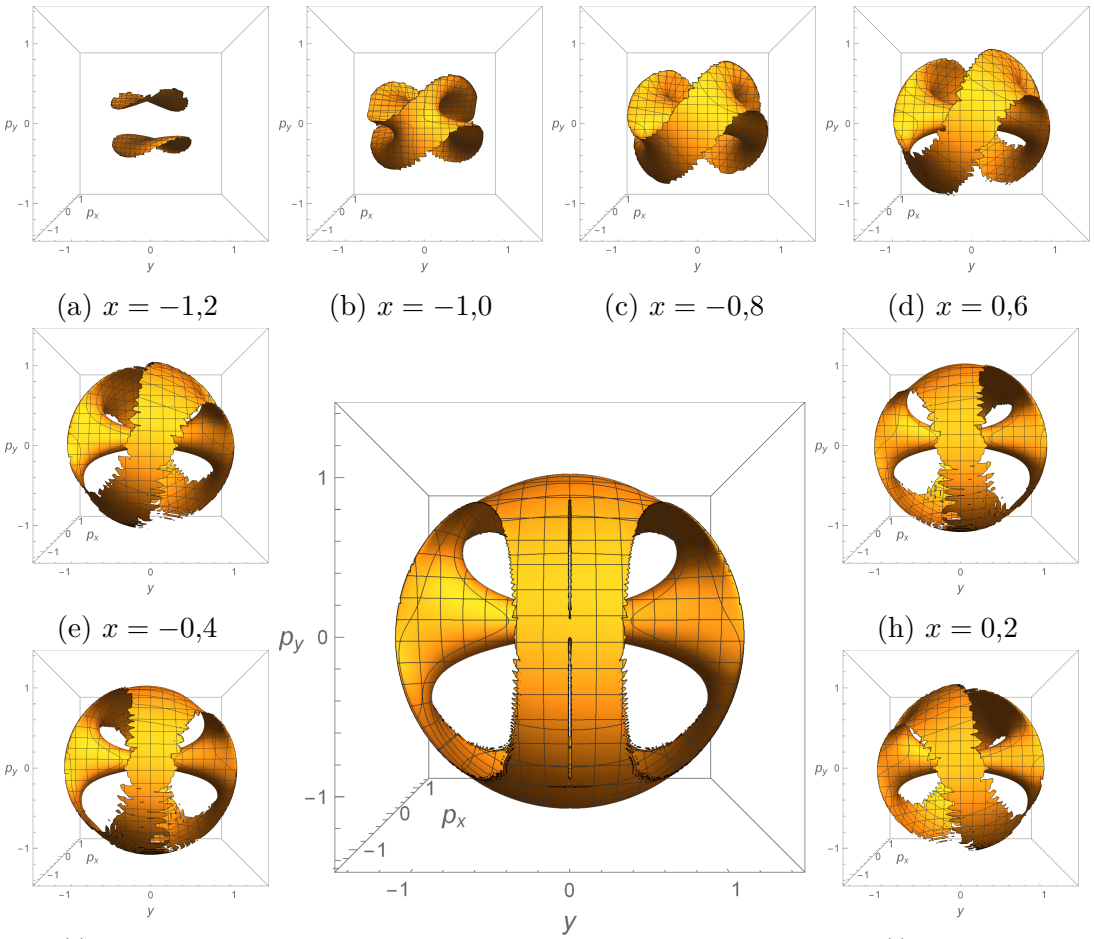
Obrázek 2.3: Řezy $x = 0$, $E = 0$ fázovými prostory hamiltoniánů s proměnnými parametry A a B s nulovou poruchou $C = 0$ (vztah 2.5).

Fázový prostor si budeme chtít „prohlédnout“ pomocí dvourozměrných řezů, pro které bude možné napočítat i Poincarého řezy. Volbou energetické nadplochy $H_{\mathrm{cl}} = E$ a konstantní souřadnice na fázovém prostoru vybereme dvourozměrnou plochu řezu. Tvar této plochy je závislý na energii, zvolené souřadnici, ale i hamiltoniánu. Hamiltonián je tvořen třemi základními členy s konstantami A, B (tvar molekuly - viz obrázky 1.1a a 1.1b) a C (síla poruchy), jejichž volba mění tvar řezu.

Na obrázku 2.3 je znázorněna změna řezu $E = 0$, $x = 0$ bez poruchy $C = 0$ při změně parametrů A a B tak, aby $A - B = 0{,}9$. Konstanta B je volena záporně, aby odpovídala původně navrženému tvaru hamiltoniánu Iachellem a Ossem ve vztahu (1.17).

Parametry A a B nyní zafixujeme na hodnotách $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$ a po-

díváme se, jak bude na tvar řezu působit změna souřadnice x a síly poruchy. Uvádíme zde jen řezy $x = konst$. Při volbě jiné konstantní souřadnice je tvar i chování řezů při změnách parametrů podobné.



(a) $x = -1{,}2$ (b) $x = -1{,}0$ (c) $x = -0{,}8$ (d) $x = 0{,}6$

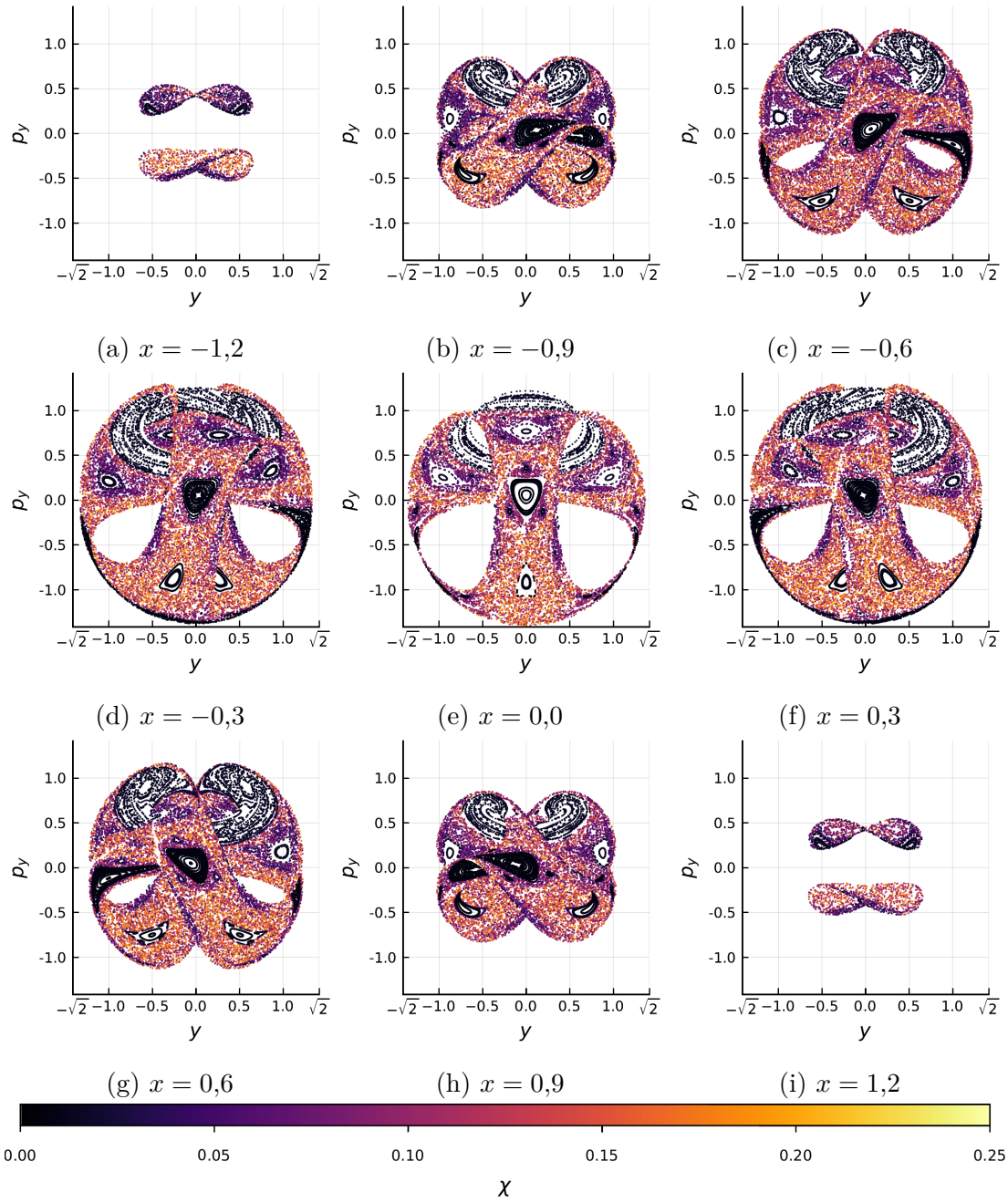
(e) $x = -0{,}4$ (h) $x = 0{,}2$

(f) $x = -0{,}2$ (g) $x = 0{,}0$ (i) $x = 0{,}4$

(j) $x = 0{,}6$ (k) $x = 0{,}8$ (l) $x = 1{,}0$ (m) $x = 1{,}2$

Obrázek 2.4: Řezy fázovým prostorem hamiltoniánu s konstantami $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$ a $C = 0{,}25$ na energii $E = 0$. Hodnoty x jsou voleny v intervalu $\langle -\sqrt{2}, \sqrt{2} \rangle$. Rozštěpí okrajů ploch je numerickým artefaktem vykreslovacího programu.

Na obrázku 2.4 je ukázáno, jak se mění tvar řezu při změně souřadnice x. Zdá se, že všechny řezy získáme jen zkroucením plochy řezu $x = 0$. Stejné chování vykazuje i jejich chaotická struktura, jak je vidět na obrázku 2.5.

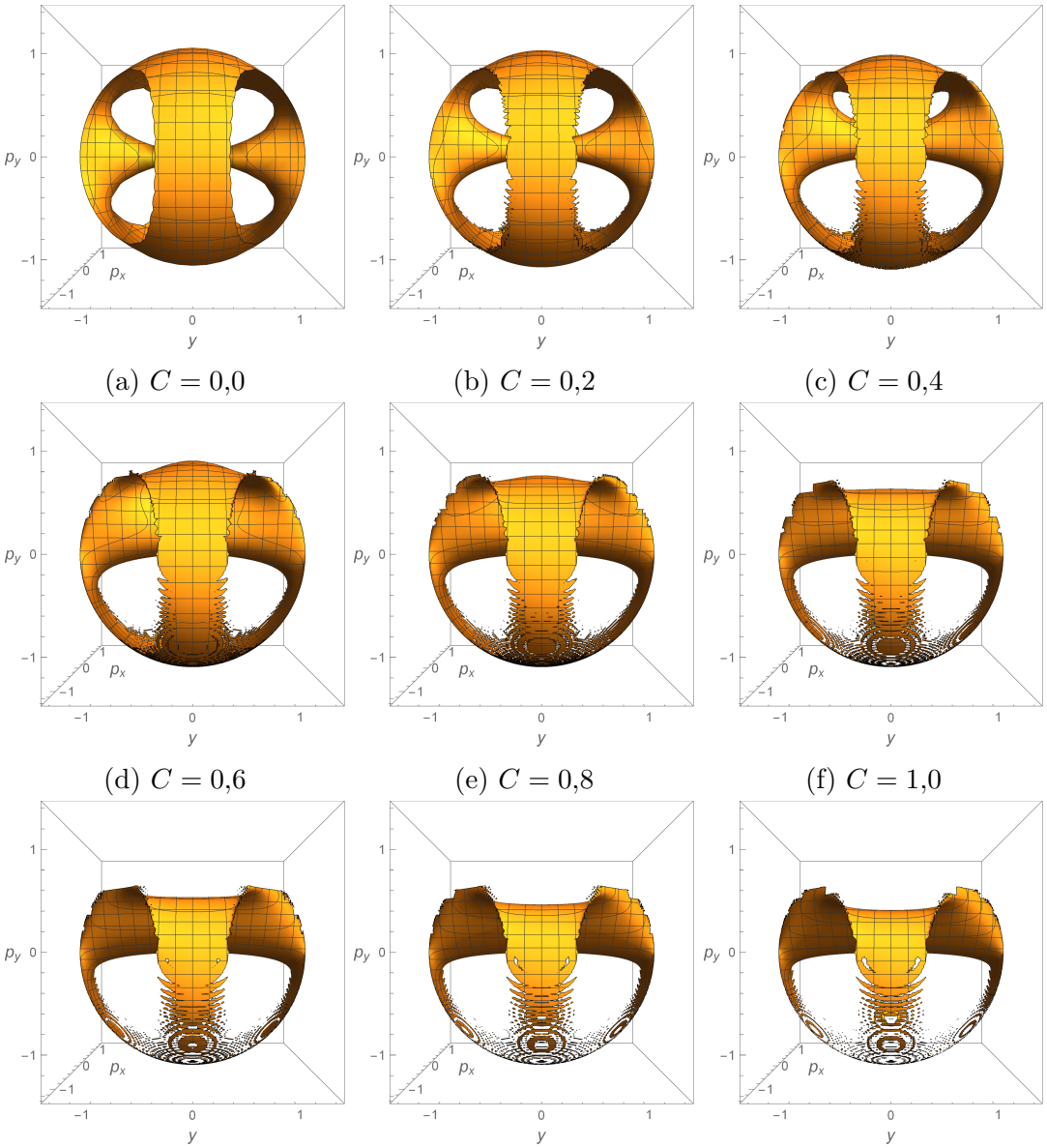


Obrázek 2.5: Poincarého řezy fázovým prostorem hamiltoniánu s konstantami $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$ a $C = 0{,}25$ na energii $E = 0$. Hodnoty x jsou voleny v intervalu $\langle -\sqrt{2}, \sqrt{2} \rangle$. Lyapunovův exponent χ trajektorií je vyznačen barevnou škálou.

Získáváme tak představu o tom, jak vypadá chaotická struktura na trojrozměrné energetické nadploše. Dvourozměrná nadplocha řezu nulové hodnoty souřadnice s (s může být obecně x, y, p_x, nebo p_y; na obrázcích za s volíme x) je podél této souřadnice na intervalu $\langle -\sqrt{2}, \sqrt{2} \rangle$ zkroucena. To je docela nadějná představa. Pro dobrý odhad poměru chaotického a celkového objemu dané energetické nadplochy by nám totiž stačilo určit poměr chaotické a celkové plochy jednoho z jejích řezů. Tím se ale budeme zabývat až v další kapitole. Nyní se ještě vrátíme k obrázkům.

Vliv síly poruchy na tvar řezu je zachycen na obrázku 2.6. Původně syme-

trická plocha je postupně deformována. na obrázku 2.7 jsou uvedeny příslušné Poincarého řezy. Bez poruchy (obr. 2.6a) je systém nechaotický a vidíme jen pravidelné regulární trajektorie. s rostoucí poruchou roste a následně klesá hodnota Lyapunovova exponentu chaotických oblastí i obsah chaotické plochy. Tyto dva procesy však probíhají odděleně a maxim nenabývají při stejné síle poruchy. Největší chaotickou plochu vidíme na obrázku 2.7b, zatímco nejvyšších hodnot nabývá χ na obrázku 2.7f.

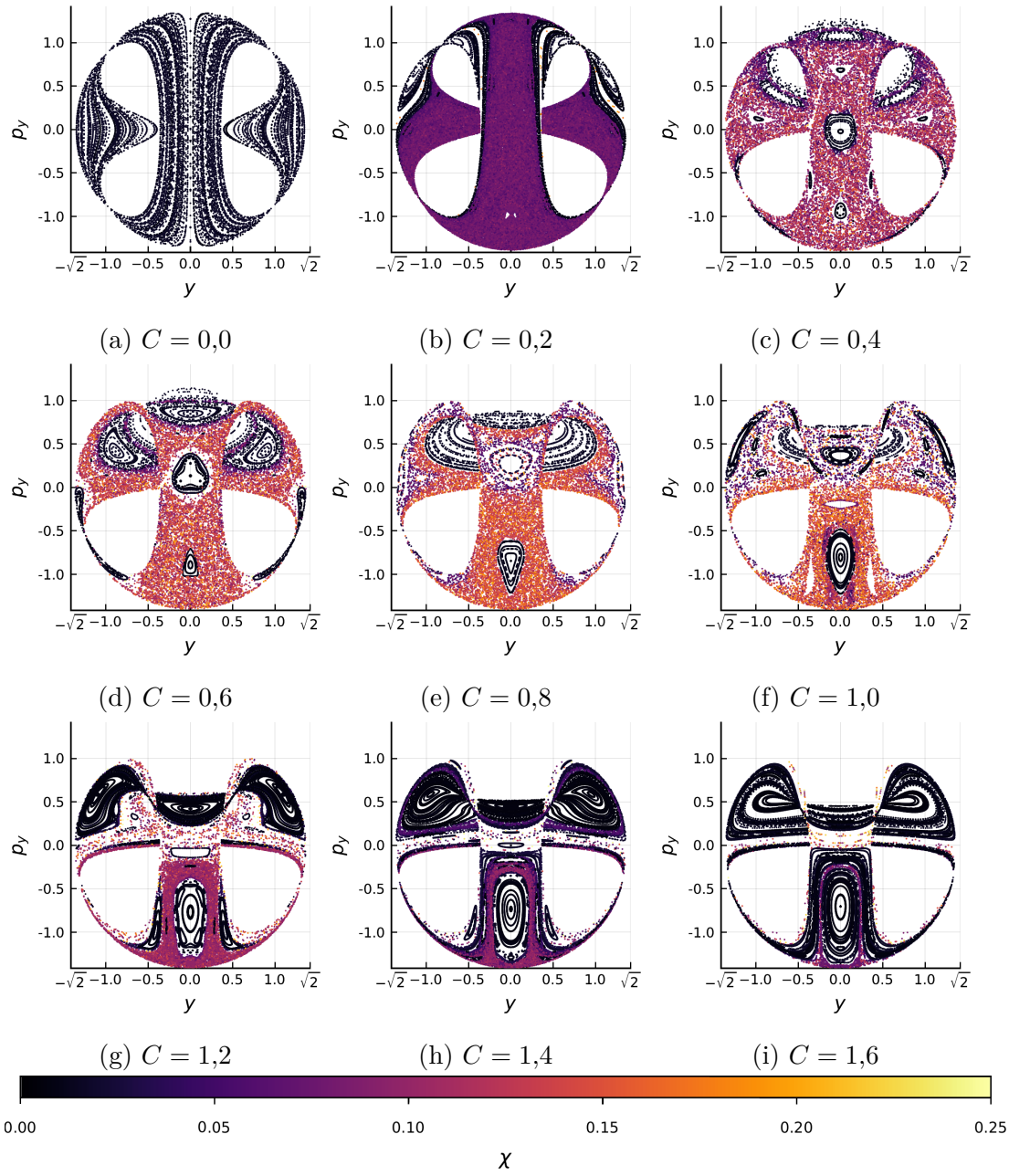


(a) $C = 0{,}0$ (b) $C = 0{,}2$ (c) $C = 0{,}4$

(d) $C = 0{,}6$ (e) $C = 0{,}8$ (f) $C = 1{,}0$

(g) $C = 1{,}2$ (h) $C = 1{,}4$ (i) $C = 1{,}6$

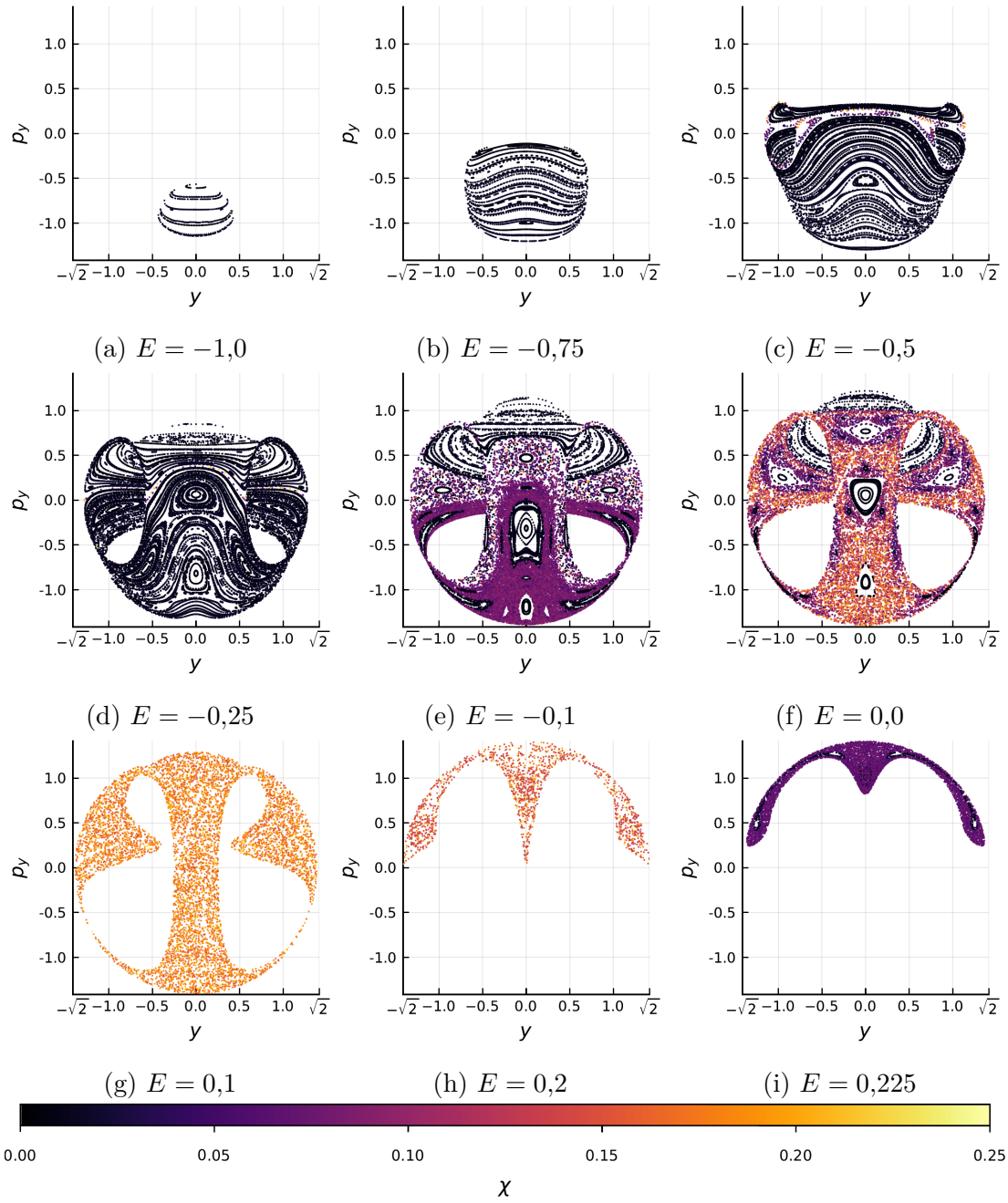
Obrázek 2.6: Řezy $E = 0$, $x = 0$ fázovým prostorem hamiltoniánu s konstantami $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$. Postupně roste síla poruchy C. Rozštěpí okrajů ploch je numerickým artefaktem vykreslovacího programu.



Obrázek 2.7: Poincarého řezy $E = 0$, $x = 0$ fázovým prostorem hamiltoniánu s konstantami $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$. Postupně roste síla poruchy C. Lyapunovův exponent χ trajektorií je vyznačen barevnou škálou.

Nárůst a následný pokles chaosu představují očekávané chování systémů. Dochází k němu nejen při zesilování poruchy, ale také při zvýšení energie. Analogii nabízí typický chaotický systém, jakým je dvojkyvadlo. na malé energii vykonává kyvadlo periodické kmity. na středních energiích pozorujeme chaotické a zdánlivě nahodilé chování. na vysoké energii však dochází k omezení třídy pohybů jen na rotaci kolem pevné osy, což je opět periodický, a tedy nechaotický pohyb.

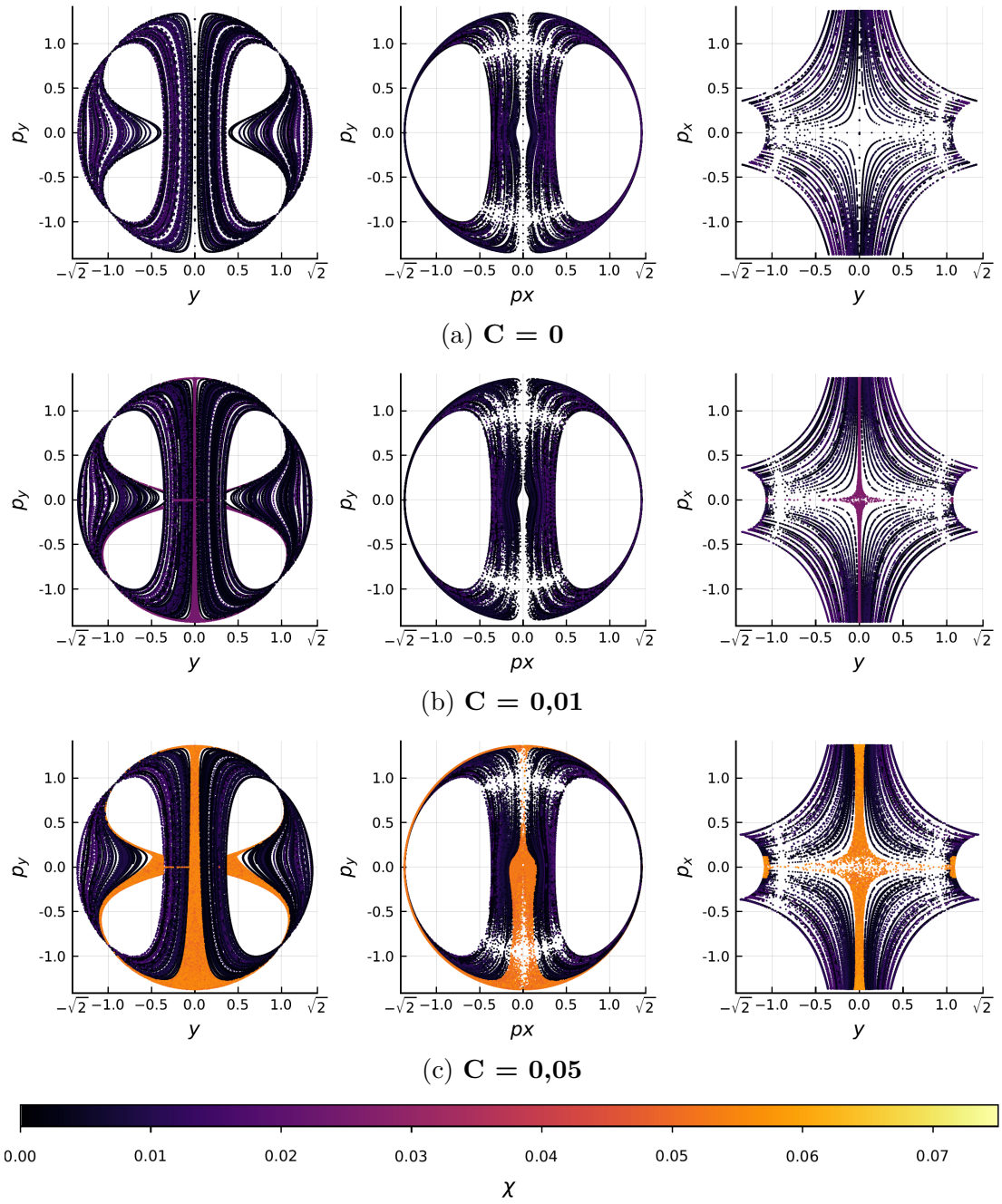
Podobný průběh tak vidíme i na obrázku 2.8, kde jsou uvedeny Poincarého řezy provedené v různých energetických nadplochách. v nízkých energiích převažují regulární trajektorie. Následně roste podíl chaotických i hodnota Lyapunovova exponentu. Řez na obrázku 2.8g dokonce neobsahuje žádné regulární tra-



Obrázek 2.8: Poincarého řezy $x = 0$ fázovým prostorem hamiltoniánu s konstantami $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$ a $C = 0{,}5$ na různých energetických nadplochách s energií E. Lyapunovův exponent χ trajektorií je vyznačen barevnou škálou.

jektorie. s dalším růstem energie se však vrací regulární oblasti, což je vidět na obrázku 2.8i.

Tuto sekci bohatou na obrázky, kde jsme chaos ve vibronovém systému studovali spíše fenomenologicky, zakončíme momentem zrození chaosu v systému. na obrázku 2.9 jsou napočítané Poincarého řezy při nulové poruše a při malých hodnotách $C = 0{,}01$ a $C = 0{,}05$. Pro každý případ jsou uvedeny tři pohledy na dvourozměrnou plochu řezu $E = 0$, $x = 0$. Vidíme, že chaotické oblasti vznikají v rovinách s nulovou hodnotou souřadnic $s = 0$. s rostoucí poruchou se pak šíří dál a postupně vyplní téměř celý řez (viz jeden z předchozích obrázků 2.7b).



(a) **C = 0**

(b) **C = 0,01**

(c) **C = 0,05**

Obrázek 2.9: Poincarého řezy při nulové poruše $C = 0$ a při malých hodnotách $C = 0{,}01$ a $C = 0{,}05$. Pro každý případ jsou uvedeny tři pohledy na dvourozměrnou plochu řezu $E = 0$, $x = 0$, postupně v rovinách yp_y,p_xp_y a yp_x. Zbylé parametry hamiltoniánu jsou voleny $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Hodnota Lyapunovova exponentu χ je vyznačena na barevné škále.

Předchozí obrázky nám poskytují ještě jednu podstatnou informaci. Vidíme, jakému intervalu konečného Lyapunovova exponentu u našeho způsobu výpočtu odpovídají regulární trajektorie. Jejich Lyapunovův exponent v nulovém čase je nulový, ale jelikož počítáme Lyapunovův exponent jen do konečného času (volba parametrů je $l = 400$, $\Delta = 10^{-6}$), regulární trajektorie leží v přibližném intervalu

konečného Lyapunovova exponentu

$$\chi_{\text{regulární}} \in \langle 0; 0{,}02). \tag{2.6}$$

s touto přesností si u dalších výpočtů vystačíme, neboť Lyapunovův exponent chaotických trajektorií je vyšší i pro relativně malé hodnoty poruchy, jak plyne z obrázků 2.9. Pro studium trajektorií s nízkým, ale nenulovým exponentem však stačí jen vhodně snížit parametr Δ, čímž se však zvýší časová náročnost výpočtu.

2.4 Určení chaotičnosti nadplochy fázového prostoru

Kromě informace o hodnotě Lyapunovova exponentu chaotických oblastí a možnosti „nahlédnout“ do fázového prostoru pomocí Poincarého řezů, je podstatným bodem studia chaosu také schopnost určit objem chaotických, resp. regulárních oblastí ve fázovém prostoru. Po Lyapunovově exponentu je poměr chaotického a celkového objemu další důležitou mírou chaosu v systému. a jak už bylo zmíněno v teoretické sekci, obě tyto míry se projevují v kvantových podobách příslušných modelů.

v našem jednoduchém modelu se zachovává energie. Trajektorie vývoje jsou tak lokalizovány v jednotlivých energetických nadplochách. Proto se omezíme jen na určování chaotičnosti příslušné nadplochy $H_{\text{cl}} = E$. v ideálním případě bychom znali přesný Lyapunovův exponent každého bodu nadplochy, což by nám její objem jednoznačně rozdělilo na regulární a chaotický. My však máme značně omezené schopnosti. Numerickými metodami jsme schopni určit jen konečný LCE konečného počtu trajektorií na příslušné nadploše. i v tomto případě se tak bude jednat jen o odhad skutečné hodnoty objemu chaotických a regulárních oblastí.

Přímočarým řešením by bylo vybrat velký počet bodů na zvolené nadploše a určit Lyapunovův exponent jim příslušných trajektorií. Poměr počátečních bodů chaotických a regulárních trajektorií by byl prvním odhadem poměru chaotických a regulárních objemů. Problémem je časová náročnost tohoto řešení způsobená potřebou určit konečný Lyapunovův exponent velkého počtu trajektorií.

Snížit potřebný počet studovaných trajektorií k získání dobrého odhadu bychom mohli pomocí následujícího předpokladu. Předpokládejme, že poměr chaotického a regulárního objemu dané energetické nadplochy se moc neliší od tohoto poměru určeného na některém z jejích řezů. Tento předpoklad vychází z chování řezů popsaném v předchozí sekci (obr. 2.5), kdy u řezu $E = konst.$, $x = konst.$ docházelo změnou souřadnice x jen k jeho deformaci. To nám samozřejmě nezaručuje, že podíl chaotických a regulárních oblastí je na všech řezech stejný. Pokud by se ale ukázalo, že se tato hodnota se změnou příslušné souřadnice určující řez (v případě obrázku 2.5 je to souřadnice x), výrazně nemění, byla by dobrým odhadem tohoto poměru pro celou nadplochu s výrazně kratší dobou výpočtu.

Původní problém se tak redukuje na nalezení vhodného rozdělení bodů na dvourozměrné ploše implicitně zadané hamiltoniánem (2.5). Rozdělení bodů by mělo být takové, aby zastoupení chaotických a regulárních oblastí odpovídalo poměru chaotických a regulárních objemů. To zaručit nedokážeme. Kromě samotných bodů však můžeme zaznamenat všechny průsečíky studovaných tra-

jektorií s plochou daného řezu, čímž zvýšíme jeho pokrytí. Nabízí se tak volba rovnoměrného rozdělení počátečních bodů po rovině řezu.

Nejjednodušší a časově velice přívětivou metodou pro nalezení tohoto rozdělení by byla vhodná parametrizace plochy řezu, která by vedla na analyticky integrovatelnou plošnou míru. Zavedením chaosu do systému (člen poruchy s odmocninou v hamiltoniánu (2.5)) a učiněním jej neintegrovatelným však zabránilo nalezení jednoduchého pokrytí plochy atlasem map a nedovoluje existenci analyticky integrovatelné míry.

Univerzální metodou pro nalezení obecného rozdělení na množině je metoda *Monte Carlo pomocí Markovových řetězců* [2] (zkratka MCMC). Po hamiltonovově struktuře (trajektorie vývoje) dané plochy konstruujeme Markovovy řetězce a generujeme tak body dle požadovaného rozdělení (viz (Byrne a Girolami, 2013) a (P. Diaconis, 2011)). Je to velice užitečná metoda. Mimo jiné lze tento postup využít k výpočtu vícenásobných integrálů.

Pokud bychom takto nagenerovali rozdělení bodů a následně počítali LCE jejich trajektorií, evoluci systému bychom výsledně počítali dvakrát. Bylo by proto vhodné implementovat metodu, kde by rozdělení bodů bylo počítáno současně s Lyapunovovým exponentem a časová náročnost výpočtu by se tak snížila.

My zde budeme prezentovat jednodušší metodu, která nám nedovoluje nalézt rovnoměrné rozdělení bodů. Nicméně jí jsme schopni pokrýt plochu body tak, aby nedocházelo k větším fluktuacím v jejich hustotě.

2.4.1 Popis metody

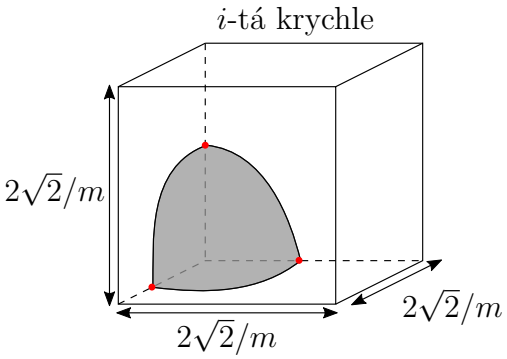
Námi použitá metoda se zakládá na aproximaci plochy řezu pomocí mnohoúhelníků. Jeden bod z každého mnohoúhelníku naprojektujeme na původní plochu řezu, čímž získáme rozdělení bodů společně s odhadem plochy řezu. Při vývoji trajektorií zaznamenáváme jejich průsečíky s plochou řezu. Chaotičnost plochy mnohoúhelníku je pak dána jako podíl bodů chaotických trajektorií ku celkovému počtu. Tak bychom měli získat odhad podílu chaotické plochy v oblasti reprezentované příslušným mnohoúhelníkem. Ze znalosti obsahu každého mnohoúhelníku a příslušného poměru chaotické oblasti již dopočítáme podíl chaotických oblastí na celé ploše řezu. Postup je podrobněji rozepsán v následující tabulce.

Tabulka 2.2: Algoritmus určení odhadu chaotičnosti plochy daného řezu.

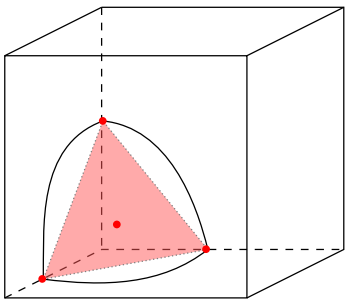
Vstup	Implicitně zadaná plocha hamiltoniánem H_{cl} (vztah (2.5)) řezu $E = konst.$, $x = konst.$ (můžeme volit řez i jinou rovinou).
Krok 1	Oblast, ve které se nachází plocha řezu (krychle o hraně $2\sqrt{2}$)rozdělíme kartézskou sítí na krychle o hranách $2\sqrt{2}/m$.
Krok 2	Najdeme průsečíky řezu s touto sítí (obr. 2.10). Každé souřadnicové krychli přiřadíme množinu průsečíků, které leží na jejích hranách.

[2] Anglicky *Markov Chain Monte Carlo* nebo *Monte Carlo Markov Chains*

Krok 3 Množinu průsečíků každé krychle zredukujeme na jeden bod (obr. 2.11). v první řadě hledáme těžiště trojúhelníku určeného některou trojicí průsečíků. Trojici vybíráme tak, aby těžiště leželo uvnitř krychle. Pokud taková neexistuje (např. jsou v krychli jen dva průsečíky), hledáme bod uvnitř krychle na spojnici některých dvou průsečíků. Pokud daná krychle obsahuje jen jeden průsečík, volíme ten.



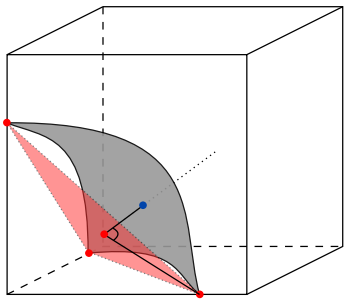
Obrázek 2.10: Oblast implicitně zadaná plochy (šedá) v i-té souřadnicové krychli. Červeně jsou označeny průsečíky plochy a hran krychle.



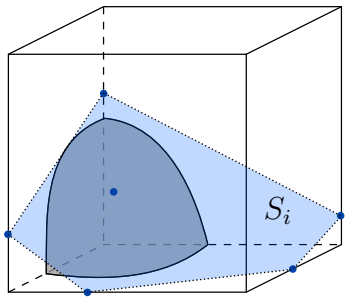
Obrázek 2.11: Průsečíky v krychli redukujeme na jeden bod. Ideálně na težiště ležící unitř krychle některého z trojúhelníků daného průsečíky.

Krok 4 Zvolený bod příslušející každé souřadnicové krychli naprojektujeme na plochu řezu obsaženou v dané krychli (modrý bod na obrázku 2.12). Dostáváme tak hledané rozdělení bodů. Počet těchto bodů označíme K.

Krok 5 v každém bodě nového rozdělení rozvineme plochu řezu zadanou implicitně hamiltoniánem H_{cl} do prvního řádu Taylorova polynomu. Dostáváme tak rovinu tečnou na plochu řezu v daném bodě (obr. 2.13). Plochu řezu aproximujeme v i-té souřadnicové krychli průnikem této krychle a tečné roviny. Průnikem je mnohoúhelník s obsahem S_i.

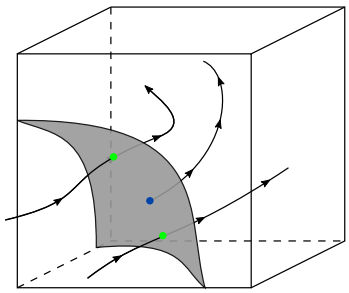


Obrázek 2.12: Projekce vybraného bodu z **kroku 3** (červený bod uvnitř krychle) na původní plochu v krychli (červený bod).

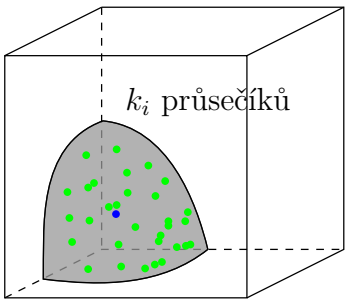


Obrázek 2.13: Aproximace povrchu plochy tečné roviny v daná krychli. Plocha výsledného mnohoúhelníku je S_i.

Krok 6	z každého bodu nového rozdělení vyvineme trajektorii a určíme její konečný Lyapunovův exponent (obr. 2.14). Zároveň ukládáme každý průsečík těchto trajektorií s plochou řezu. Tyto průsečíky přiřadíme krychlím (obr. 2.15), ve kterých leží.



Obrázek 2.14: Z bodu získaného v **kroku 4** (modrý bod) vyvíjíme trajektorii a určíme její Lyapunovův exponent. Zaznamenáváme průsečíky (zelené) této plochy a trajektorií vyvíjených z ostatních krychlí.



Obrázek 2.15: Celkem k_i průsečíků (zelené a modrý bod) implicitně zadané plochy v i-té souřadnicové krychli a vyvíjených orbit s určeným Lyapunovovým exponentem pro určení podílu chaotických bodů.

Krok 7	Každé i-té krychli tak přísluší obsah mnohoúhelníku S_i, který v ní aproximuje plochu řezu, a množina k_i průsečíků s určenými hodnotami konečných Lyapunovových exponentů χ_{ij}, $j = 1,2 \ldots k_i$.

Získali jsem informace o chaotické struktuře na zvoleném řezu a jeho aproximaci pomocí ploch S_i. z nich bychom chtěli určit odhad obsahu plochy, která obsahuje chaotické trajektorie. *Celkový obsah plochy řezu* označíme jako

$$S = \sum_{i=1}^{K} S_i.$$

Za chaotické budeme považovat trajektorie s Laypunovovým exponentem $\chi_{ij} \geq 0{,}02$, dle diskuze na konci předchozí sekce (viz vztah (2.6)) o vytvoření chaosu v systému. Jedná se čistě o důsledek námi zvolené numerické techniky a přesnosti při výpočtu Lyapunovových exponentů.

Poměr chaotické a celkové plochy řezu v i-té krychli Λ_i určíme jako poměr počtu chaotických bodů v krychli ku celkovému počtu bodů v krychli k_i

$$\Lambda_i = \frac{\sum_{j=1}^{k_i} \Theta(\chi_{ij} - 0{,}02)}{k_i},$$

kde $\Theta(\chi_{ij} - 0{,}02)$ je Heavisideova theta funkce, která nabývá hodnot

$$\Theta(\chi_{ij} - 0{,}02) \begin{cases} = 1 & \textbf{chaotická trajektorie}, \\ = 0 & \textbf{regulární trajektorie}. \end{cases}$$

Podíl chaotické a celkové plochy Λ daného řezu, který jsme aproximovali K plochami s obsahy S_i, pak určíme jako

$$\Lambda = \frac{\sum_{i=1}^{K} S_i \Lambda_i}{\sum_{i=1}^{K} S_i}. \tag{2.7}$$

Hodnota poměru vždy leží v intervalu $\Lambda \in \langle 0, 1 \rangle$, kdy nulové hodnotě odpovídá plně regulární řez a hodnotě jedna řez plně chaotický.

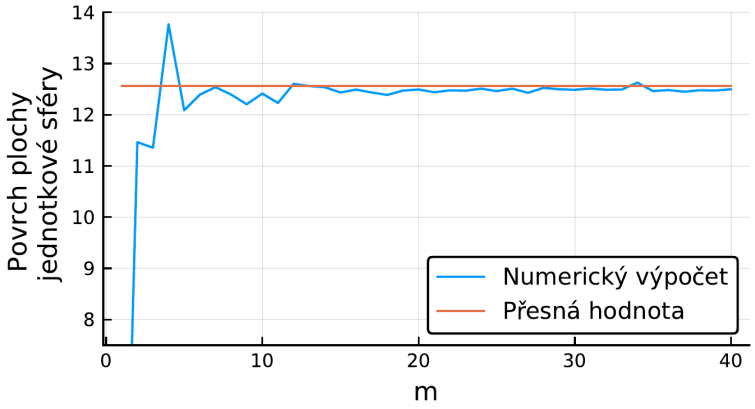
Ještě zavedeme ***průměrný nenulový Lyapunovův exponent*** daného řezu, který by měl udávat odhad hodnoty Lyapunovova exponentu chaotických oblastí. Určíme jej jako průměr všech Lyapunovových exponentů $\chi_{ij} \geq 0{,}02$ ze všech krychlí

$$\lambda = \frac{\sum_{i=1}^{K} \sum_{j=1}^{k_i} \chi_{ij} \Theta(\chi_{ij} - 0{,}02)}{\sum_{i=1}^{K} \sum_{j=1}^{k_i} \Theta(\chi_{ij} - 0{,}02)}. \tag{2.8}$$

2.4.2 Diskuze metody

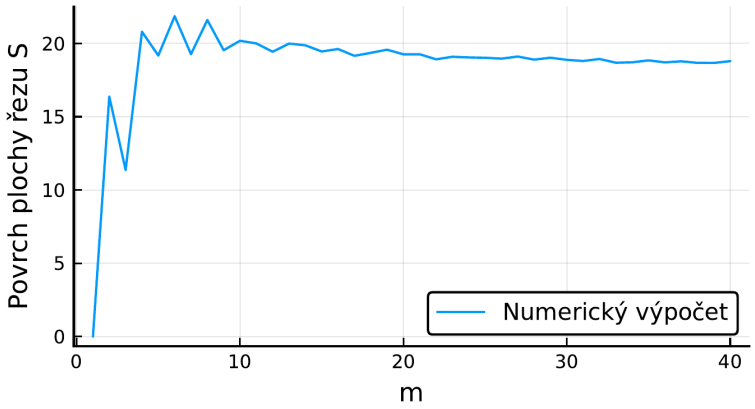
Přesnost určení Λ a λ touto metodou je dána volbou přesnosti výpočtu Lyapunovových exponentů (parametry l a Δ) a velikostí krychlí kartézské sítě, která je určena parametrem m. Od něj se pak odvíjí velikost mnohoúhelníků, kterými aproximujeme plochu řezu, i počet vyvíjených trajektorií.

Porovnání přesnosti určení obsahu S celkové plochy řezu v závislosti na hustotě kartézské sítě m je na obrázcích 2.16 a 2.17. na prvním obrázku je numericky spočítaná plocha jednotkové sféry. Přibližně pro $m \geq 20$ se hodnota drží blízko přesné hodnoty (rozdíl je méně než 1% přesné hodnoty). Podobný průběh vidíme i na druhém obrázku, kde s rostoucím m se plocha řezu postupně ustaluje na konečné hodnotě.



Obrázek 2.16: Porovnání obsahu plochy jednotkové sféry v závislosti na hustotě kartézské sítě m určeného námi používanou metodou a přesné hodnoty.

Hodnotě $m = 20$ odpovídá stejná hustota pokrytí plochy řezu průsečíky vyvíjených trajektorií, jaká je na Poincarého řezech uvedených v předchozí sekci. Budeme ji proto volit i vzhledem k časové náročnosti výpočtu pro další výpočty.



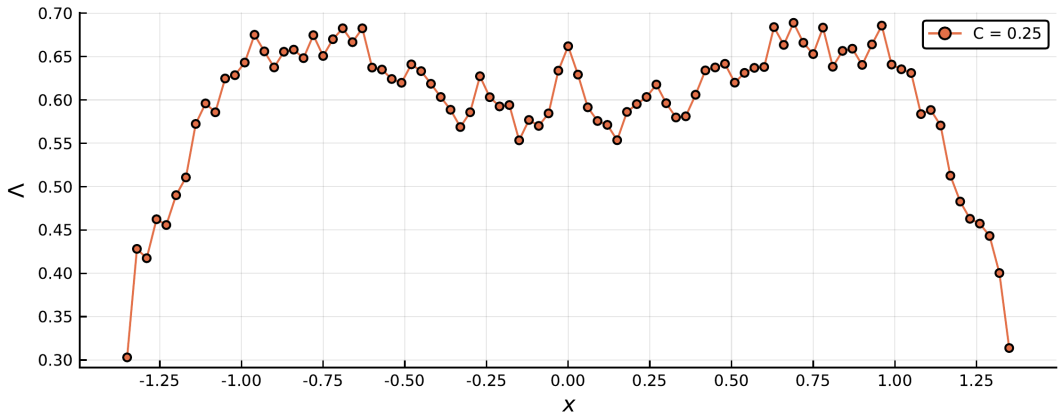
Obrázek 2.17: Obsah plochy řezu $E = 0$, $x = 0$ s parametry $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$, $C = 0{,}25$ určeného numerickou metodou v závislosti na na hustotě kartézské sítě m.

Nyní můžeme na příkladech ukázat opodstatnění původního předpokladu, že podíl obsahu chaotických oblastí v celkové ploše řezu $E = konst.$, $x = 0$, který označíme $\Lambda(0)$, se blíží podílu chaotického objemu $V_{\text{chaotický}}$ v celé energetické nadploše $E = konst.$ s objemem $V_{\text{celkový}}$. To lze vyjádřit jako

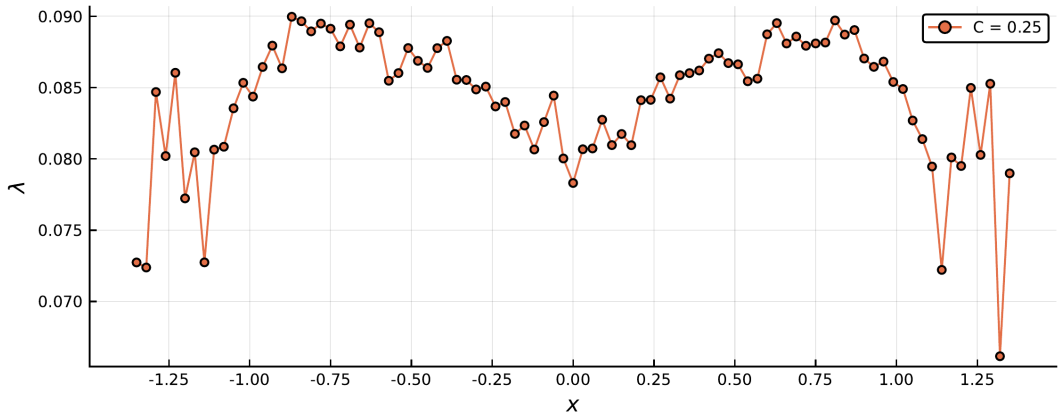
$$\langle \Lambda(x) \rangle = \frac{V_{\text{chaotický}}}{V_{\text{celkový}}} = \frac{\int_{-\sqrt{2}}^{\sqrt{2}} \Lambda(x) S(x) \mathrm{d}x}{\int_{-\sqrt{2}}^{\sqrt{2}} S(x) \mathrm{d}x} \approx \Lambda(0), \tag{2.9}$$

kde veličiny $\Lambda(x)$, $S(x)$ uvažujeme jako funkce souřadnice x při konstantních hodnotách zbylých parametrů E, A, B a C. Střední hodnotu $\langle \Lambda(x) \rangle$ pak určujeme přes plochu $S(x)$ řezů podél souřadnice x, což představuje podíl chaotického objemu ve zvolené energetické nadploše. U numerického výpočtu této střední hodnoty přejdeme od integrálu k sumaci přes napočítané řezy.

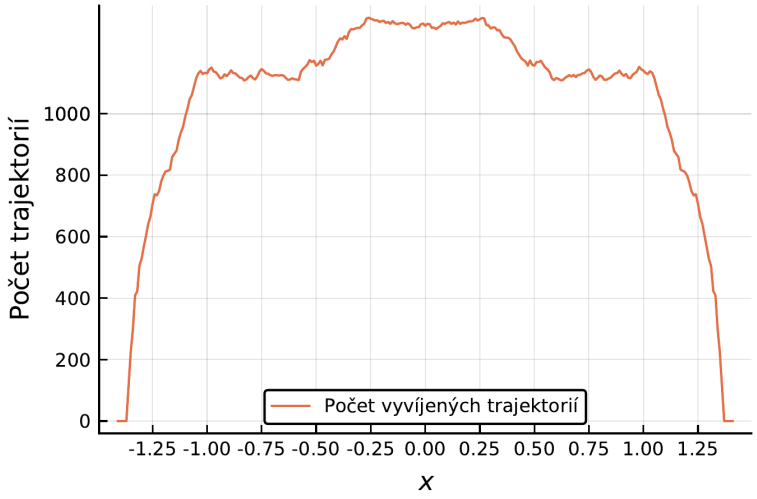
Příklad závislosti poměru chaotické a celkové plochy $\Lambda(x)$ řezu na souřadnici x je na obrázku 2.18. Velikost poruchy je volena $C = 0{,}25$ a $E = 0$. Vidíme, že Λ se výrazně liší přibližně až od $|x| > 1{,}0$. Podobným způsobem se od zbylých hodnot liší i průměrný nenulový LCE λ, jehož průběh v závislosti na x je na obrázku 2.19. To je způsobeno malým počtem vyvíjených trajektorií a následným nedostatečným pokrytím body řezu. Počet vyvíjených trajektorií a počet bodů na ploše řezu v závislosti na x jsou vykresleny na obrázcích 2.20 a 2.21. Vidíme, že právě od $|x| > 1{,}0$ dochází k prudkému poklesu napočítaných trajektorií i bodů pro pokrytí plochy řezu chaotickou strukturou. Výpočty byly provedeny s hodnotami parametrů $\Delta = 10^{-5}$ a $l = 400$, které udávají, kdy bude ukončen výpočet LCE. Od délky trajektorií se pak odvíjí možný počet bodů na ploše řezu.



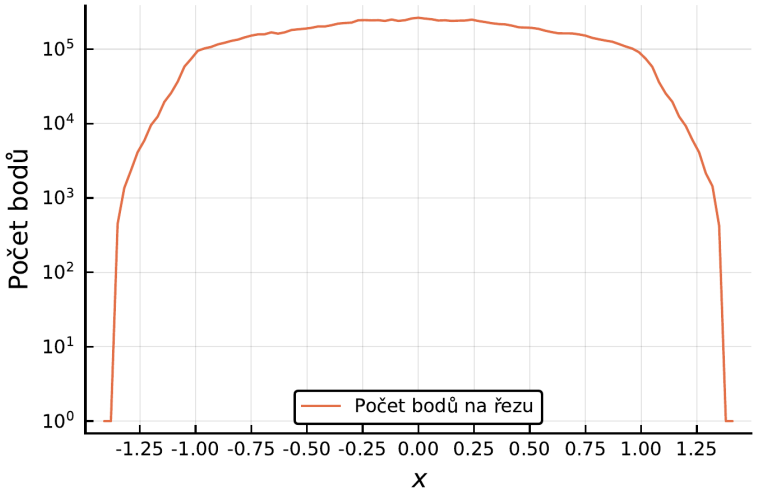
Obrázek 2.18: Podíl chaotické plochy Λ řezu $E = 0$, $x = konst.$ určené prezentovanou numerickou metodou v závislosti na hodnotě x. Je volena porucha $C = 0{,}25$ s parametry hamiltoniánu $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Pro výpočet je volena kartézská síť s hodnotou $m = 20$.Výpočty byly provedeny s hodnotami parametrů $\Delta = 10^{-5}$ a $l = 400$.



Obrázek 2.19: Průměrný nenulový Lyapunovův exponent λ v řezu $E = 0$, $x = konst.$ určený prezentovanou numerickou metodou v závislosti na hodnotě x. Je volena porucha $C = 0{,}25$ s parametry hamiltoniánu $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Pro výpočet je volena kartézská síť s hodnotou $m = 20$. Výpočty byly provedeny s hodnotami parametrů $\Delta = 10^{-5}$ a $l = 400$.



Obrázek 2.20: Počet trajektorií vyvíjených pro pokrytí plochy řezu $E = 0$, $x = konst.$ v závislosti na x. Parametr m kartézské sítě použité v metodě byl volen $m = 20$. Je volena porucha $C = 0{,}25$ s parametry hamiltoniánu $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$.



Obrázek 2.21: Výsledný počet bodů s vypočítanou hodnotou LCE na ploše řezu $E = 0$, $x = konst.$ v závislosti na x. Parametr m kartézské sítě použité v metodě byl volen $m = 20$. Je volena porucha $C = 0{,}25$ s parametry hamiltoniánu $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$.Výpočty byly provedeny s hodnotami parametrů $\Delta = 10^{-5}$ a $l = 400$.

Vidíme, že při malém počtu $< 10^5$ bodů na ploše řezu se výrazně ztrácí přesnost určení odhadu Λ a λ. v takovém případě je pak nutné provést výpočet s vyšší hustotou mříže m, čímž zvýšíme rozlišovací schopnost i počet vyvíjených trajektorií.

My se teď omezíme na interval $x \in \langle -1{,}0; 1{,}0 \rangle$, kde byl počet bodů dostačující. na obrázku 2.22 je znovu vykreslena závislost $\Lambda(x)$ na volbě řezu souřadnicí x. Uvedeny jsou případy s poruchou $C = 0{,}25$ a $C = 0{,}50$. Vyznačeny jsou i střední hodnoty $\langle \Lambda_C(x) \rangle$ určené vystředováním přes x na daném intervalu při zvolených

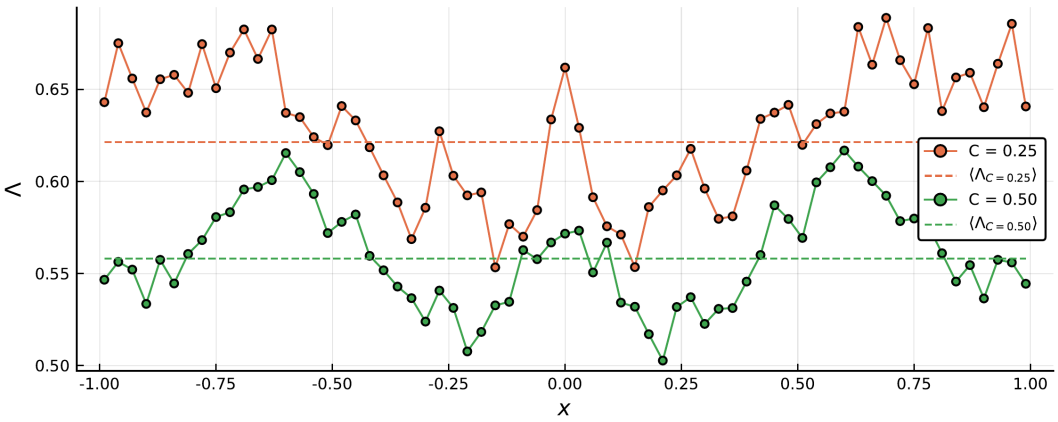
hodnotách C. Střední hodnota se od $\Lambda(0)$ liší jen v řádu procent podílu chaotické plochy. Porovnání $\langle\Lambda_C(x)\rangle$ a $\Lambda(0)$ jsme provedli i pro další hodnoty poruchy v intervalu $C \in \langle 0; 0{,}75\rangle$. Pro střední hodnotu počítanou podle vztahu (2.8) na intervalu $x \in \langle -1{,}0; 1{,}0\rangle$ byl rozdíl menší než 7% chaotického objemu, tedy

$$\langle\Lambda_C(x)\rangle = \Lambda(0) \pm 0{,}07. \tag{2.10}$$

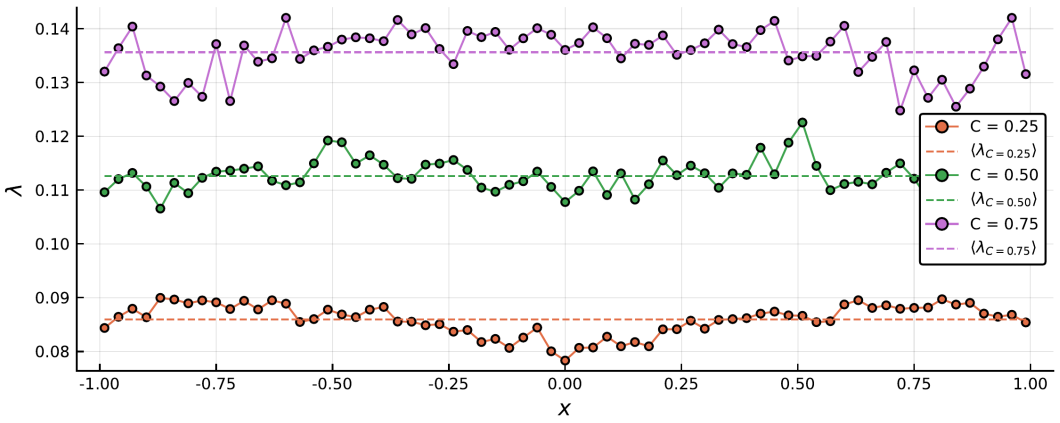
Rozdíl byl větší (do 12% chaotického objemu), pokud byla střední hodnota počítána v původních mezích $x \in \langle -\sqrt{2}; \sqrt{2}\rangle$, což je dané, jak už bylo zmíněno, malým počtem bodů při výpočtu.

Hodnotu $\Lambda(0)$ tak budeme používat jako odhad podílu $\langle\Lambda_C(x)\rangle$ chaotického objemu v celé energetické nadploše s chybovým intervalem ve vztahu (2.10). Taková přesnost je pro naše další účely dostačující, jak ukážeme v následující sekci numerických výsledků. Budou nás zajímat závislosti Λ a λ na síle poruchy C a hodnotě energie E.

Lyapunovův exponent chaotických oblastí budeme také brát jako průměrný Lyapunovův exponent $\lambda(x = 0)$ řezu $x = 0$, neboť i zde je jeho závislost na x malá. Ukázka pro tři hodnoty poruchy C je na obrázku 2.23. Průběh je porovnán s hodnotou $\langle\lambda_C(x)\rangle$. v tomto případě se však jedná jen o průměr napočítaných hodnot $\lambda(x)$.



Obrázek 2.22: Závislost podílu chaotické plochy Λ řezu $E = 0$, $x = konst.$ na volbě souřadnice $x \in \langle -1{,}0; 1{,}0\rangle$. Znázorněny jsou dva případy se silami poruchy $C = 0{,}25$ a $C = 0{,}50$ společně se středními hodnotami $\langle\Lambda_C(x)\rangle$ určenými dle (2.9). Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Parametr m kartézské sítě použité v metodě byl volen $m = 20$.



Obrázek 2.23: Graf napočítané hodnoty průměrného nenulového Lyapunova exponentu λ řezu $E = 0$, $x = konst.$ v závislosti na volbě souřadnice $x \in \langle -1{,}0; 1{,}0 \rangle$. Uvedeny jsou tři případy se silami poruchy $C = 0{,}25$, $C = 0{,}50$, $C = 0{,}75$ včetně průměrných hodnot $\langle \lambda_C \rangle$ z uvedených bodů. Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Parametr m kartézské sítě použité v metodě byl volen $m = 20$.

Hodnota Lyapunovova exponentu chaotických oblastí by měla být podél souřadnice x v dané nadploše konstantní. Ve všech uvažovaných případech byla odchylka numericky určených hodnot $\lambda(x)$ přibližně 3% průměrné hodnoty. Lyapunovův exponent chaotických oblastí dané energetické nadplochy proto budeme odhadovat průměrným Lyapunovovým expenentem $\lambda(0)$ v řezu $x = 0$ s chybou

$$\lambda = \lambda(0) \pm 0{,}03\lambda(0). \tag{2.11}$$

Výsledná přesnost naší metody určení podílu chaotické plochy řezu Λ je tak dána dvěma základními faktory. Prvním je hustota kartézské mříže m, která určuje velikost krychlí, které rozdělují původní plochu řezu a ve kterých je aproximována mnohoúhelníky. Od ní se pak odvíjí nejen přesnost uřčení plochy řezu, ale také hustota pokrytí body. Druhým faktorem je přesnost výpočtu Lyapunovova exponentu (volba parametrů Δ a l, integrační metody a rozlišení chaotických a regulárních trajektorií parametrem $\chi_{\text{regulární}}$).

Za přesnost se však platí časovou náročností numerického výpočtu. Výpočet Λ i λ provádíme současně. Pro představu, výpočet jednoho bodu v grafech závislostí Λ trvá na jednom jádře (procesor `Intel i5-6200U CPU 2.30GH`) přibližně jednu až osm hodin. Záleží na stabilitě numerického výpočtu, která určuje délku integračního kroku pro zachování požadované přesnosti. Proto je výhodné při počítání chaotičnosti systému v závislosti na jiných parametrech jako je energie a síla poruchy využít odhadu v podobě $\Lambda(0)$ a $\lambda(0)$.

2.4.3 Numerické výsledky

V této sekci prezentujeme některé výsledky napočítané výše uvedenou metodou. Cílem bylo získat určitou představu o závislosti podílu chaotického objemu v energetické nadploše a Lyapunovova exponentu chaotických oblastí na síle poruchy C a energii E. Obě tyto veličiny budeme odhadovat hodnotami $\Lambda(x = 0)$

a $\lambda(x = 0)$. Uvedené výsledky jsou pro model s parametry

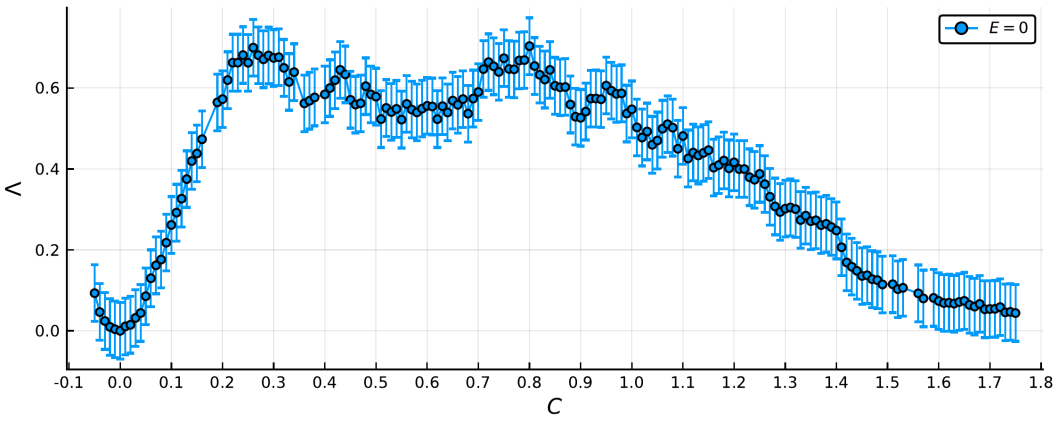
$$A = 0{,}1 \qquad B = -0{,}8.$$

Závislost chaotičnosti na síle poruchy

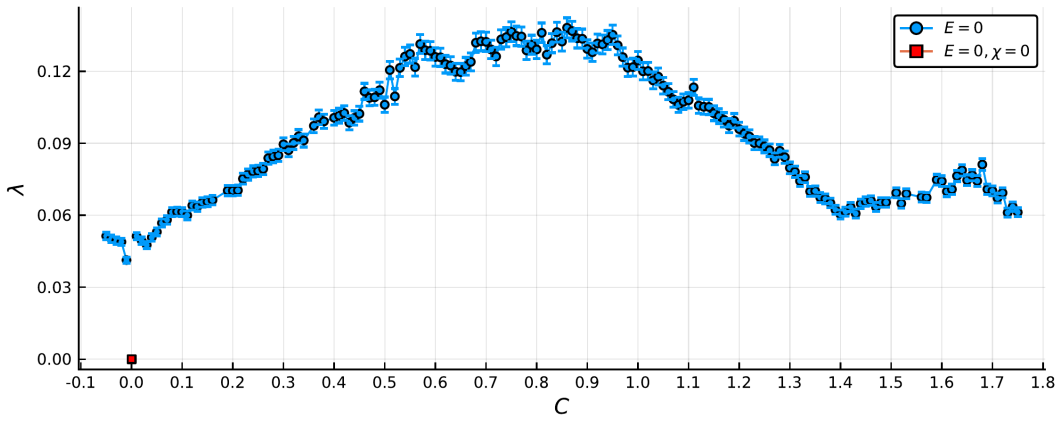
Chování chaotičnosti systému s energií $E = 0$ v závislosti na síle poruchy je znázorněna na obrázcích 2.24 a 2.25. Prvním z nich je graf závislosti podílu chaotické plochy Λ v řezu $x = 0$. Systém bez poruchu $C = 0$ je nechaotický $\Lambda = 0$. S rostoucí poruchou se podíl chaotické plochy zvětšuje. Maxima nabývá kolem $C = 0{,}25$, kdy je chaotických přibližně 70% z celé energetické nadplochy a pak opět postupně klesá. Chování se přesně shoduje s Poincarého řezy (obr. 2.7) z minulé sekce. Chaotičnost závisí pouze na velikosti síly poruchy a ne na znaménku (naznačeno hodnotami kolem $x = 0$).

Na druhém obrázku je graf závislosti průměrného nenulového Lyapunova exponentu λ. Ten není definován pro plně regulární případ $C = 0$, kdy LCE všech trajektorií je nulový $\chi = 0$. v grafu je proto tato hodnota χ uvedena odděleně. s rostoucí poruchou roste i λ. Prvního maxima však nabývá až kolem hodnoty $C \approx 0{,}8$, tedy při vyšší intenzitě poruchy než Λ.

Lyapunovův exponent svou převrácenou hodnotou udává odhad času, kdy se začne projevovat vzdalování blízkých chaotických trajektorií, tedy Lyapunovův čas. Podíl chaotického objemu ve fázovém prostoru naopak udává míru trajektorií, které se projevují chaoticky. Jejich odlišnou závislost na parametru, který chaotičnost způsobuje, můžeme považovat za zajímavou. Při studiu kvantového chaosu je chování některých kvantových indikátorů chaotičnosti porovnáváno, jak už bylo zmíněno, právě s chováním Lyapunovova exponentu a podílu chaotického objemu.



Obrázek 2.24: Graf závislosti podílu chaotické plochy Λ v řezu $x = 0$ na intenzitě poruchy C při konstantní energii $E = 0$. Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Body byly napočítány uvedenou numerickou metodou s parametry $m = 20$, $\Delta = 10^5$, $l = 400$. Chybový interval $\Delta\Lambda = 0{,}07$ udává odhad podílu chaotického objemu celé energetické nadroviny.

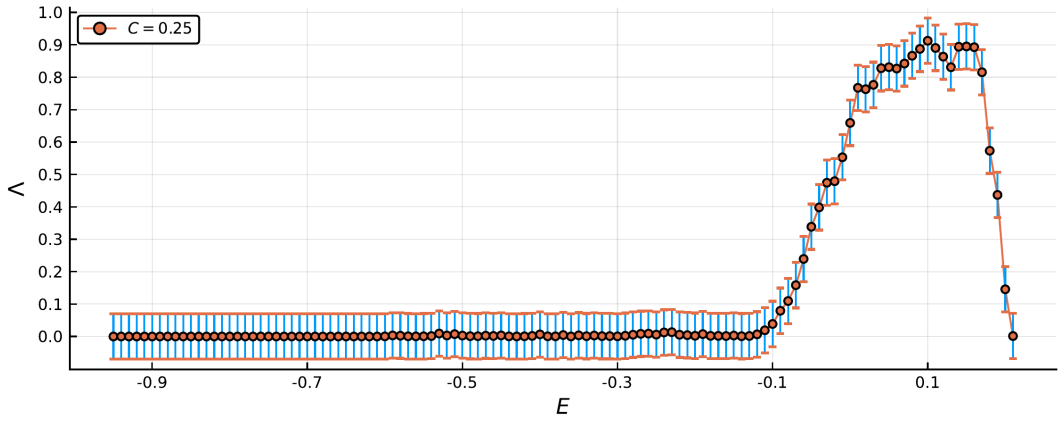


Obrázek 2.25: Graf závislosti Lyapunovova exponentu chaotických oblastí λ v řezu $x = 0$ na intenzitě poruchy C při konstantní energii $E = 0$. Uvedená chyba je $\Delta\lambda = 0{,}03\lambda$ dle (2.11). Uveden je i čistě regulární případ pro $C = 0$, kdy Lyapunovův exponent všech trajektorií je $\chi = 0$, a tedy λ není definován. Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Body byly napočítány uvedenou numerickou metodou s parametry $m = 20$, $\Delta = 10^5$, $l = 400$.

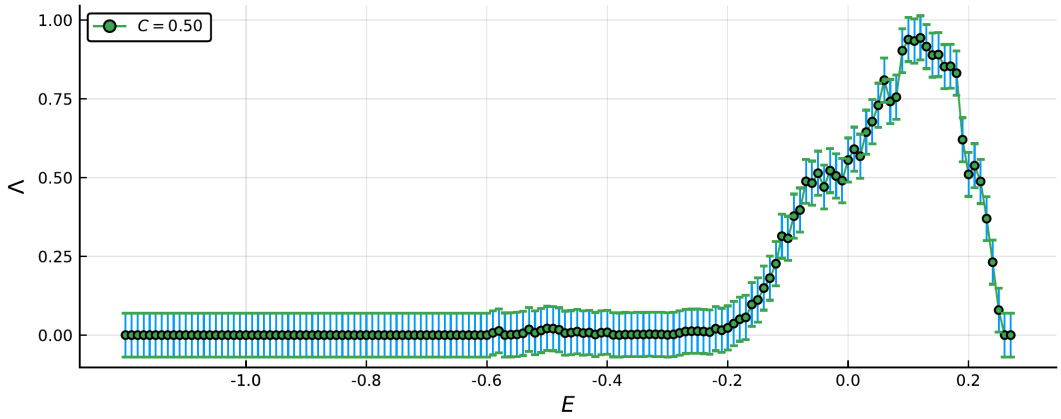
Závislost chaotičnosti na energii

Ukážeme závislost chaotičnosti vibronového systému na energii, a to pro dvě hodnoty poruchy $C = 0{,}25$ a $C = 0{,}50$. Uvedeny jsou na obrázcích 2.26, 2.27 a 2.28.

Na prvních dvou obrázcích jsou grafy závislosti podílu chaotické plochy Λ v řezu $x = 0$. Pro nízké energie je napočítaný podíl chaotických oblastí nulový. na dané energetické nadploše se přesto mohou vyskytovat trajektorie s nenulovým Lyapunovovým exponentem, případně malé chaotické oblasti (jednotky procent objemu) pod rozlišitelností použité metody. na vyšší energii je již patrná přítomnost chaotických oblastí s objemem menším než 10% objemu celkového. Chyba odhadu podílu chaotického objemu celé energetické nadplochy je v tomto případě více než 100%. Podstatnou informací však je, že energetická nadplocha již chaotické oblasti obsahuje. Kolem energií $E = -0{,}2$ a $E = -0{,}1$ dochází k prudkému nárůstu podílu chaotického objemu s maximem kolem $E = 0{,}1$, kdy je objem z více než 90% chaotický. Pak následuje pokles a systém se zdá být při maximální energii opět regulární. Znovu můžeme srovnat s Poincarého řezy na obrázku 2.8, na kterých vidíme stejný průběh chování.



Obrázek 2.26: Graf závislosti podílu chaotické plochy Λ v řezu $x = 0$ na energii E. Uvažovaná intenzita vnější poruchy je $C = 0{,}25$. Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Jedná se o celý interval energie, na které má daný hamiltonián řešení. Body byly napočítány uvedenou numerickou metodou s parametry $m = 20$, $\Delta = 10^5$, $l = 400$. Chybový interval $\Delta\Lambda = 0{,}07$ udává odhad podílu chaotického objemu celé energetické nadroviny.

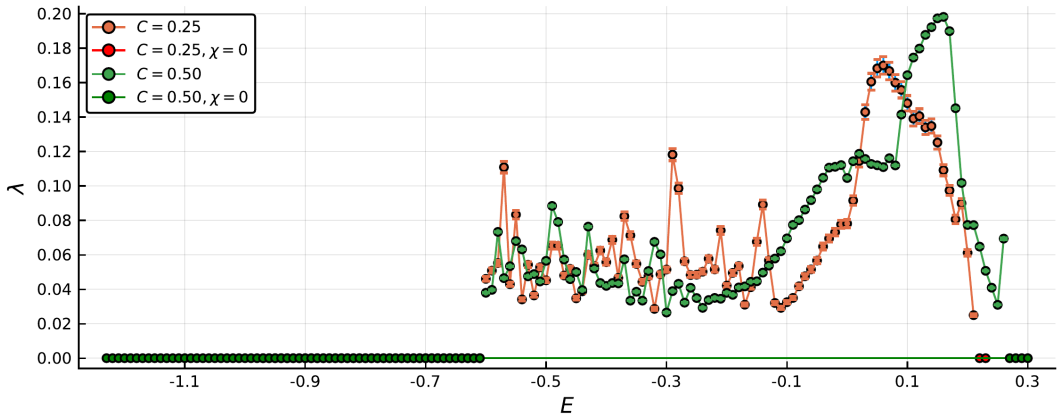


Obrázek 2.27: Graf závislosti podílu chaotické plochy Λ v řezu $x = 0$ na energii E. Uvažovaná intenzita vnější poruchy je $C = 0{,}50$. Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Jedná se o celý interval energie, na které má daný hamiltonián řešení. Body byly napočítány uvedenou numerickou metodou s parametry $m = 20$, $\Delta = 10^5$, $l = 400$. Chybový interval $\Delta\Lambda = 0{,}07$ udává odhad podílu chaotického objemu celé energetické nadroviny.

Třetím obrázkem je graf závislosti Lyapunovova exponentu chaotických oblastí λ na energii. Opět jsou vyznačeny i body, které odpovídají regulárním případům, kdy veškeré vyvíjené trajektorie měly nulový LCE $\chi = 0$ a λ není definovaný. Vidíme tak, že na nízkých energiích nebyla určena žádná chaotická trajektorie. Následně hodnoty λ výrazně oscilují. To je způsobeno nízkým počtem chaotických trajektorií. Od něj se odvíjí i nízká přesnost určení exponentu (viz diskuze závislosti počtu bodů na přesnosti v minulé sekci - obr. 2.20 a 2.21). Vliv počtu bodů není zahrnut v chybě $\Delta\lambda$. na tomto intervalu tak jen víme, že Lyapunovův exponent chaotických oblastí leží v intervalu $\lambda \in \langle 0{,}02; 0{,}08\rangle$. Pro přesnější odhad

by bylo nutné zopakovat výpočet s větší hustotou kartézské sítě m.

Dále vidíme prudký nárůst hodnoty exponentu, který je díky vyššímu počtu bodů v pokrytí plochy řezu určen s vyšší přesností. na maximální energii se systém opět zdá být regulárním.



Obrázek 2.28: Graf závislosti Lyapunovova exponentu chaotických oblastí λ v řezu $x = 0$ na energii E pro dvě hodnoty poruchy $C = 0{,}25$ a $C = 0{,}50$. Uvedená chyba je $\Delta\lambda = 0{,}03\lambda$ dle (2.11). Uvedeny jsou i oblasti, kde veškeré napočítané trajektorie byly regulární s hodnotou LCE $\chi = 0$. v takovém případě není λ definován. Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Body byly napočítány uvedenou numerickou metodou s parametry $m = 20$, $\Delta = 10^5$, $l = 400$.

Závěr

Cílem této práce bylo studovat klasický chaos v jednoduchém modelu molekulových vibrací. Algebraický model vibrací, prezentovaný Iachellem a Ossem, který byl získán využitím dynamických symetrií z prvků algebry $u(3)$, jsme nejprve doplnili o interakční člen s vnějším polem. Takový systém již vykazuje chaotické chování. Provedením klasické limity jsme získali hamiltonovský systém s omezeným čtyřrozměrným fázovým prostorem, na kterém již je možné studovat projevy klasického chaosu.

Následně jsme prezentovali numerickou metodu na výpočet Lyapunovova exponentu, který udává míru citlivosti na změnu počátečních podmínek. Blíže jsme se věnovali struktuře fázového prostoru a jeho řezům podél zvolených souřadnic. Zajímal nás tvar řezů daný nejen původními parametry hamiltoniánu, ale také jeho závislost na energii a síle poruchy. Tyto parametry jsou totiž odpovědné za přítomnost chaosu a podobu chaotických a regulárních oblastí na fázovém prostoru, jak bylo ukázáno na provedených Poincarého řezech.

Na základě chování chaotické struktury pozorované na Poincarého řezech jsme navrhli předpoklad týkající se podílu chaotického objemu dané energetické nadplochy. Ten by měl přibližně odpovídat podílu chaotické plochy na vhodně zvoleném řezu. Volili jsme řez $x = 0$ a na základě tohoto předpokladu jsme vybudovali aproximativní metodu na určení podílu chaotické plochy obecného řezu. Následně jsme ověřili, že tento předpoklad je splněn pro získání dostatečně přesného odhadu chování závislosti chaotičnosti dané nadplochy na síle poruchy C a energii E. Zvoleným předpokladem jsme výrazně snížili časovou náročnost výpočtu.

Na závěr jsme prezentovali ukázky numerických výsledků. Ukázali jsme, že chaotičnost systému nejprve prudce roste se zvyšující se silou interakce C, avšak pro velká C se tento trend obrací. Podobný průběh má i závislost chaotičnosti na energii. V této podobě, kdy je jasně patrné chování Lyapunovova exponentu chaotických oblastí λ a podílu chaotického objemu Λ, respektive změna chaotičnosti způsobená změnou zvolených parametrů, je dokážeme srovnat s případnými výsledky studia kvantového chaosu. Podstatné je, že výsledky ve stejné formě jsme s požadovanou přesností schopni pomocí vypracovaných numerických metod napočítat i pro libovolnou sadu parametrů, která se může ukázat zajímavou v kvantovém modelu.

Seznam použité literatury

DifferentialEquations.jl Documentation, knihovna na řešení diferenciálních rovnic. URL `https://diffeq.sciml.ai/stable/`.

The Julia Language, programovací jazyk Julia. URL `https://julialang.org/`.

ODE Solvers, numerické metody na řešení diferenciálních rovnic. URL `https://diffeq.sciml.ai/stable/solvers/ode_solve/`.

Byrne, S. a Girolami, M. (2013). Geodesic monte carlo on embedded manifolds. *Scandinavian Journal of Statistics*, **41**.

Cejnar, P. (2013). *A Condensed Course of Quantum Mechanics*. Karolinum Press.

Contopoulos, G. (2002). *Order and Chaos in Dynamical Astronomy*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

Devaney, R. (1989). *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*, page 35. Addison–Wesley Publishing Company, 2nd edition.

Fortes, E. M., García-Mata, I., Jalabert, R. A. a Wisniacki, D. A. (2019). Gauging classical and quantum integrability through out-of-time-ordered correlators. *Phys. Rev. E*, **100**, 042201.

Frank, A., Isacker, P., Jolie, J., Jolie, J. a Van Isacker, P. (2009). *Symmetries in atomic nuclei*. Springer.

Gilmore, R. (2012). *Lie Groups, Lie Algebras, and Some of Their Applications*. Courier Corporation.

Holstein, T. a Primakoff, H. (1940). Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. *Phys. Rev.*, **58**, 1098–1113.

Iachello, F. a Arima, A. (1987). *The Interacting Boson Model*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics. Cambridge University Press. doi: 10.1017/CBO9780511895517.

Iachello, F. a Oss, S. (1996). Algebraic approach to molecular spectra: Two-dimensional problems. *The Journal of Chemical Physics*, **104**, 6956–6963.

Iachello, F. (2015). *Lie Algebras and Applications*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

Iachello, F. a Levine, R. D. (1995). *Algebraic theory of molecules*. Oxford University Press.

J. Horák, L. Krlín, A. R. (2003). *Deterministický chaos a jeho fyzikální aplikace*. Academia.

Larese, D., Pérez-Bernal, F. a Iachello, F. (2013). Signatures of quantum phase transitions and excited state quantum phase transitions in the vibrational bending dynamics of triatomic molecules. *Journal of Molecular Structure*, **1051**, 310–327.

Lorenz, E. N. (1962). Deterministic nonperiodic flow. *Journal of the atmospheric sciences*.

Macek, M., Stránský, P., Leviatan, A. a Cejnar, P. (2019). Excited-state quantum phase transitions in systems with two degrees of freedom. iii. interacting boson systems. *Phys. Rev. C*, **99**.

Oseledets, V. I. (1968). A multiplicative ergodic theorem. characteristic ljapunov, exponents of dynamical systems. *Trans. Moscow Math. Soc.*

P. Diaconis, S. Holmes, M. S. (2011). *Sampling from a Manifold*. Advances in Modern Statistical Theory and Applications: A Festschrift in honor of Morris L. Eaton.

Skokos, C. (2010). *The Lyapunov Characteristic Exponents and Their Computation*, pages 63–135. Springer Berlin Heidelberg.

Tabor, M. (1989). *Chaos and integrability in nonlinear dynamics: an introduction*. Wiley.

Zotos, E. (2015). Classifying orbits in the classical henon-heiles hamiltonian system. *Nonlinear Dynamics*, **79**.

Seznam obrázků

1.1 Systémy popsané řetězci podalgeber algebry $u(3)$. 10
1.2 Namapování tečných prostorů na dané orbitě fázového prostoru $\mathcal{S}$. Bod $\mathbf{x}(0)$ je zobrazen zobrazením Φ^t do bodu $\mathbf{x}(t)$.Tečný prostor $\mathcal{T}_{\mathbf{x}}\mathcal{S}$ je zobrazen zobrazením $d_{\mathbf{x}}\Phi^t$ na prostor $\mathcal{T}_{\Phi^t\mathbf{x}}\mathcal{S}$. 14
1.3 Znázornění citlivosti na změnu počátečních podmínek. Libovolně blízké body $\mathbf{x}$ a $\mathbf{y}$ se po t aplikacích zobrazení f vzdálí minimálně o pevné δ. 15
1.4 Jednoduché znázornění topologické tranzitivity funkce f. Ta alespoň částečně „promísí“ libovolné dvě otevřené podmnožiny U a W po t aplikacích, případně vývoje do času t. 16
1.5 Znázornění výpočtu mLCE pomocí řady. Z bodu $\mathbf{x}((i-1)\tau)$ je vyvíjen jednotkový vektor $\mathbf{w}((i-1)\tau)/||\mathbf{w}((i-1)\tau)||$ do bodu $\mathbf{x}(i\tau)$. Logaritmus normy obrazu vektoru je i-tým členem nekonečné řady mLCE. Vektor znovu nanormujeme a postup opakujeme do dalšího bodu vzdáleného o čas τ. 20

2.1 Konečný Lyapunovův exponent χ v čase t orbity Hénonova-Heilesova hamiltoniánu s počátečními podmínkami $\mathbf{x} = (0; 0; 0{,}35; 0{,}35)$. Exponent byl určen postupně čtyřmi integračními metodami *Vern9, DP5, TsitPap8* a *Feagin12*. Parametry pro ukončení výpočtu byly voleny $l = 400$, $\Delta = 10^{-7}$. Uveden je i výsledný exponent χ určený danou metodou. 25
2.2 Poincarého řezy energetické nadplochy $E = 0{,}1225$ fázového prostoru Hénonova-Heilesova hamiltoniánu rovinou $x = 0$. Řezy byly napočítány metodami *Verne9, DP5, TsitPap8* a *Feagin12*. Parametry pro ukončení výpočtu byly voleny $l = 400$, $\Delta = 10^{-6}$. Hodnota Lyapunovova exponentu χ je vyznačena barevnou škálou. 26
2.3 Řezy $x = 0$, $E = 0$ fázovými prostory hamiltoniánů s proměnnými parametry A a B s nulovou poruchou $C = 0$ (vztah 2.5). 28
2.4 Řezy fázovým prostorem hamiltoniánu s konstantami $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$ a $C = 0{,}25$ na energii $E = 0$. Hodnoty x jsou voleny v intervalu $\langle -\sqrt{2}, \sqrt{2}\rangle$. Rozštěpí okrajů ploch je numerickým artefaktem vykreslovacího programu. 29
2.5 Poincarého řezy fázovým prostorem hamiltoniánu s konstantami $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$ a $C = 0{,}25$ na energii $E = 0$. Hodnoty x jsou voleny v intervalu $\langle -\sqrt{2}, \sqrt{2}\rangle$. Lyapunovův exponent χ trajektorií je vyznačen barevnou škálou. 30
2.6 Řezy $E = 0$, $x = 0$ fázovým prostorem hamiltoniánu s konstantami $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$. Postupně roste síla poruchy C. Rozštěpí okrajů ploch je numerickým artefaktem vykreslovacího programu. 31
2.7 Poincarého řezy $E = 0$, $x = 0$ fázovým prostorem hamiltoniánu s konstantami $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$. Postupně roste síla poruchy C. Lyapunovův exponent χ trajektorií je vyznačen barevnou škálou. 32

2.8 Poincarého řezy $x = 0$ fázovým prostorem hamiltoniánu s konstantami $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$ a $C = 0{,}5$ na různých energetických nadplochách s energií E. Lyapunovův exponent χ trajektorií je vyznačen barevnou škálou. 33
2.9 Poincarého řezy při nulové poruše $C = 0$ a při malých hodnotách $C = 0{,}01$ a $C = 0{,}05$. Pro každý případ jsou uvedeny tři pohledy na dvourozměrnou plochu řezu $E = 0$, $x = 0$, postupně v rovinách yp_y,p_xp_y a yp_x. Zbylé parametry hamiltoniánu jsou voleny $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Hodnota Lyapunovova exponentu χ je vyznačena na barevné škále. 34
2.10 Oblast implicitně zadaná plochy (šedá) v i-té souřadnicové krychli. Červeně jsou označeny průsečíky plochy a hran krychle. 37
2.11 Průsečíky v krychli redukujeme na jeden bod. Ideálně na težiště ležící unitř krychle některého z trojúhelníků daného průsečíky. . . 37
2.12 Projekce vybraného bodu z **kroku 3** (červený bod uvnitř krychle) na původní plochu v krychli (červený bod). 38
2.13 Aproximace povrchu plochy tečné roviny v daná krychli. Plocha výsledného mnohoúhelníku je S_i. 38
2.14 Z bodu získaného v **kroku 4** (modrý bod) vyvíjíme trajektorii a určíme její Lyapunovův exponent. Zaznamenáváme průsečíky (zelené) této plochy a trajektorií vyvíjených z ostatních krychlí. . 38
2.15 Celkem k_i průsečíků (zelené a modrý bod) implicitně zadané plochy v i-té souřadnicové krychli a vyvíjených orbit s určeným Lyapunovovým exponentem pro určení podílu chaotických bodů. 38
2.16 Porovnání obsahu plochy jednotkové sféry v závislosti na hustotě kartézské sítě m určeného námi používanou metodou a přesné hodnoty. 40
2.17 Obsah plochy řezu $E = 0$, $x = 0$ s parametry $A = 0{,}1$, $B = -0{,}8$, $C = 0{,}25$ určeného numerickou metodou v závislosti na na hustotě kartézské sítě m. 40
2.18 Podíl chaotické plochy Λ řezu $E = 0$, $x = konst.$ určené prezentovanou numerickou metodou v závislosti na hodnotě x. Je volena porucha $C = 0{,}25$ s parametry hamiltoniánu $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Pro výpočet je volena kartézská síť s hodnotou $m = 20$.Výpočty byly provedeny s hodnotami parametrů $\Delta = 10^{-5}$ a $l = 400$. . . . 41
2.19 Průměrný nenulový Lyapunovův exponent λ v řezu $E = 0$, $x = konst.$ určený prezentovanou numerickou metodou v závislosti na hodnotě x. Je volena porucha $C = 0{,}25$ s parametry hamiltoniánu $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Pro výpočet je volena kartézská síť s hodnotou $m = 20$. Výpočty byly provedeny s hodnotami parametrů $\Delta = 10^{-5}$ a $l = 400$. 41
2.20 Počet trajektorií vyvíjených pro pokrytí plochy řezu $E = 0$, $x = konst.$ v závislosti na x. Parametr m kartézské sítě použité v metodě byl volen $m = 20$. Je volena porucha $C = 0{,}25$ s parametry hamiltoniánu $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. 42

2.21 Výsledný počet bodů s vypočítanou hodnotou LCE na ploše řezu $E = 0$, $x = konst.$ v závislosti na x. Parametr m kartézské sítě použité v metodě byl volen $m = 20$. Je volena porucha $C = 0{,}25$ s parametry hamiltoniánu $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$.Výpočty byly provedeny s hodnotami parametrů $\Delta = 10^{-5}$ a $l = 400$. 42
2.22 Závislost podílu chaotické plochy Λ řezu $E = 0$, $x = konst.$ na volbě souřadnice $x \in \langle -1{,}0; 1{,}0\rangle$. Znázorněny jsou dva případy se silami poruchy $C = 0{,}25$ a $C = 0{,}50$ společně se středními hodnotami $\langle \Lambda_C(x)\rangle$ určenými dle (2.9). Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Parametr m kartézské sítě použité v metodě byl volen $m = 20$. 43
2.23 Graf napočítané hodnoty průměrného nenulového Lyapunova exponentu λ řezu $E = 0$, $x = konst.$ v závislosti na volbě souřadnice $x \in \langle -1{,}0; 1{,}0\rangle$. Uvedeny jsou tři případy se silami poruchy $C = 0{,}25$, $C = 0{,}50$, $C = 0{,}75$ včetně průměrných hodnot $\langle \lambda_C\rangle$ z uvedených bodů. Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Parametr m kartézské sítě použité v metodě byl volen $m = 20$. 44
2.24 Graf závislosti podílu chaotické plochy Λ v řezu $x = 0$ na intenzitě poruchy C při konstantní energii $E = 0$. Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Body byly napočítány uvedenou numerickou metodou s parametry $m = 20$, $\Delta = 10^5$, $l = 400$. Chybový interval $\Delta\Lambda = 0{,}07$ udává odhad podílu chaotického objemu celé energetické nadroviny. 45
2.25 Graf závislosti Lyapunovova exponentu chaotických oblastí λ v řezu $x = 0$ na intenzitě poruchy C při konstantní energii $E = 0$. Uvedená chyba je $\Delta\lambda = 0{,}03\lambda$ dle (2.11). Uveden je i čistě regulární případ pro $C = 0$, kdy Lyapunovův exponent všech trajektorií je $\chi = 0$, a tedy λ není definován. Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Body byly napočítány uvedenou numerickou metodou s parametry $m = 20$, $\Delta = 10^5$, $l = 400$. 46
2.26 Graf závislosti podílu chaotické plochy Λ v řezu $x = 0$ na energii E. Uvažovaná intenzita vnější poruchy je $C = 0{,}25$. Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Jedná se o celý interval energie, na které má daný hamiltonián řešení. Body byly napočítány uvedenou numerickou metodou s parametry $m = 20$, $\Delta = 10^5$, $l = 400$. Chybový interval $\Delta\Lambda = 0{,}07$ udává odhad podílu chaotického objemu celé energetické nadroviny. 47
2.27 Graf závislosti podílu chaotické plochy Λ v řezu $x = 0$ na energii E. Uvažovaná intenzita vnější poruchy je $C = 0{,}50$. Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Jedná se o celý interval energie, na které má daný hamiltonián řešení. Body byly napočítány uvedenou numerickou metodou s parametry $m = 20$, $\Delta = 10^5$, $l = 400$. Chybový interval $\Delta\Lambda = 0{,}07$ udává odhad podílu chaotického objemu celé energetické nadroviny. 47

2.28 Graf závislosti Lyapunovova exponentu chaotických oblastí λ v řezu $x = 0$ na energii E pro dvě hodnoty poruchy $C = 0{,}25$ a $C = 0{,}50$. Uvedená chyba je $\Delta\lambda = 0{,}03\lambda$ dle (2.11). Uvedeny jsou i oblasti, kde veškeré napočítané trajektorie byly regulární s hodnotou LCE $\chi = 0$. v takovém případě není λ definován. Parametry hamiltoniánu jsou $A = 0{,}1$ a $B = -0{,}8$. Body byly napočítány uvedenou numerickou metodou s parametry $m = 20$, $\Delta = 10^5$, $l = 400$. . . . 48

Seznam tabulek

1.1 Tabulka provedení klasické limity. Obecný operátor vyjádřený pomocí kreačních a anihilačních operátorů je po transformaci vyjádřen klasickými kanonicky sdruženými polohami a hybnostmi. Zdroj (Macek a kol., 2019). 12

2.1 Algoritmus pro numerický výpočet Lyapunovova exponentu. . . . 24
2.2 Algoritmus určení odhadu chaotičnosti plochy daného řezu. 36