arXiv:2302.01475v1 [math.NA] 3 Feb 2023

非线性亥姆霍兹方程逆问题的数值解

Q. T. Le Gia[1] H. N. Mhaskar[2]

[1] 新南威尔士大学数学与统计学院，悉尼，澳大利亚[2] 数学科学研究所，克莱蒙特研究生大学，美国

摘要

本文构造了一个非线性亥姆霍兹方程逆问题的数值解，该方程定义在以原点为中心的两个同心球之间的球壳内。假设在足够多的点上已知正问题的值，我们希望通过该方程右端的切比雪夫系数确定非线性项的形式。

目录

1 引言 2 2 背景 3 3 正问题的谱方法 3 4 逆问题 5 5 数值实验 65.1 实验 1.6 5.2 实验2.7

6 计算问题 **9**

1 引言

非线性亥姆霍兹方程（NLH）用于描述电磁波在克尔介质中的传播，并刻画了非线性光学及其他领域中的一系列重要现象 [3, 4, 2]。本文研究以下 $\mathbb{R}^3$ 中的非线性亥姆霍兹方程相关的正问题和逆问题：

$$\Delta U(\boldsymbol{x}) + k^2\nu(\boldsymbol{x})U(\boldsymbol{x}) = -\epsilon(\boldsymbol{x})F(|U(\boldsymbol{x})|^2)U(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^3. \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)$为空间坐标，$U = U(\boldsymbol{x})$表示标量电场，$|\cdot|$ 表示欧几里得范数，$\Delta = \partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2 + \partial_{x_3}^2$ 是拉普拉斯算子，$\nu(\boldsymbol{x})$和 $\epsilon(\boldsymbol{x})$是一些函数。

为简便起见，我们考虑 Ω 为两个同心球面之间的球壳，半径分别为 R_0 和 R_1，且球心位于原点的情形，即

$$\Omega := \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3 : R_0 \le |\boldsymbol{x}| \le R_1\}.$$

我们还假设 ν 和 ϵ 是径向对称的，且 U 满足轴对称边界条件

$$U|_{r=R_0} = H(t), \qquad \left.\frac{\partial U}{\partial r}\right|_{r=R_0} = G(t), \quad -1 \le t \le 1, \tag{2}$$

其中 $r = |\boldsymbol{x}|$ 和 $t = \cos\theta$，其中 θ 是从北极测量的极角。解 U 也因此具有轴对称性。方程（1）可写为

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rU(r,t)) + \frac{1}{r^2}\Delta^{(L)}U(r,t) + k^2\nu(r)U(r,t) = -\epsilon(r)F(|U(r,t))|^2)U(r,t), \tag{3}$$

其中 $\Delta^{(L)}$ 是下文式（5）中定义的勒让德微分算子。

在正问题中，U是未知的，F是非线性的，例如 $F(|U|^2) = |U|^{2p}$，其中 p 是某个整数；或者是 $F = \sin(|U|^2)$，我们要找出U的近似值。在逆问题中，已知解 $U(\boldsymbol{x}_q)$ 在 $q = 1$、.....、Q处的值，问题是近似求出未知的非线性函数 F。

本文结构如下。第3节介绍一种用于正问题的谱方法，以及一种计算非线性项的快速算法。第4节描述了一种逆问题算法，通过 F 的切比雪夫系数来识别其非线性。第5节给出一些数值实验，并作为本文的结论。

2 背景

勒让德多项式 P_ℓ 是一个次数为 ℓ 、具有首项系数的多项式。我们有如下正交关系

$$\int_{-1}^{1} P_\ell(t)P_{\ell'}(t)dt = \frac{2\ell+1}{2}\delta_{\ell,\ell'}. \tag{4}$$

多项式 P_ℓ 满足

$$\Delta^{(L)}P_\ell(t) = (1-t^2)P_\ell''(t) - 2tP_\ell'(t) = -\ell(\ell+1)P_\ell(t) = -\lambda_\ell P_\ell(t). \tag{5}$$

可积函数 g 的傅里叶-勒让德系数： $[-1,1] \to \mathbb{R}$定义为

$$\hat{g}(\ell) = \int_{-1}^{1} g(t)P_\ell(t)dt, \qquad \ell \in \mathbb{Z}_+, \tag{6}$$

为计算两个函数乘积的傅里叶-勒让德系数，我们定义

$$\Gamma(L;\ell,\ell') = \frac{2L+1}{2}\int_{-1}^{1} P_L(t)P_\ell(t)P_{\ell'}(t)dt. \tag{7}$$

已知 $0 \le \Gamma(L;\ \ell,\ \ell') \le 1$ 以及 $\sum_{L=0}^{\ell+\ell'}\Gamma(L;\ell,\ \ell') = 1$，参见 [1, 第 5]章。显然，以下形式方程成立：

$$\widehat{g_1 g_2}(L) = \sum_{\ell,\ell'}\Gamma(L;\ell,\ell')\hat{g}_1(\ell)\hat{g}_2(\ell'). \tag{8}$$

对于傅里叶-勒让德系数序列，我们记

$$\left(\hat{g}_1 \star \hat{g}_2\right)(L) = \sum_{\ell,\ell'}\Gamma(L;\ell,\ell')\hat{g}_1(\ell)\hat{g}_2(\ell'). \tag{9}$$

3 正问题的谱方法

本节讨论如何构造方程 (1) 的数值解。为此，我们首先建立一些记号。

正问题的谱方法是求一个由U_N 定义的近似解

$$U_N(r,t) = \sum_{\ell=0}^{N} u_\ell(r)P_\ell(t), \qquad u_\ell(r) = \widehat{u(r,\cdot)}(\ell), \tag{10}$$

并求出系数 $u_\ell(r)$，使得 U_N 满足（3）。将 U_N代入（3），利用（5）可得

$$\frac{2}{2\ell+1}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial^2 r}(ru_\ell)-\frac{\lambda_\ell}{r^2}u_\ell+k^2\nu(r)u_\ell\right)=-\epsilon(r)\mathcal{F}_\ell, \tag{11}$$

其中

$$\mathcal{F}_\ell=\mathcal{F}_\ell(r)=\int_{-1}^{1}U_N(r,t)F(|U_N(r,t)|^2)P_\ell(t)dt. \tag{12}$$

等价地，

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}(ru_\ell)=\frac{\lambda_\ell}{r}u_\ell-rk^2\nu u_\ell-r\epsilon(r)(\ell+1/2)\mathcal{F}_\ell \tag{13}$$

由（12）可知，$\mathcal{F}_L$是$U_N(r,t)F(|U_N(r,t)|^2)$的傅里叶-勒让德系数。显然，存在 α,β使得 $|U_N|^2\in[\alpha,\beta]$。我们假设 α,β 已知。我们的策略是利用其傅里叶-切比雪夫展开来近似 F：

$$F(|U_N|^2)\approx\mathcal{P}_d\left(\frac{2|U_N|^2-\alpha-\beta}{\beta-\alpha}\right)=\sum_{k=0}^{2^d-1}a_kT_k\left(\frac{2|U_N|^2-\alpha-\beta}{\beta-\alpha}\right), \tag{14}$$

其中 T_k是由 $T_k(\cos\phi)=\cos(k\phi)$定义的切比雪夫多项式。我们需要用 a_k 表示 $U_NF(|U_N|^2)$的傅里叶-勒让德系数 $\mathcal{F}_L$。在第6节中，我们将介绍一种高效完成此任务的通用方法。

为此，我们首先利用（8）注意到

$$|U_N|^2(t)=\left(\sum_{\ell=0}^{N}u_\ell P_\ell(t)\right)^2=\sum_{\ell=0}^{2N}d_LP_L(t),\qquad d_L=(\{u_\ell\}\star\{u_\ell\})(L),$$

$$\frac{2|U_N(t)|^2-\alpha-\beta}{\beta-\alpha}=\frac{1}{\beta-\alpha}\left\{(2d_0-\alpha-\beta)P_0(t)+2\sum_{\ell=1}^{2N}d_LP_L(t)\right\}. \tag{15}$$

类似地，

$$|U_N|^2U_N=\left(\sum_{\ell=0}^{2N}d_\ell P_\ell(t)\right)\left(\sum_{\ell=0}^{N}u_{\ell'}P_{\ell'}(t)\right)=\sum_{L=0}^{3N}c_LP_L(t),\qquad c_L=(\{d_\ell\}\star\{u_\ell\})(L). \tag{16}$$

通过比较 (16) 和 (12)，我们还得到 $c_L=\frac{2L+1}{2}\mathcal{F}_L$.

我们将二阶常微分方程组 (13) 转化为一阶常微分方程，如下所示。

对于 $\ell = 0, \ldots, N$ 令 $v_\ell = \frac{d}{dr}(ru_\ell)$，那么边界条件为 $v_\ell(R_0) = u_\ell(R_0) + R_0 \frac{du_\ell}{dr}|_{r=R_0} = h_\ell + R_0 g_\ell$.

Let

$$\vec{Z} = [Z_1\ Z_2\ \cdots\ Z_{2N+2}]^\top = [ru_0\ ru_1\ \cdots\ ru_N\ v_0\ v_1\ \cdots\ v_N]^\top$$

我们可以将上述系统改写为形式 $d\vec{Z}/dr = \mathfrak{F}(r, \vec{Z})$，其中

$$\mathfrak{F}(r, \vec{Z}) = \begin{bmatrix} Z_{N+2} \\ Z_{N+3} \\ \vdots \\ Z_{2N+2} \\ \frac{\lambda_0}{r^2} Z_1 - k^2\nu(r)Z_1 - r\epsilon(r)(0+1/2)\mathcal{F}_0 \\ \frac{\lambda_1}{r^2} Z_2 - k^2\nu(r)Z_2 - r\epsilon(r)(1+1/2)\mathcal{F}_1 \\ \vdots \\ \frac{\lambda_L}{r^2} Z_{N+1} - k^2\nu(r)Z_{N+1} - r\epsilon(r)(L+1/2)\mathcal{F}_N \end{bmatrix}$$

初始条件为

$$\begin{aligned} Z(R_0) &= [ru_0(R_0)\ ru_1(R_0)\ \cdots\ ru_N(R_0)\ v_0(R_0)\ v_1(R_0)\ \cdots\ v_N(R_0)] \\ &= [R_0h_0\ R_0h_1\ \cdots\ R_0h_N\ h_0 + R_0g_0\ h_1 + R_0g_1\ \cdots\ h_N + R_0g_N] \end{aligned}$$

现在可以使用标准常微分方程求解器。在我们的实验中，使用了 Matlab 中的自适应常微分方程求解器 ode45®。

4 逆问题

在逆问题中，已知点集 $\mathcal{R} := \{r_i$ 上的值 $U(r_i)$: $i = 1, \ldots\ldots, M\}$ 这些点在区间 $[R_0, R_1]$ 上可能并非等间距，因为它们可能来自自适应常微分方程求解器。相应的值 $u_\ell(r_j)$ 可以通过数值积分计算得到。在我们的数值实验中，可以直接从常微分方程求解器的数值解中提取 u_ℓ。

我们的方法是先用（11）计算 $\mathcal{F}_L$。反过来，这需要针对非等距取值 r_j，计算 ru_ℓ 在 $r = r_j$ 处的二阶导数。计算方式如下：

$$\left.\frac{\partial^2}{\partial^2 r}(ru_\ell(r))\right|_{r=r_j} \approx \frac{h_j^- r_{j+1}u_\ell(r_{j+1}) + h_j^+ r_{j-1}u_\ell(r_{j-1}) - (h_j^+ + h_j^-)r_j u_\ell(r_j)}{0.5h_j^- h_j^+ (h_j^+ + h_j^-)},$$

其中 $h_j^+ = r_{j+1} - r_j$ 和 $h_j^- = r_j - r_{j-1}$。然后，我们通过以下方式计算 $r = r_j$ 处的近似 $\mathcal{F}_\ell$：

$$\mathcal{F}_\ell = \frac{-2}{(2\ell+1)\epsilon(r)} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial^2 r}(r u_\ell) - \frac{\lambda_\ell}{r^2} u_\ell + k^2 \nu(r) u_\ell \right)$$

接下来的任务是根据 $\mathcal{F}_L$的值近似求出 F。由于已知$\mathcal{F}_L$，因此得到一个（不一定是方阵的）非线性方程组。接着，通过最小二乘法计算确定 a_k。因此，问题归结为利用展开式（15）计算 a_k。

5 数值实验

平面波的展开式见 Morse 和 Ingard [5]

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell P_\ell(\widehat{\boldsymbol{k}} \cdot \widehat{\boldsymbol{r}}) j_\ell(kr), \tag{17}$$

其中，$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}/\|\boldsymbol{k}\|$、$\widehat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r}/\|\boldsymbol{r}\|$、$P_\ell(t)$是 ℓ次勒让德多项式，而 $j_\ell(kr)$是第一类 ℓ阶球贝塞尔函数。这里，$\boldsymbol{r}$ 是长度为 r的位置向量，$\boldsymbol{k}$ 是长度为 k的波矢。在 $\boldsymbol{k}$ 与 z轴对齐的特殊情况下，有

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell P_\ell(\cos\theta) j_\ell(kr),$$

其中，θ 是 $\boldsymbol{r}$的球坐标极角。令 $t = \cos\theta$，则有 $H = e^{ikR_0 t}$，并且

$$h_\ell = (2\ell+1) i^\ell j_\ell(kR_0)$$

并利用恒等式 $\frac{d}{dz} j_\ell(z) = j_{\ell-1}(z) - \frac{(\ell+1)}{z} j_\ell(z)$，我们得到

$$g_\ell = (2\ell+1) i^\ell \left. \frac{\partial j_\ell(kr)}{\partial r} \right|_{r=R_0} = (2\ell+1) i^\ell \frac{1}{k} \left(j_{\ell-1}(kR_0) - \frac{\ell+1}{kR_0} j_\ell(kR_0) \right).$$

5.1 实验 1

我们考虑正问题

$$\Delta U(\boldsymbol{x}) + k^2 \nu U(\boldsymbol{x}) = -\epsilon |U(\boldsymbol{x})|^4 U(\boldsymbol{x}), \tag{18}$$

其中 k, ν 和 ϵ 是球壳 Ω 上的正常数，其内半径为 $R_0 = 1$ ，外半径为 $R_1 = 2$。内球面的边界条件为

$$U(R_0) = e^{ikR_0 t}, \quad \frac{\partial U}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} e^{ikrt}|_{r=R_0}, \quad t = \cos\theta$$

正问题的数值解 $U(R_1)$ 如图1左图所示。

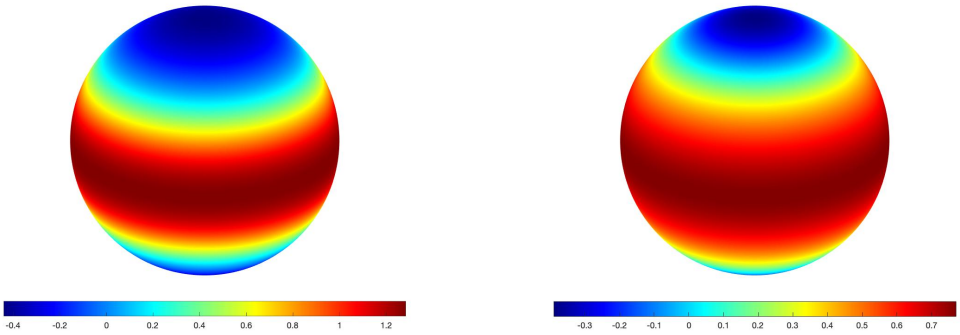

图1：实验 1（左图）和实验2（右图）中， $\epsilon = 2$、 $\nu = 0.1$ 和 $k = 1$ 对应的 $U(r = R_1)$ 与 $R_1 = 2$ 。

现在考虑逆问题。在右端，在我们的框架中 $F(|U|^2) = |U|^4$，因此 $F(t) = t^2$。函数 F 可表示为切比雪夫多项式 T_0 和 T_2 的线性组合，如下：

$$F(t) = \frac{1}{2}T_0(t) + \frac{1}{2}T_2(t).$$

因此，精确系数为 $a_0 = 0.5$、 $a_1 = 0$ 和 $a_2 = 0.5$。逆问题得到的计算系数 a_0, a_1, a_2 在各个环上的结果见表1。

5.2 实验2

令 $F(|U|^2) = \sin |U|^2$和 $|U|^2 \in [\alpha, \beta]$。令

$$q_k(z) := \begin{cases} J_0(z), & \text{if } k = 0, \\ 2J_k(z), & \text{if } k \in \mathbb{N}, \end{cases}$$

r	a_0	a_1	a_2
1.0009	5.0000e-01	-6.3171e-06	5.0000e-01
1.0018	5.0000e-01	-6.2524e-06	5.0000e-01
1.0027	5.0000e-01	-6.3744e-06	5.0000e-01
1.0036	4.9591e-01	-7.1347e-03	4.9815e-01
1.0065	4.9995e-01	-6.3584e-05	4.9997e-01
1.0094	4.9996e-01	-6.1446e-05	4.9997e-01
1.0123	4.9995e-01	-6.5269e-05	4.9997e-01
1.0152	4.9992e-01	-1.2534e-04	4.9995e-01
1.0181	4.9995e-01	-6.4420e-05	4.9997e-01

表1： $F(|U|^2) = |U|^4$ 的切比雪夫系数（计算值）

其中 J_k 是 k 阶贝塞尔函数。根据 Watson的书， [6, 第 22 页，(3)-(4)], ，对于 $t \in [-1, 1]$，我们有：

$$\begin{aligned}
\sin(\gamma + zt) &= \sin\gamma\cos(zt) + \cos\gamma\sin(zt) \\
&= \sin\gamma\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k q_{2k}(z)T_{2k}(t) + \cos\gamma\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k q_{2k+1}(z)T_{2k+1}(t) \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}\sin\left(\gamma + \frac{2k\pi}{2}\right)q_{2k}(z)T_{2k}(t) + \sum_{k=0}^{\infty}\sin\left(\gamma + \frac{(2k+1)\pi}{2}\right)q_{2k+1}(z)T_{2k+1}(t) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\sin\left(\gamma + \frac{n\pi}{2}\right)q_n(z)T_n(t).
\end{aligned}$$

因此，若 $\gamma = (\alpha+\beta)/2$ 和 $z = (\beta-\alpha)/2$， $|U|^2 = \gamma + zt$，则 $t \in [-1, 1]$ 和

$$\sin(|U|^2) = \sum_{n=0}^{\infty}\sin\left(\frac{\alpha+\beta}{2} + \frac{n\pi}{2}\right)q_n\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right)T_n(t), \quad t = \frac{2|U|^2 - \alpha - \beta}{\beta - \alpha}.$$

假设 $|U| \in [0, 1]$，也就是说， $\alpha = 0$， $\beta = 1$，并且我们仅使用上述无穷级数的前 8 项来定义

$$F(|U|^2) = \sum_{n=0}^{7}\sin\left(\frac{1}{2} + \frac{n\pi}{2}\right)q_n\left(\frac{1}{2}\right)T_n(t), \quad t = 2|U|^2 - 1. \tag{19}$$

因此，对于 $n = 0$、.....、7，精确系数为 $a_n = \sin(1/2 + n\pi/2)q_n(1/2)$。正问题的数值解 $U(R_1)$ 显示在图1的右图中。对于逆问题，每个环上 $n = 0$、.....、7 对应的计算系数 a_n 列于表2中。

	a_0	a_1	a_2	a_3
精确	4.4993e-01	4.2522e-01	-2.9345e-02	-4.4998e-03
$r=1.001634$	4.4993e-01	4.2522e-01	-2.9344e-02	-4.4999e-03
$r=1.003268$	4.4993e-01	4.2522e-01	-2.9344e-02	-4.4999e-03
$r=1.004902$	4.4993e-01	4.2522e-01	-2.9344e-02	-4.4999e-03
	a_4	a_5	a_6	a_7
精确	1.5412e-04	1.4135e-05	-3.2224e-07	-2.1090e-08
$r=1.001634$	1.5409e-04	1.4148e-05	-3.2558e-07	-2.0502e-08
$r=1.003268$	1.5408e-04	1.4150e-05	-3.2638e-07	-2.0376e-08
$r=1.004902$	1.5408e-04	1.4150e-05	-3.2587e-07	-2.0499e-08

表2：如式 (19) 所示的 $F(|U|^2)$ 的切比雪夫系数计算值

6 计算问题

令 $f \in C[-1,1]$,

$$\mathcal{P}_d(t) = \sum_{k=0}^{2^d-1} a_k T_k(t), \quad \mathbb{P}_d(t) = \mathcal{P}_d(f(t)), \qquad t \in [-1,1].$$

我们希望利用 f 的傅里叶-勒让德系数和系数 a_k，显式且高效地计算 $\mathbb{P}_d$ 的傅里叶-勒让德系数 $\{b_\ell\}$。

我们采用归纳法。如果 $d=1$，则可观察到

$$\begin{aligned} \langle T_0(f), P_0\rangle = 1, \qquad \langle T_1(f), P_1\rangle = \hat{f}(1) \\ \mathbb{P}_1(t) = \frac{1}{2} + \frac{3}{2}\hat{f}(1)P_1(t). \end{aligned} \tag{20}$$

接下来，我们假设多项式次数为 $\le 2^{d-1}-1$ 时问题已得到解决。利用递推关系

$$T_{2^j+k} = 2T_{2^j}T_k - T_{2^j-k}, \qquad j = 1,2,\cdots,\ k = 1,\cdots 2^j, \tag{21}$$

不难推导出

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{2^d-1} a_k T_k &= \sum_{k=0}^{2^{d-1}-1} (a_k - a_{2^d-k})T_k + 2T_{2^{d-1}} \sum_{k=0}^{2^{d-1}} a_{k+2^{d-1}} T_k \\ &= \mathcal{Q}_{d-1} + 2T_{2^{d-1}}\widetilde{\mathcal{R}}_{d-1} \end{aligned} \tag{22}$$

~对于次数至多为 2^{d-1} 的多项式 $\mathcal{Q}_{d-1}$、$\mathcal{R}_{d-1}$。令 $\mathbb{Q}_{d-1}(t) = \sim\mathcal{Q}_{d-1}(f(t))$，以及 $\mathbb{R}_{d-1}(t) = \mathcal{R}_{d-1}(f(t))$。根据归纳假设，我们

现在可以计算

$$\widehat{\mathbb{P}_d} = \widehat{\mathbb{Q}_{d-1}} + 2(\widehat{T_{2^{d-1}} \circ f}) \star \widehat{\widetilde{\mathbb{R}}_{d-1}}. \tag{23}$$

$\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$利用（20）和（23），可以通过 $O(d)$ 次卷积计算出 $\mathbb{P}_d = F$。

致谢 作者感谢澳大利亚研究委员会的支持。Q.L.G. 获得了 DP180100506 项目的资助。HNM 的研究部分由美国陆军研究办公室资助项目 W911NF2110218 和美国国家科学基金会数学科学部资助项目 2012355 提供支持。

参考文献

[1] R.Askey. 《正交多项式与特殊函数》. 工业与应用数学学会，1975年。

[2] G. Baruch、G. Fibich 和 S. Tsynkov。针对一维空间中存在材料不连续性的非线性亥姆霍兹方程的高阶数值方法。2007年。[3] G. Fibich 和 S. Tsynkov。针对具有反向散射的非线性波传播的高阶双向人工边界条件。《计算物理学杂志》，171：632–677，2001年。[4] G. Fibich 和 S. Tsynkov。使用非正交展开求解非线性亥姆霍兹方程的数值解。《计算物理学杂志》，210：183–224，2005年。[5] P. M. Morse 和 K. U. Ingard。《理论声学》第1–2卷。麦格劳-希尔图书公司，1968年。[6] G. N. Watson。《贝塞尔函数理论论述》。剑桥数学丛书，1996年。