

# 一类 Schrödinger 方程的反问题 及其变分同化方法

张 瑰<sup>1</sup> 张 梅<sup>2</sup> 方涵先<sup>3</sup> 刘希强<sup>1</sup>

(1. 解放军理工大学理学院 江苏 南京 211101)

(2. 南京农业大学理学院 江苏 南京 210095)

(3. 解放军理工大学气象学院 江苏 南京 211101)

[摘要] 主要讨论一类 Schrödinger 方程的反问题,利用变分同化方法,给出了最速下降的迭代格式,通过已知的观测值对模式的初值和未知点源进行最优修正.文中不仅给出了反问题的收敛格式,还进行了数值计算,其结果与理论结果吻合.

[关键词] Schrödinger 方程,反问题,变分同化,迭代

[中图分类号] O241 [文献标志码] A [文章编号] 1001-4616(2012)02-0024-05

## The Variational Assimilation Method of Inverse Problem for a Class of Schrödinger Equations

Zhang Gui<sup>1</sup> Zhang Mei<sup>2</sup> Fang Hanxian<sup>3</sup> Liu Xiqiang<sup>1</sup>

(1. Institute of Science, PLA University of Science and Technology, Nanjing 211101, China)

(2. Institute of Science, Nanjing Agriculture University, Nanjing 210095, China)

(3. Institute of Meteorology, PLA University of Science and Technology, Nanjing 211101, China)

**Abstract:** The inverse problem of Schrödinger equation was considered in this paper. And the fast speed iterative process was given with variational assimilation method. The initial value and unknown point sources of the model were modified with the known observations. An iteration scheme for the inverse problem of the Schrödinger equations was obtained, and the theoretical results were in good agreement with the experimental results.

**Key words:** Schrödinger equation, inverse problem, variational assimilation, iterative

Schrödinger 方程是现代科学中具有普遍意义的重要方程之一,它是非相对量子力学中微观粒子的“波”函数所满足的方程.在光学、量子力学、等离子物理、流体力学中有广泛的应用.关于 Schrödinger 方程的解,国内外不少学者<sup>[1-2]</sup>进行了深入研究,得出了一些有价值的结果.上述工作都是从 Schrödinger 方程的正问题入手,即已知相关的参数和初边值条件,对原问题的解析解(或近似解析解)进行分析,而关于 Schrödinger 方程反问题研究的工作还不多见.

本文利用变分同化方法研究 Schrödinger 方程的反问题.所谓变分同化方法(或变分资料同化),就是综合利用模型的有关信息和各种统计数据中所包含的信息,对模型中未知或误差较大的初边值条件和模式参数进行最优估计.在实际问题和科学研究的许多领域<sup>[3]</sup>中,例如地质勘探问题,医学中的 CT 成像技术,地球物理学,聚合物化学,气象学中的大气探测、遥感以及物理海洋学模式中的反演问题等等,变分资料同化技术都有着广泛的应用.目前,资料同化技术的研究和发展已成为国际上的一个热点问题.张瑰、黄思训等<sup>[4-6]</sup>分别以一维扩散方程和一维“on-off”模式为例,从理论上对变分同化方法反演得到的初值和参数的收敛精度进行估计,证明了该方法的有效性.方涵先、黄思训<sup>[7]</sup>利用变分伴随方法对下投式探空仪测

收稿日期: 2011-02-21.

基金项目: 国家自然科学基金(41105012, 40906044)、解放军理工大学预研基金(20110510).

通讯联系人: 张 瑰, 博士, 副教授, 研究方向: 数学物理反问题与变分同化方法. E-mail: zhanggui73@163.com

风的二维模型进行了数值试验,结果表明该方法对示踪物轨迹反演是十分有效的.

张瑰等<sup>[8]</sup>将变分同化方法推广到复数域中的 Schrödinger 方程中去,通过对变分同化方法得到的初值、预报值的收敛精度进行估计,从理论上得到该方法的有效性.本文利用变分同化方法,进一步讨论一类 Schrödinger 方程的初值和参数反演问题.通过对问题进行求解,得到了初值和参数的迭代格式,并以一种特殊初值为例进行数值实验.

## 1 反问题的提出

本文具体讨论如下形式的 Schrödinger 方程的初边值问题

$$\begin{cases} i \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \lambda(t) \sum_{k=1}^N \alpha_k H(x - x_k), & 0 < x < 1, 0 < t < T, \\ u(x, 0) = u_0(x), \\ u(0, t) = u(1, t) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

其中

$$f(x) = \sum_{k=1}^N \alpha_k H(x - x_k) \in L^2(0, 1), \quad (2)$$

这里  $H$  为 Heviside 函数:

$$H(x - x_k) = \begin{cases} 1, & x \geq x_k, \\ 0, & x < x_k. \end{cases}$$

假定  $\lambda(t) \in C^1[0, T]$ ,  $\lambda(0) \neq 0$ , 且  $\sum_{k=1}^N \alpha_k = 0$ ,  $x_k \in (0, 1)$ , ( $k = 1, \dots, N$ )

在  $L^2(0, 1)$  定义算子  $A$ :

$$(Au)(x) = -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, 0 < x < 1, \quad (3)$$

记  $A$  的定义域为:  $D(A) = (H^2(0, 1) \cap H_0^1(0, 1)) \times (H^2(0, 1) \cap H_0^1(0, 1))$ .

假设问题(1)的初值  $u_0(x)$  和  $\{x_k\}$  ( $k = 1, \dots, N$ ) 已知, 且  $u_0 \in D(A)$ , 则由 Hille-Yosida 定理可知, 此时问题(1)存在惟一解  $u = u_1 + iu_2$ , 且

$$u_1, u_2 \in C^1([0, \infty), L^2(0, 1)) \cap C^0([0, \infty), H^2(0, 1) \cap H_0^1(0, 1)).$$

此外成立能量等式

$$\|u(t)\|_{L^2(0, 1)}^2 = \|u_1(t)\|_{L^2(0, 1)}^2 + \|u_2(t)\|_{L^2(0, 1)}^2 = \|u_0^1\|_{L^2(0, 1)}^2 + \|u_0^2\|_{L^2(0, 1)}^2 = \text{const}.$$

因此解是稳定的.

现在的问题是: 假设我们可以得到关于  $u(x, t)$  的资料观测, 如何对问题(1)的初值  $u_0(x)$  和  $\{x_k\}$  ( $k = 1, \dots, N$ ) 进行反演, 这样就提出了 Schrödinger 方程的反问题.

## 2 $u_0(x)$ 和 $\{x_k\}$ ( $k = 1, \dots, N$ ) 的变分同化方法反演

下面利用变分同化方法对 Schrödinger 方程的反问题进行求解, 假定在时间  $[0, T]$  内观测数据已知, 记为  $u^{\text{obs}}$ , 我们要寻找最优的  $u_0(x)$  和  $x_k$ , 使得目标泛函

$$J[u_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{1}{2} \int_0^T \int_0^1 |u(x, t) - u^{\text{obs}}(x, t)|^2 dx dt \quad (4)$$

达到极小.

由于 Heaviside 函数的出现, 系统不可微, 不再有切线性模式, Huang 等<sup>[9]</sup>分别对低维不可微预报系统、高维不可微系统在整体和局部观测资料情况下建立了广义变分同化方法. 本文在通常的变分同化方法基础上, 引进弱形式, 利用弱形式导出伴随.

为了讨论方便, 设  $\alpha_k \in \mathbf{R}$ ,  $\lambda(t) = \lambda_1(t) + i\lambda_2(t)$ . 于是由(1)推出实形式

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial^2 u_2(x,t)}{\partial x^2} = \lambda_2(t) \sum_{k=1}^N \alpha_k H(x-x_k), & 0 < x < 1, 0 < t < T, \\ \frac{\partial u_2(x,t)}{\partial t} - \frac{\partial^2 u_1(x,t)}{\partial x^2} = -\lambda_1(t) \sum_{k=1}^N \alpha_k H(x-x_k), & 0 < x < 1, 0 < t < T, \\ u_1(x,0) = u_1^0, \quad u_2(x,0) = u_2^0, \\ u_1(0,t) = u_1(1,t) = u_2(0,t) = u_2(1,t) = 0. \end{cases} \quad (5)$$

为了减少模型的整体预报误差,反演出最优的  $u_0(x)$  和  $x_k$ . 类似于[10]中的方法,分3步导出目标泛函(4)关于  $u_0(x)$  和  $x_k$  的梯度:  $\nabla_{x_k} J, \nabla_{u_0} J$ ; 然后利用最速下降法迭代求解.

第一步: 给出  $u(x,t)$  和  $u_0(x), x_k$  的扰动.

对  $u_0(x)$  和  $x_k$  扰动如下:

$$u_0 \rightarrow \tilde{u}_0 + \alpha U, \quad x_k \rightarrow x_k + \alpha \tilde{x}_k,$$

相应地  $\tilde{u}(x,t)$  为扰动后方程的解,定义  $J$  在  $u_0, x_k$  点沿  $U, \tilde{x}_k$  方向的 Gâteaux 导数为

$$\hat{u} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\tilde{u} - u}{\alpha}, \quad (6)$$

则

$$J'[u_0, x_1, \dots, x_N; \hat{x}_1, \dots, \hat{x}_N] = \int_0^T \int_0^1 [(u_1 - u_1^{\text{obs}}) \hat{u}_1 + (u_2 - u_2^{\text{obs}}) \hat{u}_2] dt dx. \quad (7)$$

另一方面,由泛函变分的定义可知,

$$J'[u_0, x_1, \dots, x_N; \hat{x}_1, \dots, \hat{x}_N] = \sum_{k=1}^N \nabla_{x_k} J \cdot \hat{x}_k + \int_0^1 (\nabla_{u_1} J \cdot U_1 + \nabla_{u_2} J \cdot U_2) dx. \quad (8)$$

第二步: 建立模式(2)的弱形式.

对(5)中前两个公式分别乘以  $P_1, P_2$  并积分,得到

$$\begin{aligned} & \int_0^1 u_1 P_1 \Big|_{t=0}^{t=T} dx - \int_0^1 \int_0^T u_1 \frac{\partial P_1}{\partial t} dt dx + \int_0^1 u_2 P_2 \Big|_{t=0}^{t=T} dx - \\ & \int_0^1 \int_0^T u_2 \frac{\partial P_2}{\partial t} dt dx + \int_0^T \left( P_1 \frac{\partial u_2}{\partial x} - u_2 \frac{\partial P_1}{\partial x} \right) \Big|_{x=0}^{x=1} dt - \\ & \int_0^T \left( P_2 \frac{\partial u_1}{\partial x} - u_1 \frac{\partial P_2}{\partial x} \right) \Big|_{x=0}^{x=1} dt + \int_0^T \int_0^1 u_2 \frac{\partial^2 P_1}{\partial x^2} dx dt - \int_0^T \int_0^1 u_1 \frac{\partial^2 P_2}{\partial x^2} dx dt = \\ & \int_0^T \lambda_2 \sum_{k=1}^N \alpha_k \int_{x_k}^1 P_1 dx dt - \int_0^T \lambda_1 \sum_{k=1}^N \alpha_k \int_{x_k}^1 P_2 dx dt. \end{aligned} \quad (9)$$

同时利用公式(6)得到

$$\begin{aligned} & \int_0^1 \hat{u}_1 P_1 \Big|_{t=0}^{t=T} dx - \int_0^1 \int_0^T \hat{u}_1 \frac{\partial P_1}{\partial t} dt dx + \int_0^1 \hat{u}_2 P_2 \Big|_{t=0}^{t=T} dx - \\ & \int_0^1 \int_0^T \hat{u}_2 \frac{\partial P_2}{\partial t} dt dx + \int_0^T \left( P_1 \frac{\partial \hat{u}_2}{\partial x} - \hat{u}_2 \frac{\partial P_1}{\partial x} \right) \Big|_{x=0}^{x=1} dt - \\ & \int_0^T \left( P_2 \frac{\partial \hat{u}_1}{\partial x} - \hat{u}_1 \frac{\partial P_2}{\partial x} \right) \Big|_{x=0}^{x=1} dt + \int_0^T \int_0^1 \hat{u}_2 \frac{\partial^2 P_1}{\partial x^2} dx dt - \int_0^T \int_0^1 \hat{u}_1 \frac{\partial^2 P_2}{\partial x^2} dx dt = \\ & \int_0^T \lambda_2 \sum_{k=1}^N \alpha_k P_1(t, x_k) \hat{x}_k dt - \int_0^T \lambda_1 \sum_{k=1}^N \alpha_k P_2(t, x_k) \hat{x}_k dt. \end{aligned} \quad (10)$$

第三步: 建立伴随模式.

由(7)~(10)可得如下的伴随模式:

$$\begin{cases} -\frac{\partial P_1}{\partial t} - \frac{\partial^2 P_2}{\partial x^2} = (u_1 - u_{1\text{obs}}), \\ -\frac{\partial P_2}{\partial t} + \frac{\partial^2 P_1}{\partial x^2} = (u_2 - u_{2\text{obs}}), \\ P_1 \Big|_{t=T} = 0, \quad P_2 \Big|_{t=T} = 0, \\ P_1 \Big|_{x=0} = P_1 \Big|_{x=1} = P_2 \Big|_{x=0} = P_2 \Big|_{x=1} = 0. \end{cases} \quad (11)$$

由(11) 推得

$$\begin{aligned}
 & - \int_0^1 U_1 P_1(0) dx - \int_0^1 U_2 P_2(0) dx + \sum_{k=1}^N \nabla_{x_k} J \cdot \hat{x}_k + \\
 & \int_0^1 \nabla_{u_1} J \cdot U_1 dx + \int_0^1 \nabla_{u_2} J \cdot U_2 dx = \\
 & \int_0^T \lambda_2 \sum_{k=1}^N \alpha_k P_1(t, x_k) \hat{x}_k dt - \int_0^T \lambda_1 \sum_{k=1}^N \alpha_k P_2(t, x_k) \hat{x}_k dt,
 \end{aligned}$$

因此求出  $\nabla_U J$  和  $\nabla_{x_k} J$  如下:

$$\nabla_{U_1} J = P_1(0), \quad \nabla_{U_2} J = P_2(0), \quad (12)$$

$$\nabla_{x_k} J = \int_0^T \left[ \lambda_2 \sum_{k=1}^N \alpha_k P_1(t, x_k) - \lambda_1 \sum_{k=1}^N \alpha_k P_2(t, x_k) \right] dt. \quad (13)$$

对(11) 进一步简化, 令  $P = P_1 + iP_2$ ,  $P(0) = P_1(0) + iP_2(0)$  则

$$\begin{cases} i \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} = (u_2 - u_{2\text{obs}}) - i(u_1 - u_{1\text{obs}}) = i(U - U_{\text{obs}}), \\ P|_{t=T} = 0, \\ P|_{x=0} = P|_{x=1} = 0, \end{cases} \quad (14)$$

且

$$\nabla_U J = P(0). \quad (15)$$

### 3 $u_0(x)$ 和 $\{x_k\} (k = 1, \dots, N)$ 的迭代格式

有了泛函对于  $u_0(x)$  和  $\{x_k\} (k = 1, \dots, N)$  的梯度形式(15) 和(13) 后, 可以采用迭代方法<sup>[10]</sup> 求得最优的初值  $u_0(x)$  和未知点源  $\{x_k\} (k = 1, \dots, N)$ .

记  $u_0^{(0)}, x_k^{(0)}$  为迭代初始猜测值, 采用牛顿迭代方法设计如下的最速下降的迭代格式:

$$u_0^{i+1} = u_0^i - (\nabla_U J)|_{(u_0^i, x_k^i)} \cdot \rho_U^i, \quad (16a)$$

$$x_k^{i+1} = x_k^i - (\nabla_{x_k} J)|_{(u_0^i, x_k^i)} \cdot \rho_{x_k}^i, \quad (16b)$$

其中  $\rho_U^i$  和  $\rho_{x_k}^i$  分别是  $u_0(x)$  和  $\{x_k\} (k = 1, \dots, N)$  的迭代步长.

$J[u_0^{(0)}, x_k^{(0)}]$  和  $\rho^0$  分别作为目标泛函和步长的初值, 每次迭代调整步长使得目标泛函在迭代过程中单调下降, 即

$$J[u_0^{(i+1)}, x_k^{(i+1)}] < J[u_0^{(i)}, x_k^{(i)}].$$

通过迭代, 使得当目标泛函(4) 满足迭代终止条件

$$J \leq \varepsilon \quad (\varepsilon \text{ 是给定的很小的正实数}) \quad (17)$$

时, 迭代结束, 此时序列

$$u_0^{(i+1)} \rightarrow u_0^*, \quad x_k^{(i+1)} \rightarrow x_k^*, \quad (18)$$

$u_0^*, x_k^*$  即为所求的最优初值和未知点源. (整个迭代过程可参见文[10] 中的迭代示意图)

### 4 数值实验与讨论

由于问题的复杂性, 我们考虑

$$f(x) = \sum_{k=1}^N \alpha_k H(x - x_k) = 0 \quad (19)$$

的情形. 以一种特殊初值  $u_0(x) = A \sin(m\pi x)$  ( $A > 0$  表示频率) 为例, 通过对反演得到的初值进行数值实验, 来验证本文方法的有效性.

数值结果见图1 与图2, 其中图1 给出了反演所得到的最优初值与真实初值之间的拟合程度; 图2 给出观测误差对最优初值与真实初值之间误差的影响. 由图可知, 当观测误差充分小时, 反演得到的初值误差也充分小, 即反演得到的初值是稳定的, 因此利用变分方法反演初值是有效的.

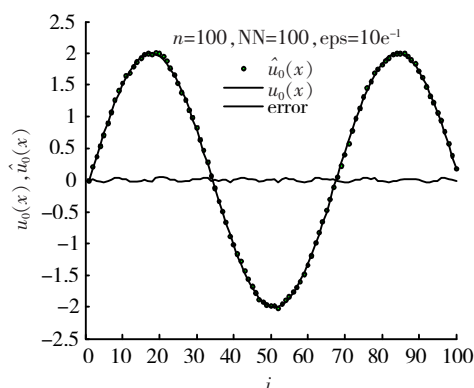
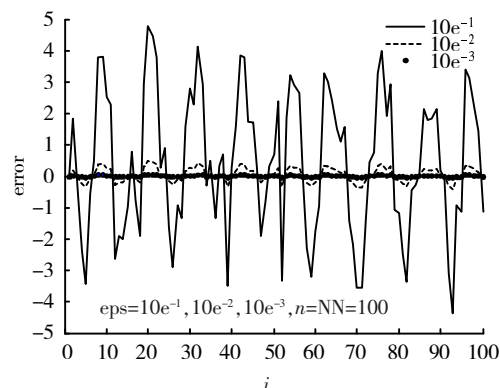
图1  $\hat{u}_0(x)$ 与 $u_0(x)$ Fig.1  $\hat{u}_0(x)$  and  $u_0(x)$ 

图2 初值的误差

Fig.2 Initial value error

## [参考文献]

- [1] Gazenave T, Weissler F B. The Cauchy problem for critical nonlinear Schrödinger equation in  $H^s$  [J]. Nonlinear Analysis, TMA, 1990, 14: 807-836.
- [2] Wang Baoxiang. On the initial-boundary value problems for nonlinear Schrödinger equations [J]. Advances in Mathematics, 2000, 29(5): 421-424.
- [3] Navon I M. Practical and theoretical aspects of adjoint parameter estimation and identifiability in meteorology and oceanography [J]. Dyn Atmos Oceans, 1997, 27: 55-79.
- [4] 张瑰. 一维扩散方程整体观测资料下的初值变分同化反演 [J]. 海洋预报, 2006, 23(21): 34-41.
- [5] 张瑰, 黄思训. 一类 on-off 问题的变分同化方法的误差估计 [J]. 工程数学学报, 2009, 26(1): 37-42.
- [6] Teng Jiajun, Zhang Gui. Huang Sixun. Some theoretical problems on variational data assimilation [J]. Applied Mathematics and Mechanics, 2007, 28(5): 651-663.
- [7] 方涵先, 黄思训. 二维下投式探空仪反演的理论分析与数值试验 [J]. 自然科学进展, 2004, 14(11): 1257-1264.
- [8] Zhang Gui, Li Zhenxing, Zhu Shouxian. The error estimates of predicted value of variational assimilation method for a class of Schrödinger equations [C]. Manchester: The Second International Conference on Information and Computing Science, 2009: 304-307.
- [9] Huang Sixun, Du Huadong, Han Wei. Generalized variational data assimilation method and numerical experiment for non-differential system [J]. Appl Math Mech, 2004, 25(10): 1160-1165.
- [10] 张瑰, 张梅. 人口模型变分同化方法的理论分析 [J]. 大学数学, 2004, 20(5): 30-33.

[责任编辑: 丁 蓉]

(上接第23页)

## [参考文献]

- [1] Erdős P. Some problems and results on combinatorial number theory [J]. Ann New York Acad Sci, 1989(576): 132-145.
- [2] Erdős P, Freiman G. On two additive problems [J]. J Number Theory, 1990(34): 1-12.
- [3] Nathanson M B, Sárközy A. Sumsets containing long arithmetic progressions and powers of 2 [J]. Acta Arith, 1989(54): 147-154.
- [4] Lev V F. Representing powers of 2 by a sum of four integers [J]. Combinatorica, 1996(16): 413-416.
- [5] Pan Hao. Note on integer powers in sumsets [J]. J Number Theory, 2006(117): 216-221.
- [6] Abe T. Sumsets containing powers of an integer [J]. Combinatorica, 2004(24): 1-4.
- [7] Alon N. Subset sums [J]. J Number Theory, 1987(27): 196-205.
- [8] Nathanson M B. Additive Number Theory: Inverse Problems and the Geometry of Sumsets. Volume 165 of Graduate Texts in Mathematics [M]. New York: Springer-Verlag, 1996.
- [9] Kapoor V. Sets whose sumsets avoids a thin sequence [J]. J Number Theory, 2010(130): 534-538.

[责任编辑: 丁 蓉]