

# 带有PT对称势的非线性薛定谔方程的两类反问题

张 坤

浙江理工大学理学院, 浙江 杭州

收稿日期: 2023年12月1日; 录用日期: 2023年12月30日; 发布日期: 2024年3月29日

## 摘 要

本文对带有PT对称势三阶五阶幂律非线性薛定谔方程提出了关于参数和势函数反演的两类反问题。对于参数反演问题, 我们分别采用PINNs (Physics Informed Neural Networks)和传统的结合有限差分法与优化算法求解的方法进行比较。计算结果显示, 在求解反问题时, 传统方法每步参数优化需要数值求解非线性薛定谔方程, 计算量较大。而PINNs的方法无需重复求解薛定谔方程, 计算效率更高。对于PT对称势函数反演问题, 通过在PINNs中嵌入自适应基函数, 从而反演得到PT对称势。数值实验显示PINNs在算法计算反问题效率上优于传统微分数值求解和优化相结合的方法。

## 关键词

PT对称势, 非线性薛定谔方程, PINNs, 参数优化, 反问题

# Two Types of Inverse Problems of the Nonlinear Schrödinger Equation with PT Symmetric Potentials

Kun Zhang

School of Science, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou Zhejiang

Received: Dec. 1<sup>st</sup>, 2023; accepted: Dec. 30<sup>th</sup>, 2023; published: Mar. 29<sup>th</sup>, 2024

## Abstract

This paper proposes two types of inverse problems about parameter and potential function inversion for the third-order and fifth-order power-law nonlinear Schrödinger equation with PT-symmetric

potential. For the parameter inversion problem, PINNs are used respectively, compared with the traditional method that combines the finite difference and optimization algorithms to solve the problem. The calculation results show that when solving the inverse problem, the traditional method needs to numerically solve the nonlinear Schrödinger equation for each step of parameter optimization, which requires a large amount of calculation. The PINNs method does not require repeatedly solving the Schrödinger equation, and the calculation efficiency is higher. For the inversion problem of the PT-symmetric potential function, the PT-symmetric potential is inverted by embedding adaptive basis functions in PINNs. Numerical experiments show that PINNs are superior to traditional methods that combine differential numerical solving and optimization in algorithmic calculation of inverse problems.

## Keywords

PT-Symmetric, Nonlinear Schrödinger Equation, PINNs, Parameter Inversion, Inverse Problems

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

为了解释光学系统中某些处于平衡状态的不寻常现象，例如方向依赖性、非局域非线性效应和光学相位变换点，Bender 和 Boettcher [1] 在 1998 年提出了 PT 对称势非线性薛定谔方程(Nonlinear Schrödinger Equation, NLSE)的两类反问题对称性的概念。将 PT 对称势 NLSE 的两类反问题对称势引入非线性薛定谔方程，可以描述光子在介质中传播时由于光的非线性效应而产生的光孤子的演化现象。光孤子是一种特殊的光波现象，具有保持形状和能量的稳定性，在光电信息处理、光存储、光计算等领域具有重要的应用。通过控制和操纵光孤子的产生、传播和相互作用，可以实现信息传输、信号处理和光学计算等功能，这在现代光学中具有重要意义[2] [3] [4] [5] [6]。

从 20 世纪 80 年代开始，学者们开展了非线性薛定谔方程(NLSE)的反问题研究，旨在通过已知的输入波场来推断 NLSE 中的非线性系数和势函数。这项研究为新型光学器件的设计提供了理论基础。在 NLSE 中，色散系数和非线性项系数的反演可以揭示光子的非线性传输过程，而势函数的反演可以提供量子系统实际的势阱形状信息，影响整个量子系统的性质和动力学行为。目前，对 NLSE 的反问题研究主要集中在数值理论和方程参数优化两个方面。在数值理论方面，Hogan 等[7]通过分析 NLSE 的小幅度波束解，采用变分法确定解的非线性相位，从而实现了对三次非线性项参数的反演。Murphy [8]提出了一种基于散射变分原理的方法来研究 NLSE 中衍射色散系数的反演问题，为理解 NLSE 的散射映射与未知系数之间的关系提供了新思路。在方程参数优化方面，S. A. Avdonin 等[9]通过 NLSE 的波动系数演化数据，构建了最小二乘优化问题，以恢复 NLSE 中的势函数  $V(x)$ 。Baudouin L.等[10]通过分析求解方法，推导出变分公式，并在严格的理论证明中表明其在特定条件下具有唯一的稳定解，并用于研究 NLSE 中势函数的确定问题。然而，上述关于 NLSE 反问题的研究都是从理论分析的角度展开的，并没有给出对应这一反问题的数值求解算法。因此，开发更有效的数值求解算法对于光学领域中的 NLSE 反问题至关重要。

近年来，新兴的神经网络方法为 NLSE 的正问题和反问题求解提供了新的途径[11]。例如，Raiss 等 [12]提出了基于神经网络的物理约束神经网络方法(Physics-Informed Neural Networks, PINNs)。PINNs 的

核心思想是利用神经网络来逼近 NLSE 的解，并将物理方程作为附加的约束条件，从而在单一训练过程中同时求解方程和估计参数。这种方法的优点在于避免了传统数值方法中的重复求解方程的步骤，从而提高计算效率。另外，Zhou 等[13]使用深度神经网络解决了非线性薛定谔方程及其逆问题，来确定 PT 对称调谐势下的系统参数。Song 等[14]则利用 PINNs 将 PT 势函数的先验信息引入损失函数中，以获得同时满足先验和给定数据信息的势函数。然而，如果没有势函数的先验信息，目前尚不清楚这种方法是否仍然有效，还需要进一步验证。需要指出的是，尽管已有研究对具有 PT 对称势的反问题进行了探索，但现有的数值求解方法的普适性仍然不够强，计算效率也相对较低，这两个方面仍有改进的空间。特别是对于复杂的 PT 势函数反演问题，在没有先验信息的情况下求解依然存在困难。

在具有 PT 对称势的 NLSE 方程中，涉及色散系数、衍射系数以及相应的势函数。其中，色散系数是影响光纤通信质量的一个主要因素，光纤色散会导致脉冲展宽，造成光信号畸变，影响传输距离的长短。衍射系数则是刻画非线性光学效应中介质的非线性偏振率，它决定了光波在传播时对自身产生的影响效应，使光波的包络发生聚焦或散焦。因此，研究色散系数和衍射系数平衡规律，以及具有良好性质的 PT 对称势，有助于理解光孤子非线性光学系统中的稳定性。

本文则对带有 PT 对称势的 NLSE 提出了两类反问题。其中，第一类问题是色散系数和衍射系数的反演问题：通过已知的输入数据和势函数来推断，推断 NLSE 中的色散系数和非线性系数。第二类问题则是 PT 对称势函数的反演问题：通过部分测量数据和给定色散系数和衍射系数，恢复 NLSE 中的势函数，即量子系统中的势阱形状信息。这两类反问题的研究对于我们更好地理解带有 PT 对称势的 NLSE 中的非线性现象和光传播系统的性质具有重要意义。同时，它们也为光学器件设计和量子光学领域的进展提供了理论基础。进一步，在第一种有关反射系数和衍射系数的反问题的求解中，我们应用 PINNs 深度学习方法和经典粒子群算法(PSO)结合有限差分数值求解的方法分别进行求解，以期比较这两种算法对于这类反问题求解的计算效率。而对于第二种有关势函数的反问题中，我们提出一种带有自适应基函数的 PINNs 算法，以期通过在自适应基函数中引入 sigmoid 和 tanh 函数来提高 PINNs 算法的计算精度。值得注意的是这种带有自适应基函数的 PINNs 算法不需要指定势函数的形式，也不需要提供先验信息，即可求解满足给定条件的势函数。

本文结构如下。在第 2 节中对带有 PT 对称势的三次和五次幂律 NLSE 分别提出两类反问题。第 3 节我们给出了两类反问题对应的损失函数，提出利用物理信息神经网络(PINNs)深度学习方法来求解所提出的两类反问题。第 4 节中给出数值实验。第 5 节中我们对本文的主要工作和贡献进行总结。

## 2. PT 对称势 NLSE 的两类反问题

在本章中，我们先通过具有 PT 对称势 NLSE 正问题来构建两类反问题。

### 2.1. 具有 PT 对称势的 NLSE 正问题

我们首先给出一维带有 PT 对称势的三次和五次幂律非线性薛定谔方程的正问题，即考虑如下形式的非线性薛定谔方程[15]：

$$i \frac{\partial u}{\partial z} + \beta_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \gamma_3 |u|^2 u + \gamma_5 |u|^4 u + v(x)u(x) = 0, (x, z) \in R \times (0, Z] \quad (1)$$

其中， $u := u(x, z)$  是具有缓慢变化电场包络的复值函数，代表光的传播，其中  $x$  代表横向坐标， $z$  表示无量纲纵向传播距离。 $\beta_1$  表示横向坐标的色散系数， $\gamma_3$  和  $\gamma_5$  分别代表三次和五次的非线性项，也称作衍射系数。 $v(x) = [V(x) + iW(x)]$  表示具有 PT 对称势函数。

我们将(1)的解定义在整个域  $\Omega = \{(x, z) | x \in \mathbb{R}, z > 0\}$  上, 其中  $x \rightarrow \pm\infty$ 。我们将初始域  $\Omega$  分为三个区域, 用  $\Omega_i = \{(x, z) | -L \leq x \leq L, z > 0\}$  表示需要计算近似解的内部域, 另外两个互补区域分别为:

$\Omega_l = \{(x, z) | x \leq -L, z > 0\}$  和  $\Omega_r = \{(x, z) | x \geq L, z > 0\}$ 。该 NLSE 方程(1)的初始边界条件为:

$$\begin{cases} u|_{z=0} = \phi(x), \\ u|_{\Gamma} = \Psi(-L, z) = \Psi(L, z) \end{cases} \quad (2)$$

其中,  $\phi$  和  $\psi$  是光滑函数。  $\Gamma = \{x = \pm L\}$  表示  $\Omega_i$  的边界。

根据 NLSE 方程(1)~(2), 如果我们已经确定了方程的参数  $\beta$ 、 $\gamma_3$ 、 $\gamma_5$  和具有 PT 对称性的势函数  $v(x)$ , 那么我们就可以确定光束的传播状态。在这种情况下, 我们需要思考的问题是, 如果我们观察到部分光束的状态并且已知对称势函数  $v(x)$ , 那么相应的色散系数  $\beta$  以及衍射系数  $\gamma_3$  和  $\gamma_5$  会是什么样的? 另外, 我们还需要弄清楚如何确定这些非线性系数。进一步地, 如果我们观察到部分光束的状态并且已知非线性系数  $\beta$  和  $\gamma_3$ 、 $\gamma_5$ , 那么满足 PT 对称性的势函数  $v(x)$  会有怎样的特征? 该如何找到适合这个光束状态的势函数呢? 接下来, 我们将逐步解决这些问题。

## 2.2. 关于色散系数和非线性系数的反演问题

在符合具有 PT 对称性 NLSE 方程的光束传播中, 如果色散系数远大于衍射系数, 则色散效应起主导作用。过强的色散效应将导致光波包络衰减过快, 难以长距离传播; 而如果衍射系数远大于色散系数, 则衍射效应起主导作用, 在包络方程的演化过程中, 会出现急剧的自聚焦现象, 导致波函数在短距离内崩溃。而当二者的量级接近时, 非线性色散效应将发挥作用。因此确定适当的色散和衍射系数对于保证通信质量至关重要。那么我们目前希望解决的是根据观测到的一部分光束数据, 在已知对称势函数的情况下, 确定色散系数和衍射系数, 即色散系数和衍射系数的反演问题。

为了建立色散 - 衍射反问题, 我们首先对正问题的传播进行分析。当色散系数、衍射系数以及对称势函数确定时, 根据 NLSE 方程(1)~(2)确定的光束传播状态也将确定, 并能够获得每个点处光束的确切数据。换句话说就是, 如果我们已经测量到了部分光束的数据, 那么对应的 NLSE 方程中的参数必定是预先给定的数据。然而, 如果只有势函数相同而色散系数和衍射系数发生改变, 那么产生的光束数据也会相应发生变化。因此, 在势函数相同的情况下, 我们可以根据测量到的部分光束数据来估计产生这些数据的参数, 这可以通过比较测量数据和变换参数所导致的光束计算数据之间的差异来建立一个优化问题。这个优化问题的目标是将这两者的差异最小化, 从而找到能够在 NLSE 方程中产生测量到的光束数据的相关参数。

假设  $\{x^i, z^i\}, i=1, \dots, N$ , 其中表示  $N$  个测量点,  $u^i$  表示在这些测量点上得到的测量数据, 而  $u(x^i, z^i)$  则是在 NLSE 方程(1)~(2)的不同参数  $\beta, \gamma_3, \gamma_5$  计算得到的数据。我们的目标是在  $L_2$  范数的意义下最小化这两者之间的差异。

可以将优化问题表述如下:

$$\min_{\beta, \gamma_3, \gamma_5} \sum_{i=1}^N [u(x^i, z^i) - u^i]^2 \quad (3)$$

其中,  $|u(x^i, z^i) - u^i|^2$  表示计算数据和测量数据在点  $\{x^i, z^i\}$  处差异。通过对所有测量点处二者差异的和进行优化, 我们希望找到一组最优的参数  $\beta, \gamma_3, \gamma_5$ , 使得计算数据  $u(x^i, z^i)$  和测量数据  $u^i$  的差异最小化。

### 2.3. 关于势函数反演问题

带有 PT 对称势的 NLSE 方程中的对称势函数在研究和应用上具有多重重要作用。首先, 对称势函数确保系统解的实数性, 保证波函数和能量等物理量是实数, 从而维持系统的稳定性和可行性。其次, 对称势函数对系统的对称性起着关键作用, 通过保持或调整系统在 PT 反演下的对称性, 影响波函数、自旋翻转等量子行为, 并决定系统的响应和性质。通过研究和理解对称势函数的特性, 可以揭示它在系统行为中的影响, 探索基于 PT 对称势的非线性薛定谔方程中的新的物理现象, 例如新的能级结构、非线性激发和相互作用机制等, 这对于发现和理解量子系统的新特性具有重要意义。此外, 对称势函数的研究还有助于在材料设计和工程领域中找到具有特定 PT 对称性的势函数。这些设计可以用于调控光、声、电场和自旋等在材料中的传播和操控行为, 为开发新型器件和应用提供理论基础。总之, 理解和研究带有 PT 对称势的非线性薛定谔方程中的对称势函数对于深入理解系统行为、揭示潜在物理现象、指导材料设计和工程控制, 并探索新的应用领域具有重要意义。下面我们探讨如何构建这个关于势函数的反问题, 并且能够让这个势函数保持 PT 对称。

同构建关于散射 - 衍射系数反问题类似, 如果当前可测量到部分光束数据, 并且 NLSE 方程中的散射 - 非线性系数已知, 我们想寻找合适的势函数满足这个光束的传播。即假设  $N$  个测量点  $\{x^i, z^i\}, i=1, \dots, N$  处的测量数据, 以及 NLSE 方程(1)~(2)中色散系数  $\beta$ , 非线性系数  $\gamma_3, \gamma_5$  都是已经已知, 我们的目标是寻找满足 PT 对称的势函数  $v(x)$ , 使得计算得到的数据  $u(x^i, z^i)$  与已知测量数据  $u^i$  之间的差异最小。

可将优化问题表示如下:

$$\min_g \sum_{i=1}^N [u(x^i, z^i) - u^i]^2 \quad (4)$$

需要注意的是, 与求解散射 - 衍射系数反问题(3)的情况不同, 求解势函数反问题(4)时, 我们需要确保势函数满足 PT 对称性。这样的限制条件使得问题更加复杂, 需要使用合适的优化算法和策略来确保所得到的势函数具有所需的对称性。

下面我们将讨论如何对这两类反问题进行求解。

### 3. 两类反问题的求解

为了方便对散射 - 衍射系数反问题(3)和势函数反问题(4)进行求解, 我们先根据 NLSE 方程(1)来构建一个新的函数。将复波函数  $u$  分解为实部  $p$  和虚部  $q$ , 让  $u(x, z) = p(x, z) + iq(x, z)$ , 其中  $p(x, z)$  和  $q(x, z)$  都是实值函数。引入一个隐函数  $\hat{u}(x, z)$ , 定义函数  $F(x, z)$  如下:

$$F(x, z) := i \frac{\partial \hat{u}}{\partial z} + \beta_1 \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial x^2} + \gamma_3 |\hat{u}|^2 \hat{u} + \gamma_5 |\hat{u}|^4 \hat{u} + v(x) \hat{u}, \quad (5)$$

其中, 隐函数  $\hat{u}(x, z) = \hat{p}(x, z) + i\hat{q}(x, z)$  ( $\hat{p}$ ,  $\hat{q}$  分别表述实部和虚部)。又令  $F(x, z) = iF_p(x, z) - F_q(x, z)$  ( $F_p, F_q \in \mathbb{R}(x, z)$ ) 满足:

$$\begin{aligned} F_p(x, z) &:= \hat{p}_z + \beta_1 \hat{q}_{xx} + W(x) \hat{p} + V(x) \hat{q} + \gamma_3 \hat{q} \left( \hat{p} + \frac{2}{2} \hat{q} \right) + \gamma_5 \hat{q} \left( \hat{p} + \frac{2}{2} \hat{q} \right)^2, \\ F_q(x, z) &:= \hat{q}_z - \beta_1 \hat{p}_{xx} + W(x) \hat{q} + V(x) \hat{p} - \gamma_3 \hat{p} \left( \hat{p} + \frac{2}{2} \hat{q} \right) - \gamma_5 \hat{p} \left( \hat{p} + \frac{2}{2} \hat{q} \right)^2 \end{aligned}$$

针对 NLSE 的均方误差损失函数



$$(u(x^i, z^i) - u^i)^2 = \left( \left| \hat{p}(x^i, z^i) - p(x^i, z^i) \right|^2 + \left| \hat{q}(x^i, z^i) - q(x^i, z^i) \right|^2 \right)$$

由于  $u(x^i, z^i)$  满足薛定谔方程, 即  $F_p(x^i, z^i) = 0, F_q(x^i, z^i) = 0$ 。进一步考虑到部分样本点  $(x^i, z^i)$  位于边界上, 记这些点为  $(x_B^i, z_B^i)$ , 因为(1)是周期性边界条件, 则有  $\hat{\psi}(-L, z_B^i) - \hat{\psi}(L, z_B^i) = 0$ 。即构造损失函数如下:

$$TL = TL_{IR} + TL_E + TL_B \tag{6}$$

其中

$$\begin{aligned} TL_{IR} &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left( \left| \hat{p}(x^j, z^j) - p(x^j, z^j) \right|^2 + \left| \hat{q}(x^j, z^j) - q(x^j, z^j) \right|^2 \right), \\ TL_E &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left( \left| F_p(x^j, z^j) \right|^2 + \left| F_q(x^j, z^j) \right|^2 \right), \\ TL_B &= \frac{1}{N_B} \sum_{j=1}^{N_B} \left| \hat{\psi}(-L, z_B^j) - \hat{\psi}(L, z_B^j) \right|^2 \\ &= \frac{1}{N_B} \sum_{j=1}^{N_B} \left( \left| \hat{p}(-L, z_B^j) - \hat{p}(L, z_B^j) \right|^2 + \left| \hat{q}(-L, z_B^j) - \hat{q}(L, z_B^j) \right|^2 \right) \end{aligned}$$

$\{x^j, z^j, F_p(x^j, z^j), F_q(x^j, z^j)\}_{j=1}^N$  表示  $F(x, z)$  上时空区域内被采样  $N$  个点;  $\{\hat{\psi}(\pm L, z_B^j)\}_{j=1}^{N_B}$  表示采样点中  $N_B$  边界数据采样点; 内部残余项  $TL_{IR}$  计算内部点的损失,  $F(x, z)$  方程偏差项  $TL_E$  计算方程误差, 边界条件偏差项  $TL_B$  计算边界点的损失。

将原来(3)和(4)提出的反问题, 转化为求解损失函数  $TL$  的最小值。得(3)对应的反问题

$$\min_{\beta, \gamma_3, \gamma_5} \sum_{i=1}^N [u(x^i, z^i) - u^i]^2 \Leftrightarrow \min_{\beta, \gamma_3, \gamma_5} (TL_{IR} + TL_E + TL_B) \tag{7}$$

(4)对应的反问题

$$\min_{\mathcal{G}} \sum_{i=1}^N [u(x^i, z^i, \mathcal{G}) - u^i]^2 \Leftrightarrow \min_{\mathcal{G}} (TL_{IR} + TL_E + TL_B) \tag{8}$$

通过最小化损失函数(7), 求出 NLSE 方程的参数  $\theta = \{\beta_1, \gamma_3, \gamma_5\}$ ; 通过最小化损失函数(8), 求出 NLSE 方程的 PT 对称势函数  $\mathcal{G}(x) = \{V(x), W(x)\}$ 。当  $LOSS < \varepsilon$  (其中  $\varepsilon$  是误差容限)时, 输出预测值  $\theta$  或  $\mathcal{G}(x)$  (见图 1), 利用 PINNs 反演 NLSE 中 PT 对称势的参数的主要步骤如表 1 所示。

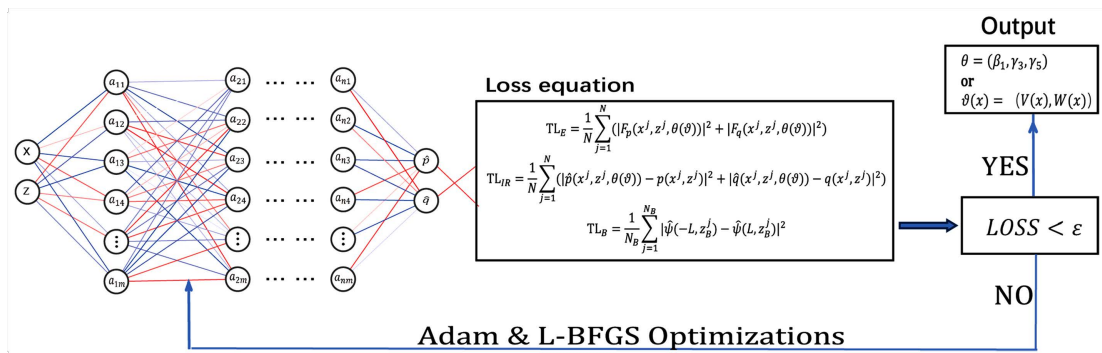


Figure 1. PINNs deep learning framework for inverse problems of PT-symmetric potentials

图 1. PINNs 深度学习框架用于 PT 对称势场的反问题

**Table 1.** Learning  $\theta$  or PT-symmetric potentials  $\mathcal{G}(x)$  in PINNs method (5)**表 1.** PINNs 方法学习(5)中的  $\theta$  或 PT 对称势  $\mathcal{G}(x)$ **步骤指导**

- 1 构建具有初始化权重  $\mathbf{w}$  和偏置  $\mathbf{b}$  的全连接神经网络  $NN(x; \mathbf{w}, \mathbf{b})$ 。
- 2 在区域  $\Omega \times [0, Z]$  内提供数据  $u(x, z)$ ，提供边界数据  $u|_{\Gamma}$ 。
- 3 构建损失函数 TL，其形式见式(6)。
- 4 使用 **Adam** 和 **L-BFGS** 最小化 TL，并更新权重  $\mathbf{w}$  和偏置  $\mathbf{b}$  以优化 TL。
- 5 返回优化后的  $NN(x; \mathbf{w}, \mathbf{b})$  以及反演系数  $\theta$  或 PT 对称势能  $\mathcal{G}(x)$ 。

**3.1. 色散系数与非线性系数反演方法**

对色散系数和非线性系数反问题使用 PINNs 求解，将  $\theta$ 、 $[F_p, F_q]$  和未知解  $[\hat{p}(x, z), \hat{q}(x, z)]$  代入损失函数(7)中，最终实现参数反演。

为比较 PINNs 方法和传统求解反问题方法的计算效率，我们下面给出了结合有限差分法求解正问题和使用粒子群算法进行优化的算法。我们在附录中提出了求解 NLSE 的有限差分法。下面介绍优化问题的 PSO 算法，即算法 1。

**算法 1 NLSE 的 PSO-FD 数值反演算法:**

具有未知常数  $\theta$  的微分方程  $u(x, \theta)$ ；

观测数据  $y$ ；

有限差分步长  $h, \tau$

粒子数量  $M$ ；

迭代次数  $K$ 。

求解最优常数  $\theta$  步骤:

1 使用有限差分法离散化  $u(x, \theta)$ ，得到方程组  $U(x, \theta)$  (根据附录中给定差分格式(19))。

2 初始化粒子群  $z[M]$ ，每个粒子的维度由反演参数  $\theta$  的数量决定；。

3 为每个粒子初始化位置和速度。

4  $k = 0, k < K$

For  $i = 1:M$

计算  $z_i$  的适应度:

$$fitness(z_i) = \sum \left( |u(x, z_i) - y| \right)^2 + Results$$

endfor

确定个体最优  $p_{id}$  和全局最优  $p_{gd}$

For  $i = 1:M$

$$\text{更新速度: } v_{id}^{k+1} = \omega v_{id}^k + c_1 r_1 (p_{id}^k - z_{id}^k) + c_2 r_2 (p_{gd}^k - z_{id}^k)$$

$$\text{更新位置: } z_{id}^{k+1} = z_{id}^k + v_{id}^{k+1}$$

endfor

$k = k + 1$

endwhile

返回对应于  $p_{gd}$  的常数  $\theta$ 。

PSO 方法是由 Marini F [16]提出的，其主要思路如下：

假设目标搜索空间为  $D$  维，群体规模为  $M$ ；第  $i$  个粒子的  $D$  维位置矢量为  $\vec{z}_i = (z_{i1}, z_{i2}, \dots, z_{ip})$ ，根据

事先给定的适应值函数计算  $\bar{z}_i$  当前的适应值；粒子  $i$  的飞行速度为  $\bar{v}_i = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{iD})$ ；粒子  $i$  迄今为止搜索到的最优位置为  $\bar{p}_i = (p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{iD})$ ；设  $\bar{p}_g = (p_{g1}, p_{g2}, \dots, p_{gD})$  为整个粒子群迄今为止搜索到的最优位置。在每次迭代中，粒子根据以下式更新速度和位置：

$$\begin{aligned} v_{id}^{k+1} &= \omega v_{id}^k + c_1 r_1 (p_{id} - z_{id}^k) + c_2 r_2 (p_{gd} - z_{id}^k), \\ z_{id}^{k+1} &= z_{id}^k + v_{id}^{k+1} \end{aligned}$$

式中： $i=1,2,\dots,M$ ； $d=1,2,\dots,D$ ； $k$  为迭代次数； $\omega$  为惯性因子； $r_1$  和  $r_2$  为  $[0, 1]$  之间的随机数； $c_1$  和  $c_2$  为学习因子。

在 PSO 结合有限差分算法中，只需将目标参数  $\theta = \{\beta_1, \gamma_3, \gamma_5\}$  作为优化参数即可。其中，*Results* 可选择  $|u(x, \theta) - y|$  最大  $L_2$  范数误差。

### 3.2. PT 对称势函数反演方法

对 PT 对称势函数反问题，由于势函数与波函数  $u$  及其导数之间存在的高度非线性关系，使得直接反演势函数有一定困难。为了解决这个问题，我们提出了自适应基函数的 PINNs 算法。这个算法的核心是选择适当的基函数，使得神经网络模型能够更好地逼近复杂的解空间，提高对梯度信息的敏感度。

在 PINNs 中，基函数的选择需要根据对问题的理解和神经网络特性进行。对于 PT 对称势函数，考虑到其本身对称性要求，我们选择实部采用偶函数，虚部采用奇函数来作为基函数。这样既能有效覆盖解空间，又符合物理约束，有助于更好地捕捉势函数的特性。于是，令目标函数  $g(x) = \{V(x), W(x)\}$ ，势函数  $V(x), W(x)$  的基函数选取如下：

$$\begin{aligned} V(x) &: \text{sigmod}(x), 1, \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos x, \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos 2x, \dots, \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos nx, \\ W(x) &: \tanh(x), x, \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin x, \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin 2x, \dots, \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin nx \end{aligned}$$

其中  $n$  的个数根据精度要求，采用自适应的原则选取。如果使用三角基函数无法达到理想的误差，我们可以在实部和虚部基函数中，分别引进两个激活函数，即 sigmod 函数  $1/(1+e^{-4x^2})$  和双曲正切函数  $\tanh(x)$ 。激活函数作为自适应函数能够通过引入非线性特性增强神经网络的表达能力，解决梯度消失问题，提高网络的稳定性和泛化能力，从而提高反演 PT 势函数的精确度。

## 4. 数值例子

假设(1)的参数  $\beta=1$ ， $\gamma_3=1$  和  $\gamma_5=-1$ ，以及 PT 对称势选择

$$V(x) = 0.7 * \text{sech}^2(x) + 1.7161 * \text{sech}^4(x), W(x) = 0.3 * \text{sech}(x) \tanh(x)$$

则式(1)的精确解为：

$$u(x, z) = \sqrt{\frac{2 - 0.7 + 0.3^2/9}{\gamma_3}} \text{sech}(x) \exp \left\{ i \left( z + \frac{0.3}{3} \arctan(\sinh x) \right) \right\}$$

根据精确解，我们在区域  $x \in [-2, 2]$ ， $z \in [0, 2]$  内选取测量数据。将解的实部和虚部分别表示为  $u(x, z) = p(x, z) + iq(x, z)$ ，其中  $p(x, z)$  和  $q(x, z)$  由两个大小为  $256 \times 201$  矩阵表示。这些采样点的数据存储在 NLSE.mat 文件中，以便导入到 PINNs 模型中。我们使用拉丁超立方体(LHS)采样策略生成模型训练所需的采样点数据，接下来以此为例子验证提出的两种反问题的求解方法。



#### 4.1. 色散系数与非线性系数反演

首先考虑用 PINNs 和 PSO 结合附录中提出的有限差分法两种方法反演两个参数的情形。

在 PINNs 模型中, 我们选取  $N$  个内部训练点,  $N_B$  个边界训练点, 网络是 5 个隐藏的层, 每层有 100 个节点, 如表 2; 粒子群算法的参数选取为  $\omega=1.2$ ,  $c_1=1.5$ ,  $c_2=1.5$ 。表 3 比较了 PINNs ( $N=81$ ,  $N_B=5$ ) 和 PSO ( $k=50$ ) 两种方法反演非线性参数  $\gamma_3$  和  $\gamma_5$  通过运行时间和预测误差比较, 我们可以得出 PINNs 物理信息神经网络快速寻找目标参数。

**Table 2.** Under different values of  $N$  and  $N_B$ , the prediction errors of  $\gamma_3$  and  $\gamma_5$ , as well as the training errors of  $p$  and  $q$ , loss function, and runtime

**表 2.** 在不同的  $N$  和  $N_B$  下  $\gamma_3$ ,  $\gamma_5$  预测误差, 以及  $p$ ,  $q$  训练误差, 损失函数和运行时间

$N$	$N_B$	$Error_{\gamma_3}$	$Error_{\gamma_5}$	$Error_p$	$Error_q$	$LOSS$	$Time$
20	2	2.070%	1.184%	1.233e-03	1.677e-03	5.824e-06	34
40	4	0.357%	0.533%	5.142e-03	4.627e-03	4.373e-06	49s
81	5	0.208%	0.229%	3.421e-03	3.151e-03	3.231e-05	47s
162	10	0.480%	0.611%	2.213e-03	1.970e-03	3.794e-05	49s
243	15	0.111%	0.109%	4.429e-03	2.649e-03	5.769e-05	76s
324	20	0.186%	0.255%	4.958e-03	2.274e-03	7.726e-05	92s
405	25	0.087%	0.061%	3.165e-03	2.372e-03	9.001e-05	96s
810	40	0.045%	0.058%	4.980e-03	1.506e-03	3.013e-05	226s

**Table 3.** Comparison between PINNs and PSO algorithm simultaneous inversion of two parameters, where  $N=81$  and  $N_B=5$

**表 3.** PINNs 与 PSO 算法比较: 同时反演两个参数, 其中  $N=81$ ,  $N_B=5$

	PINNs			PSO		
	计算值	误差	运行时间	计算值	误差	运行时间
$\gamma_3 = 1$	1.00208	0.20802%	41.308s	1.00487	0.48729%	1778.29s
$\gamma_5 = -1$	-1.00229	0.22880%		-1.00486	0.48616%	
	$Loss = 3.231e-05$			$Results = 2.141e-04$		

接下来用两种方法分别反演三个参数的情形。在 PINNs 模型中, 我们选取  $N$  个内部训练点,  $N_B$  个边界训练点, 如表 4。表 5 展示了我们利用 PINNs ( $N=162$ ,  $N_B=10$ ) 同时进行反演色散系数  $\beta$  和非线性参数  $\gamma_3$  和  $\gamma_5$ , 预测误差仍能控制在  $10^{-3}$  之内。但使用 PSO ( $k=100$ ) 粒子群算法同时反演三个目标参数会导致陷入局部最优, 无法寻找准确的目标参数。

在 PINNs 和传统方法解决 NLSE 反问题时, 传统方法基于数学模型和物理定律, 具有精确性和数学理论基础, 但局限于简单两个以内参数反演问题和高计算复杂度, 求解参数反问题时容易陷入局部最优问题; 而 PINNs 不依赖特定数学模型, 适用性广, 计算效率高, 虽然需要数据来训练模型, 但灵活性和适应性更强, 不易陷入局部最优。因此选择 PINNs 能更好地解决复杂非线性问题。

**Table 4.** Under different values of  $N$  and  $N_B$ , the prediction errors of  $\beta$ ,  $\gamma_3$  and  $\gamma_5$ , as well as the training errors of  $p$  and  $q$ , loss function, and runtime

**表 4.** 在不同的  $N$  和  $N_B$  下  $\beta$ ,  $\gamma_3$ ,  $\gamma_5$  预测误差, 以及  $p$ ,  $q$  训练误差, 损失函数和运行时间

$N$	$N_B$	$Error_\beta$	$Error_{\gamma_3}$	$Error_{\gamma_5}$	$Error_p$	$Error_q$	LOSS	Time
20	2	2.655%	16.809%	21.061%	1.753e-02	2.677e-02	3.264e-05	46s
40	4	0.139%	0.871%	1.187%	3.412e-03	1.627e-03	4.373e-06	55s
81	5	0.318%	0.464%	0.148%	2.845e-03	2.749e-03	1.292e-05	52s
162	10	0.109%	0.095%	0.078%	1.415e-03	1.776e-03	2.601e-05	68s
243	15	0.274%	0.345%	0.026%	2.402e-03	8.205e-04	3.416e-05	75s
324	20	0.106%	0.524%	0.640%	2.318e-03	1.856e-03	2.687e-05	131s
405	25	0.186%	0.834%	1.006%	2.050e-03	1.635e-03	2.911e-05	147s
810	40	0.022%	0.199%	0.238%	8.116e-04	1.193e-03	3.645e-05	270s

**Table 5.** Comparison between PINNs and PSO algorithm simultaneous inversion of three parameters, where  $N = 162$  and  $N_B = 10$

**表 5.** PINNs 与 PSO 算法比较: 同时反演三个参数, 其中  $N = 162$ ,  $N_B = 10$

	PINNs			PSO		
	计算值	误差	运行时间	计算值	误差	运行时间
$\beta = 1$	1.00109	0.10878%		1.12120	12.12084%	
$\gamma_3 = 1$	1.00095	0.09507%	68.381s	1.33809	33.89937%	8836.776s
$\gamma_5 = -1$	-1.00078	0.07812%		-0.53508	46.39131%	
$Loss = 2.601e-05$			$Results = 0.31489$			

## 4.2. PT 对称势函数反演

根据章节 3.2 中提出的方法, 构造 PT 对称势函数, (8)中  $\mathcal{G} = (V_1(x), W_1(x))$

$$\begin{aligned}
 V_1(x) + iW_1(x) = & \left[ l_1 * 1 + l_2 \frac{\cos x}{\sqrt{\pi}} + l_3 * \frac{\cos 2x}{\sqrt{\pi}} + \dots + l_n * \frac{\cos(n-1)x}{\sqrt{\pi}} \right] \\
 & + i * \left[ l_{n+1} * \frac{x}{\sqrt{\pi}} + l_{n+2} * \frac{\sin x}{\sqrt{\pi}} + l_{n+3} * \frac{\sin 2x}{\sqrt{\pi}} + \dots + l_{2n} * \frac{\sin(n-1)x}{\sqrt{\pi}} \right]
 \end{aligned} \quad (9)$$

在不添加激活函数的情况下, 我们采用自适应基函数选择方法。根据精度要求, 基函数中的  $n = 7$ , 得到的计算结果在不同的  $N$ 、 $N_B$  情况下, 6 层网络, 每层 100 个节点, 如表 6, 其中  $Error_v$  和  $Error_w$  分别为 PT 对称势实部与虚部的最大误差。表 7 即为 PT 对称势最优情况下, 自适应基函数系数。

图 2 为反演 PT 对称势函数的结果, 其中图 2(a)为实部和虚部绝对误差, 误差分别达到  $10^{-2}$  和  $10^{-3}$ ; 图 2(b) (左)为实部虚部预测值和真实值, 图 2(b) (右)为  $u = \sqrt{\hat{p}(x)^2 + \hat{q}(x)^2}$  绝对误差。可以看出反演的 PT 对称势最大误差 0.011671, 精度仅为  $10^{-2}$  量级。这说明在自适应基函数选择方法中, 仅使用三角函数作为基函数无法对 PT 势函数进行高精度反演, 这与我们理想目标还存在一定差距。

**Table 6.** Under different values of  $N$  and  $N_B$ , the prediction errors of  $V_1(x)$  and  $W_1(x)$ , as well as the training errors of  $p$  and  $q$ , loss function, and runtime

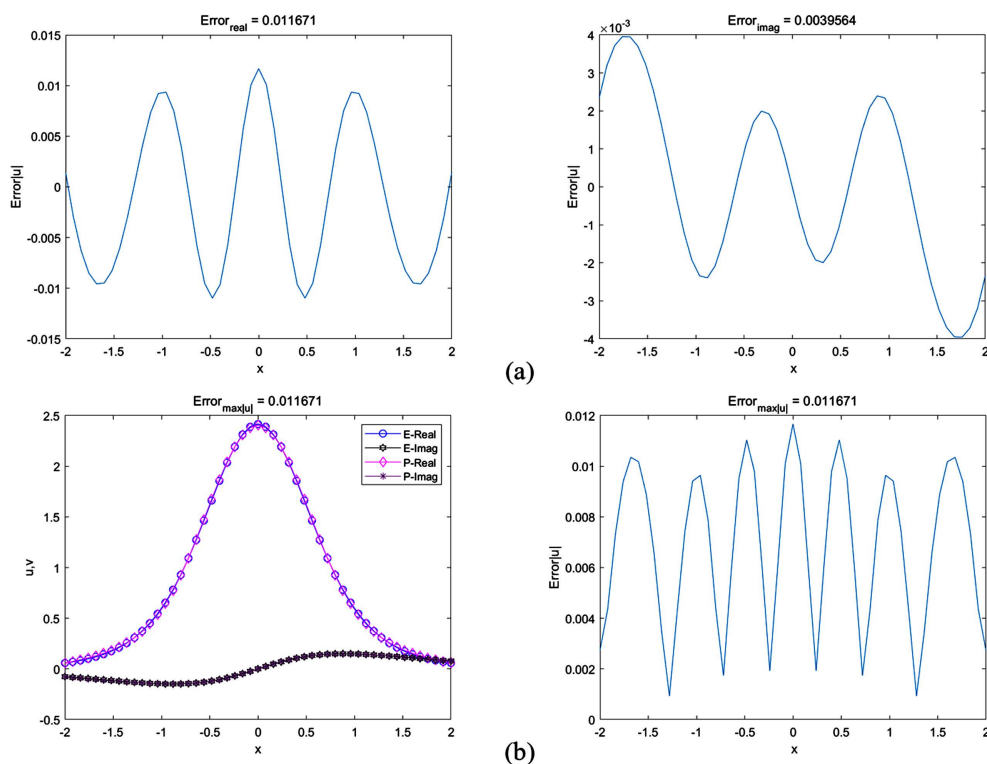
**表 6.** 在不同的  $N$  和  $N_B$  下  $V_1(x)$  和  $W_1(x)$  预测误差, 以及  $p, q$  训练误差, 损失函数和运行时间

$N$	$N_B$	$Error_p$	$Error_q$	$Error_v$	$Error_w$	$LOSS$	$Time$
20	2	1.024e-01	1.151e-02	0.4477	0.1003	7.346e-06	84 s
81	5	2.785e-03	2.935e-03	0.2295	0.2002	2.724e-05	113 s
162	10	5.740e-03	7.081e-03	0.4088	0.2472	7.324e-05	140 s
243	15	5.801e-03	5.669e-03	0.3171	0.0201	9.151e-05	197 s
405	25	4.319e-03	5.546e-03	0.0669	0.258	1.115e-05	177 s
810	50	2.894e-03	6.355e-03	0.0117	0.0040	1.596e-04	288 s
1620	100	1.207e-02	1.410e-02	0.0368	0.1282	2.364e-04	396 s
3240	100	1.385e-02	1.311e-02	0.6875	0.0519	5.736e-04	611 s

**Table 7.** PINNs operation (9) results of adaptive basis function coefficients,  $N = 810$  and  $N_B = 50$

**表 7.** PINNs 运行(9)自适应基函数系数结果,  $N = 810$ ,  $N_B = 50$

$V_1(x)$	$l_1$	$l_2$	$l_3$	$l_4$	$l_5$	$l_6$	$l_7$
	0.58494	1.64574	0.91757	0.41337	0.18816	0.04280	0.01732
$W_1(x)$	$l_8$	$l_9$	$l_{10}$	$l_{11}$	$l_{12}$	$l_{13}$	$l_{14}$
	-0.00718	0.23614	0.08342	0.02636	0.01301	0.00216	0.00214



**Figure 2.** (a) Left: Real part prediction error; (a) Right: Imaginary part prediction error; (b) Left: Comparison between true and predicted values; (b) Right: Absolute error between true and predicted values

**图 2.** (a)左为实部预测误差(a)右为虚部预测误差, (b)左为真实值和预测值比较(b)右为真实值与预测值的绝对误差

为进一步降低结果误差，使其绝对误差可以达到更小。接下来考虑加上激活函数，即(8)中  $g(x) = (V_2(x), W_2(x))$  为

$$V_2(x) + iW_2(x) = \left[ l_1 * 1 + l_2 \frac{\cos x}{\sqrt{\pi}} + \dots + l_{n-1} * \frac{\cos(n-2)x}{\sqrt{\pi}} + l_n * \frac{1}{1 + e^{-4x^2}} \right] + i * \left[ l_{n+1} * \frac{x}{\sqrt{\pi}} + l_{n+2} * \frac{\sin x}{\sqrt{\pi}} + \dots + l_{2n-1} * \frac{\sin(2n-1)x}{\sqrt{\pi}} + l_{2n} * \tanh(x) \right] \tag{10}$$

在添加激活函数的情况下，根据精度要求，选择基函数中的  $n = 8$ ，得到的计算结果在不同的  $N$ 、 $N_B$  情况下如表 8。表 9 即为 PT 对称势最优情况下，自适应基函数系数。

**Table 8.** Under different values of  $N$  and  $N_B$ , the prediction errors of  $V_2(x)$  and  $W_2(x)$ , as well as the training errors of  $p$  and  $q$ , loss function, and runtime

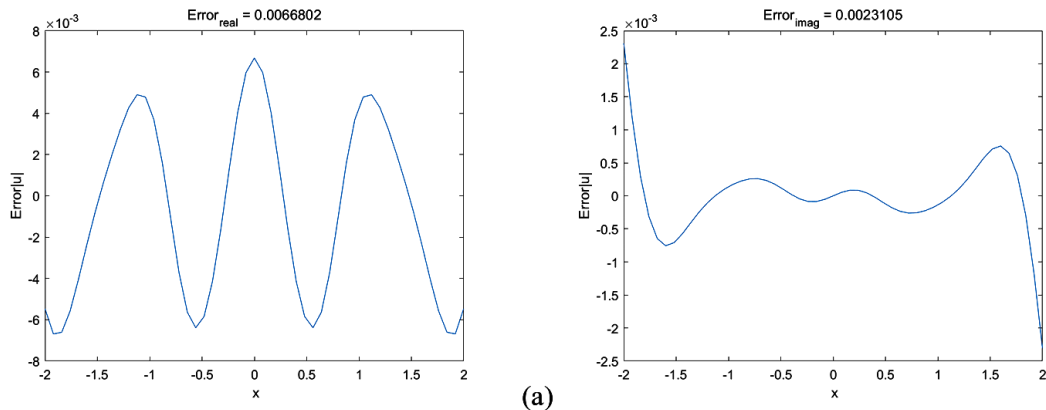
**表 8.** 在不同的  $N$  和  $N_B$  下  $V_2(x)$  和  $W_2(x)$  预测误差，以及  $p$ ， $q$  训练误差，损失函数和运行时间

$N$	$N_B$	$Error_p$	$Error_q$	$Error_V$	$Error_W$	$LOSS$	$Time$
20	2	5.970e-02	2.379e-02	0.9660	0.7740	1.455e-05	87s
81	5	3.165e-03	1.521e-03	0.8642	0.1970	6.936e-05	118s
162	10	6.309e-03	6.939e-03	0.9047	0.1891	9.544e-05	156s
243	15	3.681e-03	4.329e-03	0.9266	0.2311	5.736e-05	197s
405	25	3.791e-03	4.553e-03	0.0511	0.1316	7.536e-05	215s
810	50	1.161e-03	1.832e-03	0.0067	0.0023	1.530e-04	308s
1620	100	1.852e-02	1.895e-02	0.6633	0.2296	2.272e-04	476s
3240	100	3.681e-02	4.329e-02	0.9778	0.5770	5.736e-04	735s

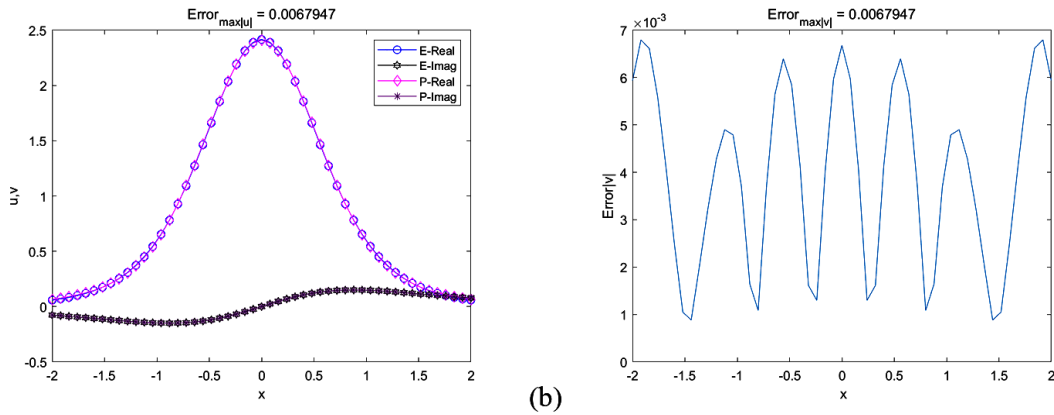
**Table 9.** PINNs operation (10) results of adaptive basis function coefficients,  $N = 810$  and  $N_B = 50$

**表 9.** PINNs 运行(10)自适应基函数系数结果， $N = 810$ ， $N_B = 50$

$V_1(x)$	$l_1$	$l_2$	$l_3$	$l_4$	$l_5$	$l_6$	$l_7$	$l_8$
	0.31992	1.70996	0.99577	0.45058	0.20802	0.04988	0.02700	0.29601
$W_1(x)$	$l_9$	$l_{10}$	$l_{11}$	$l_{12}$	$l_{13}$	$l_{14}$	$l_{15}$	$l_{16}$
	-0.11932	0.21541	0.02221	0.05082	-0.00453	0.00520	-0.00001	0.12959



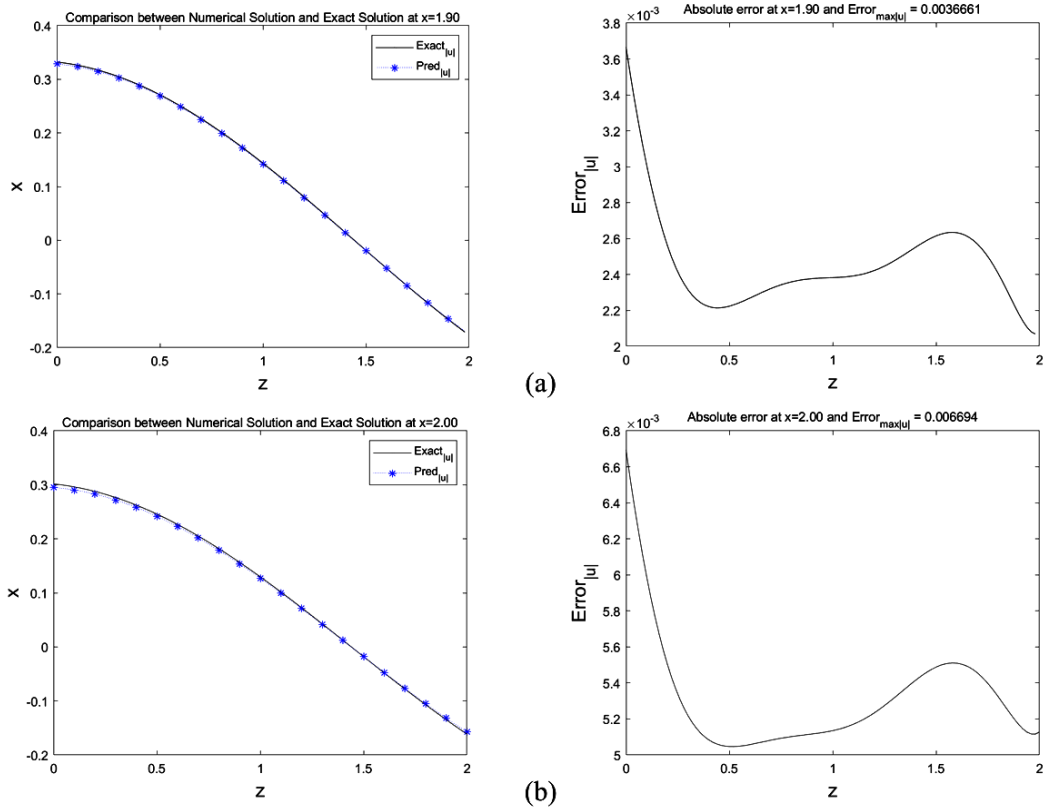
(a)



**Figure 3.** (a) Left: Real part prediction error; (a) Right: Imaginary part prediction error; (b) Left: Comparison between true and predicted values; (b) Right: Absolute error between true and predicted values

**图 3.** (a)左为实部预测误差(a)右为虚部预测误差, (b)左为真实值和预测值比较(b)右为真实值与预测值的绝对误差

图 3 为反演 PT 对称势函数的结果。其中图 3(a)为实部和虚部绝对误差, 其误差都达到  $10^{-3}$ 。图 3(b)为实部虚部预测值和真实值, 以 b(右)为  $u = \sqrt{\hat{p}(x)^2 + \hat{q}(x)^2}$  绝对误差。可以看出反演的 PT 对称势最大误差达到 0.0066802, 精度为  $10^{-3}$  量级。这说明在自适应基函数选择方法中, 使用三角函数和激活函数作为基函数对 PT 势函数可进行高精度反演, 这与我们理想目标一致。



**Figure 4.** Absolute error between PINNs learned solution and exact solution of  $x = 1.90$  and  $2.00$  for PT-symmetric potential from Table 9

**图 4.** PINN 学习解与表 9 中  $x = 1.90$  和  $2.00$  处 PT-对称势能的精确解之间的绝对误差



图 4 是在反演 PT 对称势(10)的情况, 使用数据训练得到的 PINNs 学习解, 可以看出, 在我们所反演的 PT 对称势函数时, PINNs 的学习解和数值解的绝对误差达到  $10^{-3}$ 。在未添加激活函数情况下(9)和在添加激活函数情况下(10)在 PINNs 运行程序结果数据选取和结果见表 10 所示。

**Table 10.** PINNs solution results for (1):  $N$ ,  $N_B$ , network layers, and runtime results

**表 10.** PINNs 求解(1)的  $N$ ,  $N_B$ , 网络层数和运行结果

	$N$	$N_B$	网络层数	$Error_p$	$Error_q$	$Error_{ v+iw }$	Time
表 7	810	50	2 + 100*6 + 2	1.596e-04	2.894e-03	1.167e-02	288.58
表 8	810	50	2 + 100*6 + 2	1.530e-04	1.613e-03	6.795e-03	307.97

对于未添加激活函数的情况(表格中的表 7), 使用了 810 个数据点和 100 个边界点。神经网络的层数为  $2+100*6+2$ , 这表示神经网络输入层和输出层各有 2 个节点、隐藏层一共有 6 层, 每层含有 100 个节点。损失函数的数值为  $1.596e-04$ , 表示模型在训练过程中能够较好地拟合目标函数。学习解与数值解在方程  $p$  和  $q$  上的绝对误差分别为  $2.894e-03$  和  $6.355e-03$ , 这表示学习解与数值解在相应方程上的差异较小。方程势函数  $V_{PT}$  的平方和误差为  $1.167e-02$ , 这也说明学习解与数值解在整个方程系统上的拟合程度较好。运行时间为 288.58s, 表示训练模型所需的时间较短。

对于添加激活函数的情况(表 9), 使用了相同数量的数据点和边界点(810 个数据点和 100 个边界点)。神经网络的层数仍为  $2+100*6+2$ , 与未添加激活函数的情况相同。损失函数的数值略低, 为  $1.530e-04$ , 表明模型的拟合效果略好于未添加激活函数的情况。学习解与数值解在方程  $p$  和  $q$  上的绝对误差分别为  $1.613e-03$  和  $1.832e-03$ , 说明学习解与数值解的差异较小。方程势函数  $V_{PT}$  的平方和误差为  $6.795e-03$ , 表明整体的拟合效果仍然较好。运行时间为 307.97 s, 与未添加激活函数的情况相比稍长一些。

综合上述分析, 我们可以看出:

- 添加激活函数可以在一定程度上提高模型的拟合效果, 减小损失函数的数值和方程误差;
- 不同的实验设置可能会对结果产生影响, 比如数据点和边界点的数量、网络结构等;
- 在给定的实验条件下, 使用的数据点和边界点数量相对较多, 导致模型能够较好地拟合目标函数, 但相应地运行时间也稍长。

需要注意的是, 以上结论是基于给定表格中的数据进行分析的, 具体结果可能因实验设置和数据集的不同而有所变化。因此, 这些分析仅供参考, 并需要进一步实验和验证。

## 5. 总结

在本文中, 我们提出了带有 PT 对称势的 NLSE 的参数反演和势函数反演两类反问题, 并采用 PINNs 方法求解。计算结果显示, PINNs 具有较强的泛化能力, 可以实现两类反问题的反演。

在对 NLSE 方程系数进行反演时, 我们将 PINNs 方法和粒子群算法进行了比较。传统的 PSO 算法在每次更新参数时, 都需要利用有限差分法重新求解一次 NLSE 方程, 因此效率较低, 计算速度慢。当需要反演的系数过多时, 容易陷入局部最优解。而 PINNs 方法在求解反问题时比传统方法要快, 因为它不需要反复计算 NLSE 方程的数值解, 所需计算时间更短。PINNs 还可以用于识别物理方程中的隐藏参数, 以及分析不同参数之间的非线性依赖关系。

在反演具有 PT 对称性的势函数时, 我们构造了带有自适应基函数的 PINNs, 该方法无需指定势函数的具体形式, 也不依赖于任何先验模型。自适应基函数的选取使得 PINNs 能够在训练过程中自动调整基函数的形式, 提高了反演 PT 势函数的精度和准确性, 为光学领域中 NLSE 反问题研究提高了新的思路和

方法。未来，我们还可以对 PINNs 算法进行存在性、唯一性、收敛性和稳定性分析，并利用 PINNs 算法求解更高维或更高阶的 NLSE 反问题。

## 参考文献

- [1] Bender, C.M. and Boettcher, S. (1998) Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having P T Symmetry. *Physical Review Letters*, **80**, 5243. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.5243>
- [2] Aslan, E.C., Tchier, F. and Inc, M. (2017) On Optical Solitons of the Schrödinger-Hirota Equation with Power Law Nonlinearity in Optical Fibers. *Superlattices and Microstructures*, **105**, 48-55. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2017.03.014>
- [3] Ma, Y.L. (2020) Abundant Excited Optical Breathers for a Nonlinear Schrödinger Equation with Variable Dispersion and Nonlinearity Terms in Inhomogenous Fiber Optics. *Optik*, **201**, Article 162821. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2019.05.027>
- [4] Abdelwahed, H.G., El-Shewy, E.K., Abdelrahman, M.A.E., et al. (2021) On the Physical Nonlinear (N + 1)-Dimensional Schrödinger Equation Applications. *Results in Physics*, **21**, Article 103798. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2020.103798>
- [5] Wazwaz, A.M. and Kaur, L. (2019) Optical Solitons for Nonlinear Schrödinger (NLS) Equation in Normal Dispersive Regimes. *Optik*, **184**, 428-435. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2019.04.118>
- [6] Özdemir, Ş.K., Rotter, S., Nori, F., et al. (2019) Parity-Time Symmetry and Exceptional Points in Photonics. *Nature Materials*, **18**, 783-798. <https://doi.org/10.1038/s41563-019-0304-9>
- [7] Hogan, C.C., Murphy, J. and Grow, D. (2023) Recovery of a Cubic Nonlinearity for the Nonlinear Schrödinger Equation. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 127016. <https://doi.org/10.1016/j.jmaa.2023.127016>
- [8] Murphy, J. (2022) Recovery of a Spatially-Dependent Coefficient from the NLS Scattering Map. ArXiv Preprint ArXiv:2209.07680.
- [9] Avdonin, S.A., Mikhaylov, A.S., Mikhaylov, V.S., et al. (2021) Inverse Problem for the Schrödinger Equation with Non-Self-Adjoint Matrix Potential. *Inverse Problems*, **37**, 035002. <https://doi.org/10.1088/1361-6420/abd7cb>
- [10] Baudouin, L. and Puel, J.P. (2002) Uniqueness and Stability in an Inverse Problem for the Schrödinger Equation. *Inverse Problems*, **18**, 1537. <https://doi.org/10.1088/0266-5611/18/6/307>
- [11] Hermann, J., Schätzle, Z. and Noé, F. (2020) Deep-Neural-Network Solution of the Electronic Schrödinger Equation. *Nature Chemistry*, **12**, 891-897. <https://doi.org/10.1038/s41557-020-0544-y>
- [12] Raissi, M., Perdikaris, P. and Karniadakis, G.E. (2019) Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations. *Journal of Computational Physics*, **378**, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- [13] Zhou, Z. and Yan, Z. (2021) Solving forward and Inverse Problems of the Logarithmic Nonlinear Schrödinger Equation with PT-Symmetric Harmonic Potential via Deep Learning. *Physics Letters A*, **387**, Article 127010. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2020.127010>
- [14] Song, J. and Yan, Z. (2023) Deep Learning Soliton Dynamics and Complex Potentials Recognition for 1D and 2D PT-Symmetric Saturable Nonlinear Schrödinger Equations. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, **448**, Article 133729. <https://doi.org/10.1016/j.physd.2023.133729>
- [15] Göksel, İ., Antar, N. and Bakırtaş, İ. (2015) Solitons of (1 + 1) D Cubic-Quintic Nonlinear Schrödinger Equation with PT-Symmetric Potentials. *Optics Communications*, **354**, 277-285. <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2015.05.051>
- [16] Marini, F. and Walczak, B. (2015) Particle Swarm Optimization (PSO). A Tutorial. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **149**, 153-165. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2015.08.020>

## 附录

下面给出带有初边值条件的 NLSE 方程(1)的有限差分格式。

为了用差分格式求解(1)~(2), 将求解区域  $[-L, L] \times [0, Z]$  作剖分, 取正整数  $M, N$ 。将  $[-L, L]$  作  $M$  等分, 将  $[0, Z]$  作  $N$  等分。  $h = 2L/M$ ,  $\tau = Z/N$ ;  $x_p = x_l + ph$ ,  $0 \leq p \leq M$ ;  $z_n = n\tau$ ,  $0 \leq n \leq N$ ;

$\Omega_h = \{x_p | 0 \leq p \leq M\}$ ,  $\Omega_\tau = \{z_j | 0 \leq j \leq N\}$ ,  $\Omega_{h\tau} = \Omega_h \times \Omega_\tau$ , 记  $x_{p+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_p + x_{p+1})$ ,  $z_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(z_j + z_{j+1})$ ,

令

$$\mathbb{I}_M = \{p | p = 0, 1, \dots, M\}, \mathbb{I}_M^0 = \{p | p = 1, \dots, M-1\},$$

$$\mathbb{T}_N = \{j | j = 0, 1, \dots, N\}, \mathbb{T}_N^0 = \{j | j = 0, 1, \dots, N-1\}$$

记

$$\mathcal{V}_h = \{v | v = (v_0, v_1, \dots, v_M) \text{ 是 } \Omega_h \text{ 上的网格函数}\}$$

设  $v \in \mathcal{V}_h$ , 引进如下记号:

$$\delta_x^2 v_p^j = \frac{1}{h_x^2} (v_{p-1}^j - 2v_p^j + v_{p+1}^j).$$

记

$$\mathcal{S}_\tau = \{\omega | \omega = (\omega_0, \omega_1, \dots, \omega_N) \text{ 是 } \Omega_\tau \text{ 上的网格函数}\}$$

设  $\omega \in \mathcal{S}_\tau$  引进如下记号:

$$\omega_p^{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\omega_p^{j+1} + \omega_p^j), \omega_p^{\bar{j}} = \frac{1}{2}(\omega_p^{j+1} + \omega_p^j),$$

$$\delta_z \omega_p^{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\tau}(\omega_p^{j+1} - \omega_p^j), \Delta_z \omega_p^j = \frac{1}{2\tau}(\omega_p^{j+1} - \omega_p^j).$$

设  $u = \{u_p^j | 0 \leq p \leq M, 0 \leq j \leq N\}$  为  $\Omega_{h\tau}$  上的网格函数, 则  $v = \{u_p^j | 0 \leq p \leq M\}$  为  $\Omega_h$  上的网格函数,  $\omega = \{u_p^j | 0 \leq j \leq N\}$  为  $\Omega_\tau$  上的网格函数。

在点  $\left(x_p, z_{\frac{1}{2}}\right)$  处考虑(1), 于是有

$$i u_z \left( x_p, z_{\frac{1}{2}} \right) + \beta_1 u_{xx} \left( x_p, z_{\frac{1}{2}} \left| u \left( x_p, z_{\frac{1}{2}} \right) \right|^2 u \left( x_p, z_{\frac{1}{2}} \right) \right) + \gamma_5 \left| u \left( x_p, z_{\frac{1}{2}} \right) \right|^4 u \left( x_p, z_{\frac{1}{2}} \right) + v_p u \left( x_p, z_{\frac{1}{2}} \right) = 0, \quad p \in \mathbb{I}_M^0 \quad (11)$$

由泰勒公式展开

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u \left( x_p, z_{j+\frac{1}{2}} \right) = \delta_x^2 U \left( x_p, z_{j+\frac{1}{2}} \right) + O(h^2), \quad p \in \mathbb{I}_M^0, j \in \mathbb{T}_N^0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u \left( x_p, z_{j+\frac{1}{2}} \right) = \delta_x^2 U \left( x_p, z_{j+\frac{1}{2}} \right) + O(h^2), \quad p \in \mathbb{I}_M^0, j \in \mathbb{T}_N^0, \quad (13)$$

由微分公式可得

$$i\delta_z U_p^{\frac{1}{2}} + \beta_1 \delta_x^2 U_p^{\frac{1}{2}} + \left( \gamma_3 |\bar{u}_p|^2 + \gamma_5 |\bar{u}_p|^4 + v_p \right) U_p^{\frac{1}{2}} = R_p^0, \quad p \in \mathbb{I}_M^0 \quad (14)$$

其中

$$\bar{u}_p = u(x_p, 0) + \frac{\tau}{2} u_z(x_p, 0), \quad p \in \mathbb{I}_M^0$$

$u_z(x_p, 0)$  可以通过方程(1)结合初值条件(2)可求得。在点  $(x_p, z_j)$  处考虑(1), 有

$$\begin{aligned} & iu_z(x_p, z_j) + \beta_1 u_{xx}(x_p, z_j) + \gamma_3 |u(x_p, z_j)|^2 u(x_p, z_j) \\ & + \gamma_5 |u(x_p, z_j)|^4 u(x_p, z_j) + v_p u\left(x_p, z_{\frac{1}{2}}\right) = 0, \quad p \in \mathbb{I}_M^0, \quad j \in \mathbb{T}_N^0 \end{aligned} \quad (15)$$

将(12)和(13)代入(15)中, 可得

$$\begin{aligned} & i\Delta_z U_p^j + \beta_1 \delta_x^2 U_p^j + \left( \gamma_3 |U_p^j|^2 + \gamma_5 |U_p^j|^4 + v_p \right) U_p^j = R_p^j, \quad p \in \mathbb{I}_M^0, \quad j \in \mathbb{T}_N^0 \\ & |\delta_z R_p^j| \leq C_2 (h^2 + \tau^2), \quad p \in \mathbb{I}_M^0, \quad 2 \leq j \leq N-2 \end{aligned} \quad (16)$$

由初边值条件(2), 并且忽略(14)和(16)小量项, 对问题(1)~(2)建立如下线性差分格式

$$\begin{aligned} & i\delta_z u_p^{\frac{1}{2}} + \beta_1 \delta_x^2 u_p^{\frac{1}{2}} + \left( \gamma_3 |\bar{u}_p|^2 + \gamma_5 |\bar{u}_p|^4 + v_p \right) u_p^{\frac{1}{2}} = 0, \quad p \in \mathbb{I}_M^0, \\ & i\Delta_z u_p^j + \beta_1 \delta_x^2 u_p^j + \left( \gamma_3 |u_p^j|^2 + \gamma_5 |u_p^j|^4 + v_p \right) u_p^j = 0, \quad p \in \mathbb{I}_M^0, \quad j \in \mathbb{T}_N^0, \\ & u_p^0 = \phi(x_p), \quad p \in \mathbb{I}_M^0, \\ & u_0^j = \psi(0, z_j), \quad u_{M_x}^j = \psi(M, z_j), \quad j \in \mathbb{T}_N \end{aligned} \quad (17)$$

首先根据初始和边界条件计算  $u^1$  的值, 记

$$u^k = (u_0^k, u_1^k, \dots, u_{M-1}^k, u_M^k)$$

由初值条件可知第 0 层上的值  $u^0$ , 根据差分格式

$$i\delta_z U_p^{\frac{1}{2}} + \beta_1 \delta_x^2 U_p^{\frac{1}{2}} + \left( \gamma_3 |\bar{u}_p|^2 + \gamma_5 |\bar{u}_p|^4 + v_p \right) U_p^{\frac{1}{2}} = 0, \quad p \in \mathbb{I}_M^0$$

则关于第 1 层值的差分格式为

$$\begin{aligned} & i \frac{u_p^1 - u_p^0}{\tau} + \frac{\beta_1}{2h^2} (u_{p+1}^1 - 2u_p^1 + u_{p-1}^1) + \frac{\beta_1}{2h^2} (u_{p+1}^0 - 2u_p^0 + u_{p-1}^0) + \frac{\gamma_3}{2} \left| \phi(x_p) + \frac{\tau}{2} u_z(x_p, 0) \right|^2 \\ & + \frac{\gamma_5}{2} \left| \phi(x_p) + \frac{\tau}{2} u_z(x_p, 0) \right|^4 + v_p \frac{(u_p^1 + u_p^0)}{2} = 0, \quad p \in \mathbb{I}_M^0, \\ & u_0^1 = \psi(0, z_1), \quad u_M^1 = \psi(M, z_1) \end{aligned} \quad (18)$$

在(18)中, 将第 1 层写在方程左边, 第 0 层写在方程右边, 令

$$\begin{aligned}
 a &= \frac{\beta_1}{2h^2}, \\
 b &= \frac{i}{\tau} - \frac{\beta_1}{h^2} + \frac{\gamma_3}{2} \left| \phi(x_p) + \frac{\tau}{2} u_z(x_p, 0) \right|^2 + \frac{\gamma_5}{2} \left| \phi(x_p) + \frac{\tau}{2} u_z(x_p, 0) \right|^4 + \frac{v_p}{2}, \\
 c &= \frac{i}{2\tau} + \frac{\beta_1}{h^2} - \frac{\gamma_3}{2} \left| \phi(x_p) + \frac{\tau}{2} u_z(x_p, 0) \right|^2 - \frac{\gamma_5}{2} \left| \phi(x_p) + \frac{\tau}{2} u_z(x_p, 0) \right|^4 - \frac{v_p}{2}
 \end{aligned}$$

可写成如下矩阵形式

$$\begin{pmatrix} b & a & & & \\ a & b & a & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a & b & a \\ & & & & a & b \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u_1^1 \\ u_2^1 \\ \vdots \\ u_{M-2}^1 \\ u_{M-1}^1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} au_0^1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ au_M^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & -a & & & \\ -a & c & -a & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -a & c & -a \\ & & & & -a & c \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u_1^0 \\ u_2^0 \\ \vdots \\ u_{M-2}^0 \\ u_{M-1}^0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -au_0^0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -au_M^0 \end{pmatrix},$$

求解以上代数系统，可以得到关于  $u$  的第 1 层数值解  $u^1$ 。其中  $u_z(x_p, 0)$  通过(1)结合初值条件可求得。

计算出  $u^1$  后，接下来我们建立  $u$  的三层格式。假设已确定出了第  $j-1, j$  层的值  $u^{j-1}, u^j$ 。根据差分格式为

$$i\Delta_x u_p^j + \beta_1 \delta_x^2 u_p^j + \gamma_3 |u_p^j|^2 u_p^j + \gamma_5 |u_p^j|^4 u_p^j + v_p u_p^j = 0, p \in \mathbb{I}_M^0, j \in \mathbb{T}_N^0,$$

则关于第  $j+1$  层值的差分格式为

$$\begin{aligned}
 & i \frac{u_p^{j+1} - u_p^{j-1}}{2\tau} + \frac{\beta_1}{2h^2} (u_{p+1}^{j+1} - 2u_p^{j+1} + u_{p-1}^{j+1}) + \frac{\beta_1}{2h^2} (u_{p+1}^{j-1} - 2u_p^{j-1} + u_{p-1}^{j-1}) \\
 & + \left[ \gamma_3 |u_p^j|^2 + \gamma_5 |u_p^j|^4 + v_p \right] \frac{u_p^{j+1} + u_p^{j-1}}{2} = 0
 \end{aligned}$$

令

$$\begin{aligned}
 f &= \frac{\beta_1}{2h^2}, \\
 e &= \frac{i}{2\tau} - \frac{\beta_1}{h^2} + \frac{\gamma_3}{2} |u_p^j|^2 + \frac{\gamma_5}{2} |u_p^j|^4 + \frac{v_p}{2}, \\
 f &= \frac{i}{2\tau} + \frac{\beta_1}{h^2} - \frac{\gamma_3}{2} |u_p^j|^2 - \frac{\gamma_5}{2} |u_p^j|^4 - \frac{v_p}{2}
 \end{aligned}$$

将第  $j+1$  层写在方程左边， $j+1$  层及  $j$  层写在方程右边，可写成如下矩阵形式

$$\begin{pmatrix} e & d & & & \\ d & e & d & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & d & e & d \\ & & & & d & e \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u_1^{j+1} \\ u_2^{j+1} \\ \vdots \\ u_{M-2}^{j+1} \\ u_{M-1}^{j+1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} du_0^{j+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ du_M^{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f & -d & & & \\ -d & f & -d & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -d & f & -d \\ & & & & -d & f \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u_1^{j-1} \\ u_2^{j-1} \\ \vdots \\ u_{M-2}^{j-1} \\ u_{M-1}^{j-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -du_0^{j-1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -du_M^{j-1} \end{pmatrix} \tag{19}$$

由此我们得到求解本文中 NLSE 方程的有限差分格式，格式中步长取值越小，数值解越精确。