FNO-RC: 基于高精度傅里叶变换的神经算子残差修正方法

摘要：[请在此处填写摘要]

3. 理论背景 (Theoretical Background)

3.1 神经算子 (Neural Operator)

与学习有限维向量映射的传统神经网络不同，神经算子旨在学习无限维函数空间之间的映射。给定两个函数空间 *A* 和 *U*，其定义在物理域 *D ⊂ ℝᵈ* 之上，神经算子的目标是学习一个算子 *G: A → U*。对于任意输入函数 *a ∈ A*，算子 *G* 能够输出对应的函数 *u = G(a) ∈ U*。

许多物理系统的解算子可以表达为积分算子的形式。因此，神经算子通过参数化一个积分核函数来构建映射，其通用形式为：

*(G(a))(x) = ∫*D *κ(x, y, a(x), a(y)) u(y) dy (1)*

傅里叶神经算子 (FNO) 对此通用框架进行了简化和高效实现。通过假定核函数 *κ* 具有平移不变性，即 *κ(x, y; a) = κ(x-y)*，上述积分运算可以简化为卷积运算。根据卷积定理，空间域的全局卷积等价于频率域中逐元素的Hadamard积：

*F((κ ∗ v))(k) = F(κ)(k) · F(v)(k) (2)*

基于此，一个 FNO 层通过结合频域的全局卷积和空间域的局部变换，对隐状态函数 *vₜ(x)* 进行迭代更新：

*vt+1(x) = σ(Wvt(x) + F−1(R · (Fvt))(x)) (3)*

其中 *F* 与 *F⁻¹* 分别表示快速傅里叶变换 (FFT) 及其逆变换，*R* 是频域中可学习的权重，*W* 是逐点的线性变换。FNO的成功源于其网格无关性（mesh-invariance）和高效的计算复杂度。然而，其核心依赖的FFT在处理具有不连续性或非周期边界的函数时，会因吉布斯现象（Gibbs phenomenon）和混叠失真（aliasing distortion）而面临精度瓶颈。

3.2 高精度不连续傅里叶变换

为克服FFT的固有局限性，我们引入了一种高精度数值方法——共形傅里叶变换（Conformal Fourier Transform, CFT），其理论基础源于 [Zhu et al., 2010]。该方法旨在精确计算定义在有界区间 [*p₀, p₁]* 上的不连续函数的傅里叶积分：

*F(u) = ∫*p₁p₀ *f(x)e*−2πiux *dx (4)*

传统方法（如FFT）的本质是基于梯形法则的数值积分，它通过对被积函数整体（包括傅里叶核 *e*−2πiux）进行离散采样来近似该积分。这要求采样率必须满足奈奎斯特定理以避免混叠失真。然而，对于空间有界的函数，其频谱是无限宽的，这使得混叠成为一个理论上无法回避的问题。

CFT的核心思想是，完全不对振荡的傅里叶核进行离散化，而是对其进行解析处理，从而将全部数值误差转移到对原函数 *f(x)* 的逼近上。该方法通过以下步骤实现：

1. 1. **分段高阶插值:** 将积分区间 [*p₀, p₁]* 分为L个子区间。在每个子区间 [*xₗ, xₗ₊₁*] 内，使用一个M阶拉格朗日（或切比雪夫）多项式 *Pₗ⁽ᴹ⁾(x)* 来高精度地逼近函数 *f(x)*。
2. 2. **解析积分求解:** 对于每个子区间上的多项式 *Pₗ⁽ᴹ⁾(x)*，其与傅里叶核的乘积的积分存在解析表达式。通过变量代换，可以将积分变换为对一系列单项式 *tᵐ* 的傅里叶积分，而后者拥有封闭解。
3. 3. **数值稳定性处理:** 在低频区（即频率 *u* 接近0时），直接计算解析解会因舍入误差而变得不稳定。CFT通过切换到对指数项的泰勒级数展开来进行计算，从而保证了在全频带内的高精度。

通过这种方式，CFT将数值近似的误差完全集中于对函数 *f(x)* 的插值上，而完全避免了对傅里叶核的采样误差。这使其能够以远低于奈奎斯特频率的采样率获得高精度的频谱，并有效抑制混叠失真。这种从信号中提取高保真度、鲁棒频谱特征的能力，为我们修正FNO的预测误差提供了坚实的理论基础。

4. 实验 (Experiments)

4.1 FNO-RC 架构

基于以上理论，我们设计了傅里叶神经算子残差修正 (FNO-RC) 模型，其架构如图1所示。核心创新在于FNO-RC层，它将标准FNO的预测能力与CFT的信号分析优势相结合。对于输入 *vₜ(x)*，该层通过两条并行路径进行处理：

*[请在此处插入 图1：FNO-RC架构图]*

* • **主预测路径:** 该路径遵循公式(3)，生成初步预测 *v'ₜ₊₁(x)*。
* • **残差修正路径:** 该路径旨在生成一个修正场 *c(x)* 以补偿主路径的预测误差。其计算过程为：

*c(x) = MLPθ(CFT(vt(x))) (5)*

其中，*MLPθ* 的最后一层被零初始化，以确保训练稳定并为模型性能提供下界。

最终，该层的输出由主预测与修正场叠加而成：

*vt+1(x) = v't+1(x) + c(x) (6)*

4.2 实验设置

我们在三个基准物理系统上对模型进行了评估：一维粘性伯格斯方程、二维含力项的纳维-斯托克斯方程以及三维纳维-斯托克斯方程。所有模型均在PyTorch中实现，并与标准的FNO基线模型进行公平对比。两个模型均采用Adam优化器和余弦退火学习率调度器进行端到端训练，以最小化相对L2范数损失为目标。详细超参数设置见表1。

表1：各实验的超参数设置

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Hyperparameter | 1D Burgers' | 2D Navier-Stokes | 3D Navier-Stokes |
| Modes | 16 | 16 | 8 |
| Width | 64 | 64 | 20 |
| Batch Size | 20 | 20 | 4 |
| Epochs | 500 | 500 | 500 |
| Learning Rate | 0.001 | 0.001 | 0.001 |
| Scheduler Step | 100 | 100 | 100 |
| Scheduler Gamma | 0.5 | 0.5 | 0.5 |

4.3 实验结果与分析

**4.3.1 定量分析**

表2汇总了所有基准测试的最终相对L2测试误差。数据显示，FNO-RC在所有维度的问题上均一致性地超越了FNO基线。尤其在二维和三维的纳维-斯托克斯方程这类长时程、混沌主导的预测任务中，FNO-RC分别实现了73.68%和43.58%的显著相对误差降低。我们认为，这一巨大优势源于CFT修正路径的有效性。在混沌系统中，长期预测的误差主要来源于低频全局模态的累积偏差。CFT路径通过其对信号的鲁棒分析能力，精确地捕捉并修正了这些累积误差，从而有效抑制了误差随时间增长的趋势，极大地提升了模型的长期保真度。在一维伯格斯方程中，由于其动力学行为相对简单，误差累积效应不显著，因此性能提升较为温和（2.98%），但依然验证了我们方法的有效性。

表2：最终测试误差与相对性能提升

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Problem | FNO Baseline (L2 Error) | FNO-RC (L2 Error) | Relative Improvement |
| 1D Burgers' | 0.2145 | 0.2081 | 2.98% |
| 2D Navier-Stokes | 0.0453 | 0.0119 | 73.68% |
| 3D Navier-Stokes | 0.1581 | 0.0892 | 43.58% |

**4.3.2 定性分析**

定性结果（见图2-4）进一步证实了我们模型的优越性。

* • **对于一维伯格斯方程，**FNO-RC能够更精确地捕捉激波的锋面和传播速度，有效缓解了标准谱方法中常见的吉布斯振荡现象，而基线模型的预测在激波附近则表现出明显的模糊和伪影。
* • **在二维纳维-斯托克斯问题中，**FNO-RC的预测结果在视觉上展现出更少的数值耗散，保留了更多真实流场中的小尺度涡结构细节。相比之下，基线模型的预测则显得过于平滑，在长时程演化后丢失了大量关键的湍流特征。
* • **对于三维湍流，**FNO-RC同样生成了与真实解在拓扑结构上更为一致的等值面，证明了其在高维复杂系统建模中抑制误差累积的强大能力。

*[请在此处插入 图2、3、4：分别为1D、2D、3D问题的定性对比图。]*