ChatGPT

混合学习‑数值方法解决二维高频 Helmholtz 方程的系统方案

引言

二维**Helmholtz**方程

$$-\Delta u(x,y) - k^2u(x,y) = q(x,y), \quad (x,y) \in \Omega := [-1,1] \times [-1,1], \qquad u|_{\partial\Omega} = 0,$$

描述电磁辐射、声波和地震波等的稳态波动问题。在给定的子任务中，**第 1 题**要求使用深度学习方法求解常波数情形（$k=4$）的解u，**第 2 题**要求在**高波数**（$k=100,500,1000$）下快速求解。高频 Helmholtz 方程具有以下数值困难：

1. **高度振荡与污染效应**：波长 $\lambda = 2\pi/k$ 很短，需要每波长 >10 个网格点，导致维度灾难；离散误差随 k 指数增长，常规有限元/差分收敛性恶化。
2. **大规模不定线性系统**：离散矩阵复杂，Krylov 方法收敛缓慢，需要特定预条件件器才能加速。
3. **边界处理复杂**：高频情况下的吸收边界条件（PML）或者无限域辐射条件难以保证精度。

为了在高频场景下兼顾精度、效率和泛化能力，本文提出一套**混合学习–数值方法**，综合了**Neumann 系列神经算子 (NSNO)**、**多尺度网络 UNO/FNO**、**傅立叶/正弦基和平面波激活**、**PDE 物理约束与 Tikhonov 正则化**、**预条件 GMRES 细化**以及**基本解特征**等技术，从而实现对一类 Helmholtz 方程的快速求解。下文详细阐述每个组成部分的原理、相互作用及实现步骤，并引用最近文献支持其有效性。

理论基础与关键技术

1. Neumann 系列神经算子 (NSNO)

传统神经算子如 **Fourier Neural Operator (FNO)** 通过在频域参数化积分核学习参数到解的映射，可在不同网格上泛化，并相较传统求解器实现数个数量级的加速 [1]。然而在高波数 Helmholtz 方程中，源项与介质系数耦合导致直接学习算子困难。

NSNO利用 Helmholtz 方程的**Neumann 系列解表示**来解耦这一耦合。具体来说，将非齐次方程写成形式 $(I-\mathcal{K})u = f$，其中 $\mathcal{K}$ 为包含介质系数的紧算子，解可以表示为 Neumann 级数：

$$u = (I + \mathcal{K} + \mathcal{K}^2 + \cdots)f.$$

NSNO 将每一项视为**在均匀介质中求解不同源项的 Helmholtz 方程** [2]。这样源项 f 与介质系数完全解耦；通过截断级数，仅需学习少数几项的算子即可逼近整体解 [2]。NSNO 使用 **UNO**（将 **Fourier Neural Operator** 与 **U-Net** 结合的多尺度网络）作为基础模块以捕捉解的多尺度特性 [3]。文献实验表明 NSNO 相比 FNO 在大波数情形的相对误差至少降低 60%，计算成本降低 50%，且所需训练数据更少 [4]。

2. 多尺度网络 UNO/FNO 与正弦/傅立叶基

FNO通过对输入函数做傅立叶变换，并在频域进行卷积来表示积分核，天然适用于周期或平滑结构 [1]。对于具有 Dirichlet 边界的正方形区域，采用**正弦基函数**$\sin(m\pi(x+1)/2)\sin(n\pi(y+1)/2)$ 可自动满足零边界条件，并方便结合傅立叶变换。

为了适应高波数振荡，还可在网络中加入**平面波激活函数**。文献指出，采用复指数 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot x}$ 激活的网络（PWNN）在 Helmholtz 方程上比使用普通激活函数或 SIREN 更精确，并能在相同采样下显著降低误差 [5]。因此本文在 UNO 模块中增设平面波支路，帮助表示高频波场。

3. 物理约束与 Tikhonov 正则化

数据驱动方法在高频 Helmholtz 问题中若完全依赖监督数据，容易过拟合并缺乏物理一致性。**Physics-informed neural operator (PINO)** 和 **PICNO** 等方法通过在损失函数中加入 PDE 残差、边界条件和能量守恒项，在减少训练数据的同时显著提升泛化能力 [6]。我们将这一思想应用于 NSNO，将 Helmholtz 方程残差和 Dirichlet 条件作为训练损失的重要部分。

同时，为稳定学习过程并避免不适定问题，引入 **Tikhonov 正则化**。学习基础解算子的 LbNM 方法使用 Tikhonov 正则化稳定地学习解算子，并利用基本解信息（Helmholtz 方程的 Hankel 函数）快速更新边界解 [7]。本文将 Tikhonov 正则作为网络权重的正则项，控制参数范数，并在物理残差与监督损失之间平衡。

4. 基本解与 Hankel 函数特征

二维 Helmholtz 方程的自由空间格林函数是 Hankel 函数 $G_k(x,y)=\frac{i}{4}H_0^{(1)}(k|x-y|)$。LbNM 方法强调用基本解作为学习字典，使算子学习具有解释性和泛化性 [7]。在我们的方案中，基本解特征可以作为网络输入通道或卷积核的一部分，在处理点源或局部散射时尤其有效。对于恒定介质和周期边界，我们主要用正弦/傅立叶基；若将来扩展到外场散射或不规则边界，可启用 Hankel 近场特征支路。

5. 预条件迭代器：移位拉普拉斯与扫掠预条件

神经算子虽然可以快速给出近似解，但在高波数情况下仍可能产生相位或振幅偏差。为保证最终精度，我们在推断阶段使用少量**预条件 Krylov 迭代**对神经算子输出进行细化。典型方法是 **移位拉普拉斯预条件**：将 Helmholtz 算子 $-\Delta-k^2$ 替换为 $-\Delta-(k^2+i\varepsilon)$ 的倒数作为预条件器，从而降低系统的反射和不定性 [8]。配合 **GMRES** 迭代，几步即可显著降低残差。在二维情况下，也可使用 **扫掠预条件**（sweeping preconditioner）沿某一空间方向逐层消元，具有线性复杂度。

训练数据与采样策略

1. 制造解生成监督样本

题目给出源项

$$q(x,y)=-(a_1\pi)^2\sin(a_1\pi x)\sin(a_2\pi y)-(a_2\pi)^2\sin(a_1\pi x)\sin(a_2\pi y)-k^2\sin(a_1\pi x)\sin(a_2\pi y),$$

其中 $a_1=1,a_2=3$。显然真解为 $u^*(x,y)=\sin(\pi x)\sin(3\pi y)$。此构造法（制造解）既适合监督学习也适合作为 PINN 的验证点。为扩展泛化，可随机选取 a_1,a_2,k 在一定范围内生成参数族。

2. 采样策略

- **域内采样**：在 $[-1,1]^2$ 采用 Sobol 或 Halton 低差异序列产生 N_{int} 个点；对高波数应在边界层和可能激波区（此题为光滑波）适当过采样。对时间独立问题无需时间采样。
- **边界采样**：在四条边各取 N_{bdry} 个点，用于 Dirichlet 边界损失；若实施吸收边界/PML，可相应采样其厚度区域。
- **参数采样**：为训练跨多个 k，选择 k 在 $[1,k_{\max}]$ 上分层抽样。课程式训练可以先从低波数开始逐步增加高波数。
- **残差驱动补点 (RAR)**：训练过程中定期评估 PDE 残差热图，在残差最大区域新增采样点，从而自适应捕捉局部细节。

完整方案流程

1. 网络设计与损失函数

1. **NSNO/UNO 主干**：输入包括介质参数（常系数取 1）、源项特征 q、波数 k、空间坐标 (x,y) 以及可选的 Hankel/平面波特征；输出为解 $u(x,y)$。基础模块 UNO 由多层 FNO 和 U-Net 组成，可在频域与空间域交替提取全局和局部特征 [3]。
2. **平面波支路**：并行分支使用复指数激活 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$ 学习传播方向，尤其适合高频振荡 [5]。
3. **PDE 物理损失**：
4. 领域残差损失：$L_{\text{PDE}}=\|-\Delta u-k^2u-q\|_{L^2(\Omega)}^2$。
5. 边界损失：$L_{\text{BC}}=\|u|_{\partial\Omega}\|_{L^2}^2$。
6. 监督损失（若采用制造解）：$L_{\text{data}}=\|u-u^*\|_{L^2}^2$。
7. **正则化项**：加入 Tikhonov 正则 $\alpha\|\theta\|_2^2$ 控制网络权重范数，增强稳定性 [7]。
8. **总损失**：$L=w_1L_{\text{data}}+w_2L_{\text{PDE}}+w_3L_{\text{BC}}+\alpha\|\theta\|_2^2$。权重 w_i 根据训练阶段动态调整：初始阶段重视监督数据，中后期逐渐强调 PDE 约束。

2. 训练步骤

1. **数据准备**：生成若干不同 k 值的训练样本集，包含制造解$u^*(x,y)$ 或数值解，以及对应源项 q。采样点数可以根据波数规模调整，高波数需更多内点。
2. **课程式训练**：从较小波数开始训练网络，使其掌握低频特征后再逐步增加更大 k。
3. **残差驱动补点**：每隔一定步数，计算当前网络在一批探测点上的 PDE 残差，按照残差的分位数选择热点区域重新采样并加入训练集。该策略可显著提升高频区域的精度。
4. **梯度稳定化**：使用梯度裁剪及自适应学习率；同时对不同损失项采用动态权重调整（GradNorm 或基于物理量的自适应权重），避免梯度爆炸或消失。

3. 推断与细化

1. **NSNO 推断**：在给定新波数 k（如 4、100、500、1000）和源项下，通过训练好的 NSNO 网络一次前向计算获得初始预测 u_0。由于 NSNO 以近似 Neumann 级数方式表达解，其推断时间与网络大小和输入网格直接相关，不随波数显著增加。
2. **预条件 GMRES 细化**：将初始预测 u_0 作为初始向量，求解线性方程 $(-\Delta-k^2)u=q$ 的残差。使用移位拉普拉斯预条件器 $(-\Delta-(k^2+i\varepsilon))^{-1}$ 或扫掠预条件，对残差进行 1–3 步 GMRES 迭代即可明显降低误差 [8]。此阶段成本远低于从零迭代求解。
3. **误差评估与后处理**：计算相对 L^2/L^∞ 误差、守恒量和能量残差；若误差超出阈值，可进一步迭代或调整预条件器参数。

学术支撑与可行性分析

- **NSNO 优势**：NSNO 通过 Neumann 系列将解算子拆解为简单算子的叠加，使源项和介质解耦 [2]；UNO 结合 FNO 与 U-Net 捕捉多尺度特征 [3]；在高波数情况下，实验证明其相对误差至少下降 60%，计算成本降低 50%，且对训练数据需求更低 [4]。
- **FNO 的泛化与速度**：FNO 直接在频域参数化积分核，具有网格不变性和高效推断能力，在学习 PDE 算子方面实现了比传统数值方法高三个数量级的速度提升 [1]。
- **平面波激活与振荡表达**：平面波激活网络利用复指数捕捉传播方向，优于普通激活函数或 SIREN，特别适合 Helmholtz 方程的振荡解 [5]。
- **PICNO/物理约束的必要性**：在神经算子损失中加入 PDE 残差等物理项，可大幅减少对真实解数据的依赖并提升高频泛化能力 [6]。
- **Tikhonov 正则与基本解**：学习基于基本解的解算子并施加 Tikhonov 正则，可稳定地学习解算子并快速更新边界输入 [7]。利用基本解信息可以提高模型的解释性和泛化能力。
- **预条件细化的重要性**：移位拉普拉斯预条件器和扫掠预条件器能显著降低高频 Helmholtz 系统的条件数，结合 GMRES 可以快速收敛 [8]。在神经算子预测的基础上做少量迭代，能够修正残留的相位和振幅误差。

实现建议

1. **数据生成示例**（制造解）：
2. 设置 $k \in [1, 200]$ 的训练集合；对每个 k 在 $[-1, 1]^2$ 生成 $N_{\text{int}} \approx 10^4$ Sobol 点及 $N_{\text{bdry}} \approx 2000$ 边界点。
3. 计算真解 $u^*(x, y) = \sin(\pi x)\sin(3\pi y)$ 以及源项 q。
4. 保存 (x, y, k, q, u^*) 作为监督数据；另行保存无标签配点用于 PDE 残差。
5. **网络与训练**：
6. UNO 模块采用 4–6 个 FNO 层与 U-Net 跳跃连接，通道数从 32 增加至 128。
7. 平面波支路使用少量可学习的传播方向向量；特征通过与 UNO 输出拼接。
8. 训练初期取权重 $w_{\text{data}} : w_{\text{PDE}} : w_{\text{BC}} = 1 : 1 : 2$，随后降低 w_{data} 至 0.3–0.5；正则参数 α 可取 10^{-4}。
9. 每隔 500 迭代执行残差驱动补点（采样上千新点）。
10. **推断与精修**：
11. 对于目标波数 $k = 4$：网络预测即可达到高精度；若必要，做一两次预条件迭代。
12. 对于高波数 $k = 100, 500, 1000$：使用训练好的 NSNO 前向得到初值 u_0，随后进行 1–3 次 GMRES 迭代，其中移位拉普拉斯预条件件的参数 ε 可选 $\varepsilon = 0.5k$。

结论

本文系统整理了一套适用于二维高频 Helmholtz 方程的**混合学习–数值求解方案**。核心在于：

- 使用 **Neumann 系列神经算子 (NSNO)** 结合 **UNO/FNO** 多尺度结构学习跨波数的解算子，充分利用 Neumann 级数解耦源项与介质 [2]；
- 引入 **平面波激活** 和 **正弦/傅立叶基** 捕捉高频振荡 [5]；
- 在训练中加入 **PDE 残差、边界条件** 以及 **Tikhonov 正则化** 以保证物理一致性和稳定性 [6] [7]；
- 在推断阶段用 **预条件 GMRES** 对神经算子输出进行少量精修，提高高波数精度 [8]。

这一方案兼具理论支撑与工程可行性：NSNO/UNO 提供高速、跨参数的推断能力；预条件迭代保障高频精度；物理约束提高泛化并减少数据需求。对同类边值问题（不同 a_1, a_2, k 或不同源项）也具有良好适用性。通过合理的训练数据生成和残差驱动采样，可以在有限样本下实现可靠且高效的高频 Helmholtz 求解，为将深度学习与传统数值算法结合提供了范例。

---

1 [2010.08895] Fourier Neural Operator for Parametric Partial Differential Equations
https://ar5iv.labs.arxiv.org/html/2010.08895

2 3 4 NSNO: Neumann Series Neural Operator for Solving Helmholtz Equations in Inhomogeneous Medium ^*
https://arxiv.org/html/2401.13494v1

5 [2012.13870] A Neural Network with Plane Wave Activation for Helmholtz Equation
https://ar5iv.labs.arxiv.org/html/2012.13870

6 An effective physics-informed neural operator framework for predicting wavefields
https://arxiv.org/html/2507.16431v1

7 Learning based numerical methods for Helmholtz equation with high frequency
https://arxiv.org/html/2401.09118v1

8 Shifted Laplace and related preconditioning for the Helmholtz equation
https://www.maths.dur.ac.uk/lms/101/talks/0514graham.pdf