变分（基于能量的）谱学习：求解偏微分方程的机器学习框架

M. M. Hammad

埃及达曼胡尔大学理学院数学与计算机科学系。电子邮箱：m_hammad@sci.dmu.edu.egOrcid：https://orcid.org/0000-0003-0306-9719

摘要

我们提出变分谱学习（VSL），这是一种用于求解偏微分方程（PDE）的机器学习框架，直接在谱展开的系数空间中运作。VSL 为变分偏微分方程理论、谱离散化与当代机器学习实践搭建了有原则的桥梁。其核心思想是将给定的 PDE $Lu = f$ in $Q = \Omega \times (0, T)$ 及其边界条件和初始条件，改写为可微的时空能量，这些能量由强形式最小二乘残差和弱形式（Galerkin）表述构成。解表示为有限谱展开 $u_N(x,t) = \sum_{n=1}^{N} c_n \varphi_n(x,t)$，其中 φ_n 是时空中的张量积切比雪夫基，并通过满足狄利克雷条件的空间模态解析地施加齐次边界条件。由此得到关于系数向量 $\mathbf{c}$ 的紧凑线性参数化，而 PDE 的所有复杂性均纳入变分能量中。我们展示了如何构造强形式和弱形式的时空泛函，加入初始条件项和蒂霍诺夫正则化项，并通过基于梯度的优化最小化所得目标函数。实践中，VSL 使用 TensorFlow 实现，借助自动微分和 Keras 余弦衰减重启学习率调度，对中等规模的系数向量进行稳健优化。在椭圆型和抛物型基准测试问题上的数值实验，包括一维和二维泊松方程、扩散方程及 Burgers 型方程，表明 VSL 达到的精度可与采用 Crank–Nicolson 时间步进的经典谱配置法相当，同时提供适用于现代优化工具的可微目标函数。与物理信息神经网络的比较表明，在系数空间中学习能够缓解深度场空间代理模型的一些优化病态，尤其适用于解光滑且算子刚性的情形。

关键词

变分谱学习；变分偏微分方程求解器；谱方法；切比雪夫基；时空伽辽金表述；最小二乘偏微分方程能量；系数空间学习；物理信息神经网络；偏微分方程机器学习。

1. 引言

偏微分方程（PDEs）是物理学、工程学、金融学以及应用科学众多领域中对现象进行数学表述的核心工具[1, 2]。偏微分方程的数值求解传统上依赖于成熟的离散化技术，例如有限差分、有限体积、有限元和谱方法；这些方法在精度、稳健性和理论理解方面均已达到较高的成熟度 [3–15]。与此同时，机器学习（ML）的最新发展催生了求解偏微分方程的新范式，即将物理定律直接嵌入目标函数中，其代表性方法包括物理信息神经网络（PINNs）和算子学习架构[16–23]。这些方法旨在利用自动微分、表达能力强的函数逼近器和大规模优化，构建数据高效的替代模型或偏微分方程直接求解器 [24–26]。尽管前景广阔，经典变分公式与当前许多基于机器学习的求解器之间仍存在显著差距，这既体现在偏微分方程约束的施加方式上，也体现在逼近空间的参数化和优化方式上。

在经典方法中，变分形式占据核心地位，尤其适用于椭圆型和抛物型问题[27–30]。通过将偏微分方程改写为能量泛函的极小化问题，或改写为适当函数空间中的弱形式，这些方法为伽辽金方法和佩特罗夫–伽辽金方法奠定了严谨的基础，其中包括谱方法和有限元格式 [7–9], [11–15], [27–30]。这些方法通过使逼近空间与偏微分方程背后的泛函分析相契合，并以弱形式强制实现残差正交性，从而获得高精度和稳定性。特别是，谱方法利用全局多项式基或三角函数基，对光滑解实现指数收敛 [11–15]。然而，这类方法通常依赖显式推导的变分形式、人工设计的基，以及直接或迭代

用于线性或弱非线性代数系统的求解器 [27–30]。将其扩展到复杂、非均质或参数化问题，可能在技术上颇具挑战且计算成本高昂，尤其是在需要针对多种参数配置反复求解时 [31, 32]。

另一方面，基于学习的偏微分方程求解器通常采用场空间视角，即由神经网络直接将解 $u(x)$ 或 $u(x,t)$ 参数化为空间（和时间）[16–19] 的函数。随后，通过残差损失将偏微分方程纳入其中，既可以采用强形式（微分算子的逐点残差），也可以采用弱形式积分意义；网络参数则通过基于梯度的优化进行调整 [33, 34]。虽然这类方法得益于自动微分和灵活的架构，但也面临若干挑战。当涉及高阶导数或偏微分方程呈现多尺度特性时，训练动态可能十分僵硬，且对超参数高度敏感 [35–39]。边界条件和初始条件通常通过惩罚项而非解析方式施加，这可能导致约束违反，或需要设置较大的惩罚权重 [40, 41]。此外，偏微分方程内在的变分结构往往未得到充分利用：损失函数的选择并不总是对应一个有充分理论依据的能量泛函，而且其收敛保证通常弱于经典伽辽金格式所能提供的保证 [33, 34], [42, 43]。

这些观察促使我们更系统地整合偏微分方程的变分结构、谱近似与现代机器学习工具。本研究的核心思想是回归偏微分方程离散的变分根基，同时采用当代深度学习中的优化与自动微分机制。我们不再使用神经网络直接参数化解场，并通过较为松散的变分损失来施加偏微分方程，而是提出在谱基中参数化解，并定义直接源自强变分形式和弱变分形式的损失函数。由此得到的框架称为变分谱学习（VSL），可视为在偏微分方程导出的能量引导下，于系数空间中进行基于梯度的学习，并借助现代优化算法和自动微分来实现。

在VSL框架中，未知解 $u(x,y,t)$ 在空间和时间上展开为张量积谱基。对于矩形等简单区域上的问题，我们在每个空间方向和时间方向上都采用切比雪夫多项式，并构造满足齐次狄利克雷边界条件的空间基函数。例如，在二维情形下，将分别满足狄利克雷边界条件的 x 和 y 基函数与时间切比雪夫基相结合，构成时空谱试探函数。近似的自由度就是该展开的谱系数，并将其视为可训练参数。这种系数空间参数化保留了谱方法的可解释性与收敛性质，同时支持使用基于梯度的优化和通用自动微分来组装残差与能量。

VSL 的变分特性体现在训练目标函数的定义中。对于给定的偏微分方程算子 L 和强迫项 f，我们考虑两种主要形式的变分能量。强形式能量定义为点态偏微分方程残差 [44, 45] 的最小二乘泛函。将偏微分方程抽象地写为 $F(u) = 0$ on 时空域，强形式能量对时空上的 $|F(u)|^2$ 进行积分，从而得到一个标量目标函数，与强形式最小二乘离散密切相关。弱形式能量基于伽辽金观点。根据偏微分方程类别和所需的导数阶数，它可以通过以下任一方式实现：（i）通过分部积分得到经典弱形式（从而降低导数阶数，并与强制双线性型相一致）；或（ii）将强残差投影到谱试探基 [11–15], [27–30] 上，得到伽辽金／矩残差。无论采用哪种方式，得到的残差量都通过求积进行组装，并针对相应的逐系数残差 [46] 构成最小二乘目标函数。两种能量均通过时空中的张量积求积公式进行近似，其关于谱系数的梯度则通过嵌套微分磁带自动求得。

边界条件和初始条件的处理方式与变分形式保持一致。空间中的齐次狄利克雷边界条件通过基函数构造内置于基函数中，因此任意系数向量都会自动生成满足边界上 $u = 0$ [11–15] 的解。这样便无需在优化 [40, 41] 中使用边界惩罚项或显式强制约束。对于时变问题，则通过额外的损失项，将 $t = 0$ 处谱近似与给定初始剖面之间的偏差纳入惩罚。由此，整体训练目标函数结合了变分偏微分方程能量、初始条件损失以及系数正则化项，构成了结构良好的优化问题，其极小值对应于原偏微分方程的近似解，且约束得到正确强制 [27–30]。

从优化的角度来看，VSL 将变分偏微分方程求解重新表述为：在系数空间中，以物理启发的损失函数训练一个浅层线性模型。这一视角为采用机器学习领域开发的先进优化技术提供了契机，例如自适应梯度方法和带重启的学习率调度 [47–50]。具体而言，本研究采用带重启的余弦衰减学习率调度（例如 Keras 中的实现），使学习率按振荡周期变化，从而在训练过程中以实用的方式调节步长；这有助于缓解早期迭代中的停滞，同时支持后期阶段的精细尺度细化 [49, 50]。由于参数化关于系数是线性的，映射 $\mathbf{c} \to u_N(\cdot;\mathbf{c})$ 是固定的线性特征映射，其中 u_N 是有限谱展开，$\mathbf{c}$ 是系数向量；对于线性偏微分方程，在标准假设成立且求积精度足够高时，由此得到的离散目标函数通常是凸二次函数 [46], [51]。对于非线性偏微分方程，非凸性仍然存在（通过算子引入），

但系数空间表述避免了深层场空间神经网络带来的额外架构非线性，因此在经验上通常更容易优化。同时，VSL 继承了自动微分的灵活性，无需手动推导离散模板，即可轻松处理高阶导数和复杂的偏微分方程算子；此外，强残差和伽辽金型残差构造都可以在连续层面进行编码，并在求积离散后自动求导。

为评估 VSL 的实际能力，必须将其与经典基线方法和基于学习的基线方法进行比较。经典谱方法提供了自然的基准测试，因为它们采用相同的函数逼近空间，但依赖直接或隐式线性求解器，而非基于梯度的变分能量最小化。对于时变问题，我们采用空间上的切比雪夫–洛巴托配置法，并结合 Crank–Nicolson 时间步进；这是一种高阶 A 稳定方法，广泛用于扩散型方程 [13], [52–55]。该求解器在每个时间步将偏微分方程离散为线性方程组，并直接在配点节点上施加边界条件 [52], [56, 57]。因此，它为精度和稳定性提供了严格的参考。对于基于学习的方法，我们考虑采用解析边界与初始条件提升的物理信息神经网络架构，其中神经网络对残差场进行参数化，并将其乘以能够施加约束的函数 [40, 41]。偏微分方程通过在时空配置点上计算的均方残差损失纳入模型，网络参数则使用与 VSL 相同的优化器和学习率调度进行训练。这使我们能够在数值与优化设置高度匹配的情况下，均衡比较系数空间学习与场空间学习。

在这一实验环境中，我们将 VSL 应用于一组具有代表性的偏微分方程基准问题，这些问题在数值分析和偏微分方程机器学习领域都十分常见。其中包括泊松方程等椭圆型问题、时变扩散方程等抛物型问题，以及伯格斯型的弱非线性扩散–对流问题[58]。对于每个基准问题，我们构造制造解，使其精确解和强迫项均具有闭式表达式，从而能够精确量化误差 [59]。性能指标包括测试网格上的相对 L^2 和L^∞ 误差，以及变分能量衰减、偏微分方程残差历史、初始条件失配和学习率轨迹等诊断量。通过分析各方法在这些指标上的表现，我们旨在阐明 VSL 在何种条件下能够达到与经典求解器相当的精度，并确定其相较于基于场的学习具有优势的情形。

VSL 将经典数值分析与现代机器学习实践紧密结合，带来了多项重要优势。首先，它明确地将基于学习的偏微分方程求解器重新置于变分视角之下，把损失视为由强形式或弱形式导出的真正时空能量，而非临时拼凑的残差惩罚。这种优化目标与底层偏微分方程结构之间的一致性增强了可解释性，也赋予训练过程清晰的物理含义。其次，VSL 保留了对解的高阶谱表示，因此其逼近空间在数学上清晰透明、紧凑，并能在光滑问题上实现极快的收敛；与此同时，它仍使用训练深度网络时相同的优化器和基础设施。从数值角度来看，与低阶方法或稠密神经网络相比，谱基通常只需少得多的自由度便能达到给定精度；VSL 中的系数向量通常维数适中，却能在整个时空域上表示全局光滑的近似。第三，由于基函数固定且解析已知，该模型可视为一个从系数到函数值的线性映射，所有非线性均源于微分算子以及残差对解的依赖。因此，训练转化为具有确定性特征映射的非线性最小二乘问题，其优化景观比高度过参数化的场空间网络更加平滑且易于分析；后者往往会遭遇刚性、谱偏置和棘手的损失平衡问题。第四，边界条件和初始条件通过合理的方式处理——齐次狄利克雷条件以解析方式嵌入基函数，初始数据则体现为彼此清晰分离的损失项——因此约束在构造时便得到满足，无须依赖脆弱的惩罚参数调节，而且逼近空间自动包含于正确的函数空间框架中。最后，从科学计算机器学习的角度来看，VSL 为黑箱场空间神经网络提供了一种可控且可解释的替代方案：其架构刻意保持简单——在固定谱特征空间中训练线性模型，使其最小化基于物理的损失——但由于它基于标准深度学习框架实现，仍可利用自动微分、GPU 加速、自适应梯度方法和先进的学习率调度。由此，VSL 同时可作为强有力的高阶基准、用于研究偏微分方程约束学习中优化问题的解析易处理实验平台，以及一种可复用的设计模板，用于在广泛的偏微分方程模型中构建新的变分系数空间求解器。

为将所提出的框架置于更广泛的背景中，本文其余部分安排如下。第 2 节回顾相关背景与研究工作。第 3 节介绍谱表示与基函数，包括一维切比雪夫基和满足边界条件的狄利克雷基，以及在空间和时间上的张量积扩展。第 4 节通过定义 VSL 的核心表述，阐述系数空间中的学习。第 5 节讨论架构与学习率调度，重点介绍线性系数模型，以及现代深度学习框架中的实现细节。第 6、7 和 8 节报告三类基准问题上的数值实验——一维和二维椭圆型泊松问题、一维和二维时变扩散方程，以及 Burgers 型扩散–对流问题——并将 VSL 与基准求解器进行比较。第 9 节总结主要发现，并概述 VSL 框架对变分偏微分方程求解器的意义。

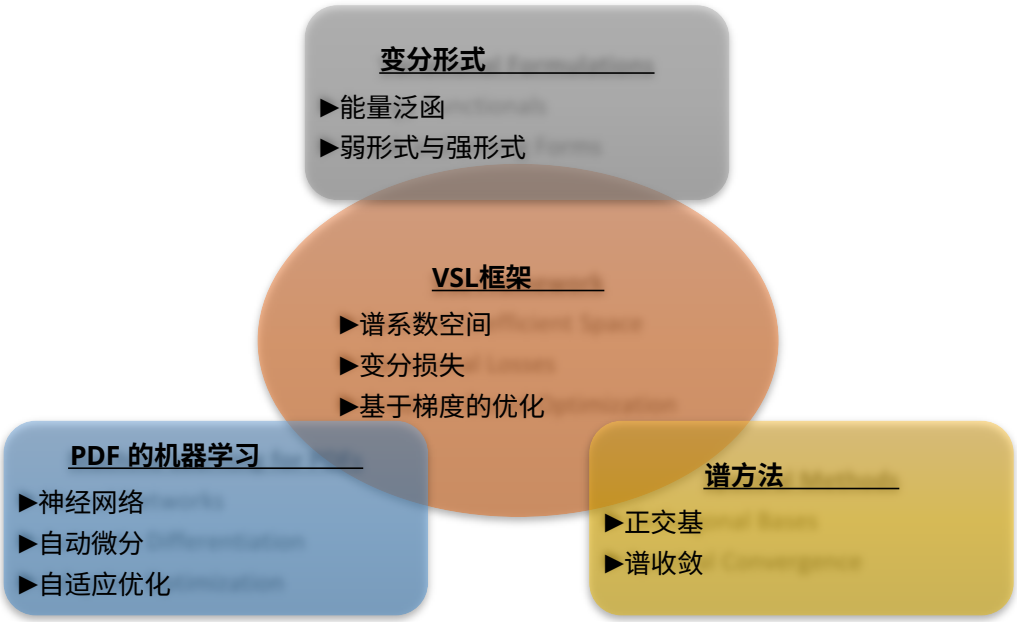


图 1。维恩图展示了变分形式、谱方法和偏微分方程机器学习之间的交集，以及它们如何共同构成 VSL框架。重叠部分强调了 VSL 的核心思想：在谱系数空间中，利用由偏微分方程导出的变分损失（强形式最小二乘法或伽辽金型残差）进行基于梯度的优化，并通过现代机器学习软件栈中的基于求积的离散化和自动微分来实现。

2. 背景与相关工作

对偏微分方程的研究长期以来以变分原理、谱逼近理论，以及近年来兴起的机器学习–式表述为基础，见图 1。本节回顾在 VSL 中交汇的主要研究方向：谱方法、偏微分方程的机器学习方法，以及优化策略。本节旨在突出直接启发并指导 VSL 框架的理念与机制，而非提供面面俱到的综述。

2.1 谱方法

谱方法通过在正交基上进行全局展开来逼近偏微分方程求解，通常在周期域上使用傅里叶级数，在有界区间上使用经典正交多项式（例如切比雪夫多项式或勒让德多项式）。对于区域 $[-1,1]$ 上的标量场 $u(x)$，次数为 N 的切比雪夫谱逼近可写为 $u_N(x) = \sum \quad c_k T_k(_{k=0}^{N} \quad x \ )$，其中 $T_k(x)$ 是第一类切比雪夫多项式，c_k 是待确定的展开系数 [11–15]。对于解析的 u，逼近误差 $|u - u_N|$ 通常随 N 以指数（几何）速率衰减；对于 $u \in C^\infty$，通常可观察到超代数衰减；而对于有限的索引正则性，衰减则是代数型的。光滑解所表现出的这种快速衰减通常称为谱收敛（或指数收敛）。

谱方法中存在多种表述形式。在谱Galerkin方法 [11–15], [27–30], 中，将近似解代入弱形式，并对试探函数与检验函数使用相同的全局基函数，从而得到一个系统，其矩阵元素是基函数及其导数的内积。在谱配置方法中，则在一组配点节点上逐点强制满足偏微分方程，这些节点通常选为求积节点，例如切比雪夫–高斯–洛巴托点或高斯–勒让德点。对于 $[0,1]$, 上的切比雪夫配点法，通常先取$[-1,1]$, $\xi_j = \cos(\pi j/N)$ 上的切比雪夫–高斯–洛巴托节点，其中 $j = 0, \dots, N$，再通过 $x_j = (1 + \xi_j)/2$ [12, 13] 将其映射到 $[0,1]$。随后构造微分矩阵 D 和 D^2，使其作用于节点值时，能够近似计算物理坐标中的一阶和二阶导数（并采用仿射映射所引入的适当缩放）。由此，偏微分方程化为关于节点值的常微分方程组或代数方程组，并通过修改对应边界节点的矩阵行来施加边界条件。

2.2 偏微分方程的机器学习

深度学习已成为构建偏微分方程代理模型和解算子的强大范式，应用领域涵盖流体力学、材料科学、气候建模和反问题[16, 17], [20–23]。一种颇具影响力的方法是物理信息神经网络[16, 17], ，它通过神经网络$u(x, t)$对解$\mathcal{N}_\theta(x, t)$进行参数化，并通过最小化损失来训练参数θ；该损失会惩罚在一组配置点处与偏微分方程、边界条件和初始条件的偏差 [40, 41]。对于形式为$F(u) = 0$的偏微分方程，物理信息神经网络损失通常包含一项

$$\mathcal{L}_{\mathrm{PDE}}(\theta) = \frac{1}{N_{\mathrm{int}}} \sum_{i}^{N_{\mathrm{int}}} |F(\mathcal{N}_\theta)(x_i, t_i)|^2 , \tag{1}$$

其中， $F(\mathcal{N}_\theta)$中的导数通过自动微分计算。其他项用于约束边界条件和初始条件 [16], [40, 41]。物理信息神经网络已成功应用于广泛的正向与逆向偏微分方程问题。然而，训练物理信息神经网络可能颇具挑战，尤其是在处理刚性或多尺度偏微分方程、高维区域，或具有尖锐特征的解时；不平衡损失项、优化病态，以及对初始化和采样策略的敏感性等问题，促使人们对其架构和算法进行了大量改进[35–39], [42, 43]。

另一类互补的研究方向致力于算子学习，其目标是学习从偏微分方程输入（例如系数、强迫项、边界／初始数据）到解场 [20–23] 的映射。神经算子架构——包括 DeepONet 风格的分解以及傅里叶／神经算子系列——旨在以数据驱动的方式逼近该解算子，通常能够在训练完成后实现快速推理。当需要针对不同输入进行大量求解时，这些方法尤其有效；但它们通常依赖于由数值求解器生成的具有代表性的训练对，其泛化能力也可能高度取决于训练分布的覆盖范围。相比之下，VSL 针对给定的偏微分方程实例，通过在固定且具有可解释性的逼近空间中优化变分目标来进行物理约束求解，因此不需要监督式解数据。

第二类方法更加直接地利用偏微分方程的变分结构。例如，在深度Ritz方法 [33], 中，偏微分方程被表述为能量泛函 $\mathrm{I}(u)$ 的欧拉–拉格朗日方程，并通过最小化 $\mathrm{I}(u_\theta)$ 来训练神经网络 u_θ ，而不是最小化逐点残差。深度 Galerkin 方法（DGM）[18] 则利用时空中的随机采样，最小化强形式残差（以及边界／初始惩罚项），从而提供一种无网格残差训练过程，而非经典的 Galerkin 弱形式。在偏微分方程机器学习的更广阔领域中，一些混合方法明确地将谱方法与深度学习相结合。例如，弱形式物理信息神经网络将偏微分方程残差与测试函数相乘后积分，并通过求积近似所得积分，从而构造出更接近离散 Galerkin 或 Ritz 泛函的损失函数 [34], [46]。总体而言，这些进展凸显出一种趋势：在基于学习的求解器中利用变分偏微分方程形式的结构；但现有的大多数方法要么以启发式方式处理谱层或变分层，要么依赖完全黑箱的神经架构。VSL 通过在全局谱基中表示解，同时定义与由控制偏微分方程导出的强形式或弱形式变分能量相一致的损失函数，弥补了这一空白。

2.3 偏微分方程训练的优化与学习率调度

无论采用何种表示方式——有限元、谱基还是神经网络——在变分或残差最小化框架下求解偏微分方程，都不可避免地会转化为在（可能是高维的）参数空间 [47],[51] 上求解优化问题。经典 Galerkin 方法和谱方法会产生线性或弱非线性系统，通常使用直接求解器或迭代求解器求解，例如共轭梯度法、多重网格法或 Krylov 子空间方法 [56, 57]。基于机器学习的偏微分方程求解器则主要依赖随机梯度下降（SGD）[60–64], 的各种变体，通过按照 $\theta_{k+1} = \theta_k - \eta_k \nabla_\theta \mathrm{L}(\theta_k)\eta_k$ 迭代更新参数 θ ；其中 η_k 是学习率，$\nabla_\theta \mathrm{L}(\theta_k)$ 是经验损失 [60–64] 梯度的（可能基于小批量数据的）随机估计。过去十年间，Adam [48],、RMSProp [61], 和 AdaGrad [62] 等自适应梯度方法已成为深度学习中的标准默认选择，因为它们能够根据梯度一阶与二阶矩的运行估计，按参数重新缩放更新量。物理信息神经网络及相关的偏微分方程感知架构在训练初期常采用 Adam，也可能在微调阶段切换到二阶优化器（例如 L-BFGS），从而兼顾随机方法的稳健性与拟牛顿方法的局部收敛性质。

学习率调度在稳定并加速这类场景中的优化方面发挥着核心作用。人们通常不会让 η_k 保持恒定，而是采用预定的或自适应衰减方案，在训练过程中逐渐降低学习率，或在高低值之间循环变化。简单的阶梯衰减和指数衰减调度会在达到指定训练轮次后按固定比例降低学习率，而循环学习率则会定期在上下限之间改变 η_k ，以便在训练早期鼓励探索，后期促进精细化。余弦退火调度从相对较高的学习率开始，并按照余弦曲线逐渐降低学习率，通常还会结合重启，定期将学习率重置为较高值。

总的来说，本节回顾的各条研究脉络为 VSL 的设计提供了依据：VSL 是一个结合了经典变分公式的严谨性与稳定性、谱方法的逼近能力，以及现代机器学习优化灵活性的框架。变分形式提供了定义具有物理意义的损失函数的能量泛函和弱形式。谱基则提供了紧凑且满足边界条件的逼近空间，并具有优异的收敛性质。偏微分方程机器学习带来了自动微分、灵活实现和大规模优化等工具，而对学习率调度和自适应方法的研究则为偏微分方程约束模型的实际训练提供了参考。VSL 可视为这些组成部分的连贯综合：它在谱系数空间中执行基于梯度的优化，所用损失由强形式最小二乘或伽辽金型

残差构造（并采用求积）直接导出，同时基于求积的离散化和自动微分使其能够在现代机器学习软件栈中实现高效而灵活的实现。

3. VSL框架：谱表示与基函数

所提出的VSL框架的有效性在很大程度上取决于用于近似解场的谱表示的选择。由于控制偏微分方程定义在时空有界区域上，并且本文所研究的基准问题具有光滑的制造解，因此，采用全局正交多项式基是自然的选择；随着模态数量增加，这类基能够提供高阶收敛，甚至实现谱收敛。在各种可用选项中，第一类切比雪夫多项式兼具数值稳定性高、递推关系高效以及与成熟求积和微分技术相兼容等优点，因而尤其具有吸引力。在该框架中，解被表示在一个张量积空间内：每个空间维度由满足边界条件的切比雪夫基函数张成，时间维度则由标准切比雪夫模态张成。所得表示能够在空间中自动施加齐次狄利克雷边界条件，同时在时间方向保持足够的灵活性，以通过辅助损失编码初始条件。为完成这一构造，变分能量中出现的时空积分采用张量积高斯–勒让德求积进行计算，从而获得精确的数值近似，而不受切比雪夫基的正交权函数限制。本节将详细介绍其基础谱表示：首先介绍一维切比雪夫基，随后描述满足狄利克雷条件的空间模态的构造，扩展至时空张量积基，最后概述用于近似变分能量的求积公式。

在一维情况下，第一类切比雪夫多项式 $\{T_k\}_{k\geq 0}$ 定义在参考区间 $[-1,1]$ 上，其关系式为 [11],

$$T_k(\xi) = \cos(k \arccos \xi), \qquad \xi \in [-1,1], k \in \mathbb{N}_0. \tag{2}$$

它们满足三项递推关系 12 , [ ],

$$T_0(\xi) = 1, \qquad T_1(\xi) = \xi, \qquad T_{k+1}(\xi) = 2\xi T_k(\xi) - T_{k-1}(\xi), \qquad k \geq 1, \tag{3}$$

该递推关系仅使用乘法和加法，即可稳定且高效地计算直到指定最大次数的所有模态。切比雪夫多项式关于权函数 $w(\xi) = (1-\xi^2)^{-1/2}$在 $L^2([-1,1], w)$ 中构成一个正交系统，即 [11],

$$\int_{-1}^{1} \frac{T_j(\xi) T_k(\xi)}{\sqrt{1-\xi^2}} d\xi = \begin{cases} \pi, & j = k = 0, \\ \pi/2, & j = k \geq 1, \\ 0, & j \neq k. \end{cases} \tag{4}$$

这种正交性，以及以近乎最小的均匀误差逼近光滑函数的能力，构成了经典切比雪夫谱方法理论的基础。对于光滑函数 g: $[-1,1] \to \mathrm{R}$，可以写出切比雪夫级数 [11],

$$g(\xi) \approx \sum_{k=0}^{N} a_k T_k(\xi), \tag{5}$$

其中，系数 a_k 可以通过离散正交投影确定，例如使用切比雪夫–高斯节点或切比雪夫–洛巴托节点 [11]。对于解析函数，随着 N 增加，逼近误差通常以指数速率衰减 [11–15]。

为了在物理区间 $[0,1]$, 上表示偏微分方程解，采用物理变量 $x \in [0,1]$ 与参考坐标 $\xi \in$ −1之间的仿射映射会很方便，1。标准选择为 [ ]

$$\xi = 2x - 1. \tag{6}$$

因此，定义在 $[0,1]$ 上的函数 $u(x)$ 可展开为，

$$u(x) \approx \sum_{k=0}^{N} a_k T_k(2x-1), \tag{7}$$

基函数上的所有运算都可以用参考变量 ξ来进行。在 VSL框架的底层实现中，该映射用于在 $[0,1]$中的任意点构造切比雪夫多项式：给定物理节点向量 x，首先计算 $\xi = 2x - 1$，然后通过迭代递推关系求得 T_0、……、T_N。当使用 M 个求值点时，由此得到大小为 $M \times (N+1)$ 的特征矩阵。关于 x 的导数既可以通过解析方法（利用 T_k的导数递推关系）求得，也可以像本文这样，通过对复合映射（$x \to \xi \to T_k(\xi)$）应用自动微分来获得。

对于满足齐次狄利克雷边界条件的偏微分方程，专门设计空间基会更有优势，使每个基函数在区域边界处都为零。在一维空间中，$[0,1]$, 核心约束为 p

$$u(0) = 0, \qquad u(1) = 0. \tag{8}$$

如果采用通用的切比雪夫展开，这些条件会转化为关于系数的线性约束，可以通过消元或施加惩罚项来强制满足。然而，更优雅且数值上更稳健的策略，是将边界条件直接融入基函数的选择中。为此，可以构造一族函数 $\{\varphi_k\}_{k=0}^{N_x-1}$，使其满足

$\varphi_k(0) = \varphi_k(1) = 0$ 对所有 k 均成立，并且 $\{\varphi_k\}$ 张成 $H_0^1(0,1)$ 的一个丰富子空间。在本文采用的谱表示中，满足狄里克雷条件的基定义为：

$$\varphi_k(x) = T_{k+2}(2x-1) - T_k(2x-1), \qquad k = 0, \dots, N_x - 1. \tag{9}$$

φ_k 在边界处消失，这一点可由切比雪夫多项式的端点恒等式推出。由于对于所有 k，$T_k(1) = 1$，且 $T_k(-1) = (-1)^k$，因此有

$$\varphi_k(0) = \varphi_k(1) = 0, \tag{10}$$

因此，每个 φ_k 都满足齐次狄里克雷条件。此外，族 $\{\varphi_k\}$ 线性无关，并张成一个在两个端点处均具有零迹的多项式子空间（即任何线性组合都恒满足 $u(0) = u(1) = 0$）。具体而言，它提供了一个边界相容模态基，适用于以谱精度逼近 $H_0^1(0,1)$ 中的光滑目标函数。任何表示为线性组合的函数，[11–15],

$$u(x) = \sum_{k=0}^{N_x-1} a_k \varphi_k(x), \tag{11}$$

因此，对于任意系数 $\{a_k\}$，都会自动满足 $u(0) = u(1) = 0$。这一构造保留了切比雪夫基的光滑性和逼近能力，同时将本质边界条件“硬编码”到函数空间中；当偏微分方程在变分框架下处理，且不应通过惩罚项在数值上控制边界值时，这一特性尤为重要。

对于多维区域，在每个空间维度中独立采用相同的满足边界条件的构造。在坐标为 x 的单位正方形 $0,1 \times 0,1$ 上，引入两组满足狄里克雷边界条件的函数族，

$$\varphi_i(x) = T_{i+2}(2x-1) - T_i(2x-1), \qquad i = 0, \dots, N_x - 1, \tag{12.1}$$

$$\psi_j(y) = T_{j+2}(2y-1) - T_j(2y-1), \qquad j = 0, \dots, N_y - 1, \tag{12.2}$$

使得对于所有 i，$\varphi_i(0) = \varphi_i(1) = 0$；对于所有 j，$\psi_j(0) = \psi_j(1) = 0$。随后通过张量积构造二维空间基，

$$\phi_{ij}(x,y) = \varphi_i(x)\psi_j(y), \tag{13}$$

当 $x \in 0,1$ 或 $y \in 0,1$ 时，该基函数为零。由此得到的张成空间，

$$V_{N_x,N_y} = \operatorname{span}\{\phi_{ij}(x,y)\}_{i=0,\dots,N_x-1}^{j=0,\dots,N_y-1} \subset H_0^1\big((0,1)\times(0,1)\big), \tag{14}$$

是齐次狄里克雷问题经典能量空间的一个有限维子空间。因此，在 V_{N_x,N_y} 中构造的任何谱空间逼近，按设计都会在整个边界 $\partial\Omega$ 上满足边界条件 $u = 0$；当此类空间展开与时间基耦合时，这一性质在所有时刻均成立。

在时间方向上，边界条件的作用有所不同。对于扩散方程等初值问题，条件 $u(.,0) = u_0$ 仅规定初始时刻的解，而在 $t = T$ 处不施加本质条件。在当前框架中，与其在时间基中强制施加初始条件，不如使用标准的切比雪夫时间基，并通过额外的损失项纳入初始数据。令 $t \in [0,T]$ 表示时间，并引入仿射映射 $\tau = 2t/T - 1 \in [-1,1]$。时间基由下式给出，

$$\chi_m(t) = T_m\left(\frac{2t}{T} - 1\right), \qquad m = 0, \dots, N_t - 1. \tag{15}$$

这些函数在 $t = 0$ 或 $t = T$处并不为零；相反，它们张成了 $C^0([0,T])$ 的一个丰富子空间，能够近似平滑的时间行为。初始条件 $u(.,0) = u_0(.)$ 通过在总变分能量中惩罚谱近似与 u_0 在 $t = 0$ 处之间的偏差来施加，具体如上一节所述。这种职责分离——通过满足边界条件的基函数解析地施加空间狄利克雷约束，并通过专门的损失数值地施加初始条件——使时间近似更加灵活，同时保持了清晰的泛函框架。

将空间模态与时间模态结合起来，即可得到完整解的张量积时空基。在时空柱体 $Q = 0\,1^2 \times 0\,T$ 上，基函数定义为 $(,) (,)$，

$$\Phi_{i,j,m}(x,y,t) = \varphi_i(x)\psi_j(y)\chi_m(t), \qquad i = 0, \dots, N_x - 1, j = 0, \dots, N_y - 1, m = 0, \dots, N_t - 1. \tag{16}$$

变分谱近似的形式为

$$u_{N_x,N_y,N_t}(x,y,t) = \sum_{i=0}^{N_x-1}\sum_{j=0}^{N_y-1}\sum_{m=0}^{N_t-1} c_{i,j,m}\,\Phi_{i,j,m}(x,y,t), \tag{17}$$

其中 $c_{i,j,m}$ 是待学习的谱系数。为便于实现，将三元组索引 (i,j,m) 展平为单个索引 $n \in \{1, \dots, N\}$，其中 $N = N_x N_y N_t$，并将系数存储在向量 $\mathbf{c} \in \mathrm{R}^N$ 中。在一批时空点 $\{(x_q, y_q, t_q)\}_{q=1}^{M_{\text{eval}}}$ 上计算基函数的值，可得到特征矩阵 $\mathbf{\Phi} \in \mathrm{R}^{M_{\text{eval}} \times N}$，其第 (q,n) 个元素为 $\Phi_n(x_q,y_q,t_q)$；这些点处的近似解则由矩阵向量乘积给出。

$$\mathbf{u} = \mathbf{\Phi c} \in \mathbb{R}^{M_{\text{eval}}}. \tag{18}$$

在代码中，这一构造通过先计算一维基函数矩阵 x、 y 和 t，再对其进行重塑以支持广播，随后计算逐元素乘积以得到张量积基来实现。这利用了表示的可分离性，使得能够通过单次操作高效地计算一组点处的所有基函数。

张量积结构对于计算偏微分方程残差所需的空间与时间导数同样有益。例如，对于扩散方程，需要 u_t、 u_{xx} 和 u_{yy}。从解析上看，基函数的导数可分离为

$$\partial_t \Phi_{i,j,m}(x,y,t) = \varphi_i(x)\psi_j(y)\chi'_m(t), \tag{19}$$

$$\partial_{xx} \Phi_{i,j,m}(x,y,t) = \varphi''_i(x)\psi_j(y)\chi_m(t), \tag{20}$$

对于 $\partial_{yy}\Phi_{i,\,j,\,m}$，情况也类似。因此，一旦得到导数基 φ''_i、 ψ''_j 和 χ'_m，只需替换张量积基中对应的因子，即可得到 $u_{N_x,\,N_y,\,N_t}$ 的导数。虽然当前实现采用自动微分来数值计算这些导数，但底层的张量结构意味着，即使使用更多模态，计算成本仍然可控，并且能够确保所得导数在整个区域内具有光滑性和正则性。

为计算变分能量，必须对以下形式的积分

$$\int_0^T \int_0^1 \int_0^1 g(x,y,t)\,dx dy dt\,, \tag{21}$$

进行准确近似，以处理各种被积函数 g，包括残差平方以及残差与基函数的乘积。由于基函数以切比雪夫多项式表示，人们或许会考虑使用高斯–切比雪夫求积；然而，变分能量是基于时空中的标准勒贝格测度定义的，而非切比雪夫权函数。因此，实现中采用高斯–勒让德求积对每个区间进行积分，并构造适用于整个时空域的张量积求积规则。在一维情形下，对 $[-1,1]$ 进行高斯–勒让德求积，可得到节点 $\{\zeta_q\}_{q=1}^{Q}$ 和权重 $\{\omega_q\}_{q=1}^{Q}$，使得

$$\int_{-1}^{1} h(\zeta)\,d\zeta \approx \sum_{q=1}^{Q} \omega_q h(\zeta_q)\,, \tag{22}$$

对于足够光滑的函数 h，[46]。通过 $x = (\zeta+1)/2$ 映射到 $[0,1]$，得到

$$\int_0^1 h(x)\,dx = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} h\left(\frac{\zeta+1}{2}\right) d\zeta \approx \sum_{q=1}^{Q} w_q h(x_q)\,, \tag{23}$$

其中求积节点和权重由 b 给出 y

$$x_q = \frac{\zeta_q + 1}{2}, \qquad w_q = \frac{1}{2}\omega_q. \tag{24}$$

对于时间区间 $[0,T]$，相同的高斯–勒让德节点 $\{\zeta_q, \omega_q\}$ $_{=1}^{t}$ 在 $[-1,1]$ $\frac{\rho}{q}$的映射为

$$t_q = \frac{T}{2}(\zeta_q + 1), \qquad w_q^t = \frac{T}{2}\omega_q, \tag{25}$$

从而 $\int$ h($_0^T$ t $dt \approx \sum_{q=1}^{Q_t} w_q^t)$ h(t_q)。

此构造在每个维度上独立进行：为 $x \in [0,1]$、 $y \in [0,1]$ 和 $t \in [0,T]$生成高斯–勒让德节点与权重。随后，在 Q 上的完整三维求积规则通过将一维求积规则张量积组合得到，

$$\int_0^T \int_0^1 \int_0^1 g(x,y,t)\,dx dy dt \approx \sum_{q_x=1}^{Q_x} \sum_{q_y=1}^{Q_y} \sum_{q_t=1}^{Q_t} w_{q_x}^{(x)} w_{q_y}^{(y)} w_{q_t}^{(t)}\, g\left(x_{q_x}, y_{q_y}, t_{q_t}\right). \tag{26}$$

在所有实验中，求积阶数（Q_x、 Q_y、 Q_t）相对于模态次数（N_x、 N_y、 N_t）选取得足够高，以避免变分能量中的平方残差项出现欠积分。实际操作中，三维节点集通过对一维节点进行网格生成来构造，组合权重则存储为一维权重数组的逐元素乘积。该张量积高斯–勒让德求积一致用于强形式能量和弱形式能量，为光滑被积函数提供高阶精度，并保持变分泛函的对称性。

除变分能量中使用的求积节点外，该框架还使用独立的配点节点来监测偏微分方程残差，并训练场空间神经网络，例如物理信息神经网络。对于诊断和物理信息神经网络训练，通常最好使用切比雪夫–高斯节点对区域内部进行采样。这些节点聚集在边界附近，因此能够在可能出现边界层或陡峭梯度的区域提供更高的分辨率 [12]。在一维情况下，(0,1) 中的切比雪夫内部节点为

$$x_j = \frac{1}{2}\left[1 - \cos\left(\frac{\pi(2j-1)}{2M_c}\right)\right], \qquad j = 1, \dots, M_c, \tag{27}$$

这些节点对应于 $[-1,1]$ 上的高斯–切比雪夫节点在仿射映射 $x = (\xi + 1)/2$ 下的像。通过张量积，可以利用这些节点在 (x, y, t) 中构造三维配置网格；在这些点上计算得到的偏微分方程残差，则可独立衡量谱近似在区域内部满足偏微分方程的程度。将用于能量评估的求积节点与用于诊断残差的配点节点分离，带来了灵活性：求积公式可以主要根据积分精度进行选择，而配置网格则可以针对特定的重点区域进行调整。

基于切比雪夫的一维基、满足狄利克雷条件的空间模态、时空张量积表示以及高斯–勒让德求积的结合，为 VSL 提供了一个连贯且在分析上透明的基础。切比雪夫结构确保能够使用数量相对适中的全局模态，以高精度表示光滑解；同时，满足边界条件的构造保证基本空间边界条件得到恒等满足。张量积构造为将表示扩展到多个空间维度和时间提供了简单高效的机制，在保持可分离性的同时实现紧凑的实现。最后，采用与基函数的正交权函数相解耦的高阶求积公式，使得变分能量能够在物理上自然的范数中定义，并在实践中得到准确评估。总体而言，这些要素构成了所提出框架的谱基石，并支撑其将偏微分方程求解重新表述为系数空间中的适定优化问题。

4. 系数空间中的学习：核心 VSL 表述

系数空间中的学习是所提出的 VSL框架将偏微分方程求解转化为可利用现代机器学习工具进行优化的核心机制。在选定时空中的谱基后，未知解场不再被视为需要逐节点离散化的函数；相反，它由一个有限维谱系数向量参数化。随后，偏微分方程、其变分能量以及任何辅助约束（例如初始条件）都表示为关于这些系数的可微泛函。这种重新表述使我们能够利用自动微分和基于梯度的优化器，直接在系数空间中计算变分能量的近似极小化解。本节将对这一参数化进行形式化，推导关于系数向量的强形式和弱形式能量，纳入初始条件项和正则化项，并讨论由此得到的、定义 VSL 的基于梯度的优化问题。

起点是解的有限维谱表示。设 $Q = \Omega \times (0, T)$ 表示时空柱体，其中 $\Omega \subset \mathrm{R}^2$ 是有界空间域，$T > 0$ 是终止时刻。如上一节所述，我们固定一族时空基函数 $\{\Phi_n\}_{n=1}^{N}$，通常采用张量积形式 $\Phi_{i,\ j,\ m}(x, y, t) = \varphi_i(x)\psi_j(y)\chi_m(t)$，用于二维空间情形；其中 $\varphi_i(x)$ 和 $\psi_j(y)$ 是满足狄利克雷条件的切比雪夫空间函数，而 $\chi_m(t)$ 是时间方向上的标准切比雪夫模态。我们使用双射 $n \leftrightarrow (i, j, m)$，使得 $N = N_x N_y N_t$。近似解写作

$$u_N(x, t) = \sum_{n=1}^{N} c_n \Phi_n(x, t), \tag{28}$$

其中，为简化记号，x 汇集空间坐标，$(x, t) \in Q$。未知量为系数 $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_N)^T \in \mathrm{R}^N$，它们构成变分谱模型的参数向量。映射

$$\mathbf{c} \mapsto u_N(\cdot, \cdot; \mathbf{c}), \tag{29}$$

关于 $\mathbf{c}$ 是线性的，但派生量（例如偏微分方程中的空间导数、时间导数和非线性项）对 $\mathbf{c}$ 的依赖可能是非线性的，因为这些量作用于 u_N 本身。在实现中，会在预先指定的一组空间—时间点 $\{z_q\}_{q=1}^{M} \subset Q$（用于求值、诊断或配点）上对 u_N 求值，其中 $z_q = (x_q, t_q)$。定义基函数求值矩阵 $\mathbf{\Phi} \in \mathrm{R}^{M \times N}$ ：$\Phi_{q,n} = \Phi_n(z_q)$，近似解的取值向量为 $\mathbf{u} = \mathbf{\Phi c} \in \mathrm{R}^M$。当这些点专门选作求积节点以近似在 Q 上的积分时，我们用 M_Q 表示其数量，并使用相应的矩阵 $\mathbf{\Phi}_Q \in \mathrm{R}^{M_Q \times N}$，以强调该离散化基于求积。这种表示与自动微分框架完全兼容；自动微分框架通过计算图追踪 $\mathbf{u}$ 及其导数对 $\mathbf{c}$ 的依赖关系。

为定义变分能量，我们首先用谱近似对偏微分方程的强形式残差进行形式化表述。考虑一个抽象写作如下形式的（可能是非线性的）偏微分方程：

$$\mathcal{F}(u) = 0 \text{ in } Q, \tag{30}$$

并辅以适当的边界条件和初始条件。对于许多值得关注的演化问题，F 具有如下结构：$\mathrm{F}(u) = u_t - \mathrm{L}(u) - f$，其中 L 是空间微分算子（例如扩散或对流–扩散），而 f 是一个强迫项 [30], [55], [58]。与谱近似相关的强形式残差为

$$r(x,t;\mathbf{c}) \;=\; \mathcal{F}(u_N(\cdot,\cdot;\mathbf{c}))(x,t). \tag{31}$$

例如，对于扩散方程，有

$$r(x,t;\mathbf{c}) = u_{N,t}(x,t;\mathbf{c}) \;-\; \nu\Delta u_N(x,t;\mathbf{c}) - f(x,t), \tag{32}$$

其中，$u_{N,\,t}$ 和 Δu_N 通过对谱展开求导获得。实际上，通过使用自动微分计算u_N 及其导数的值，可以在一组求积节点$\{z_q = (x_q, t_q)\}_{q=1}^{M_Q}$ 上计算 $r(x,t;\,\mathbf{c})$。

系数空间中的强形式最小二乘能量定义为：在时空域 [44]上，使用 L^2型范数度量残差。具体而言，引入

$$E_{\text{strong}}(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\int_0^T \int_\Omega [r(x,t;\mathbf{c})]^2\, dxdt, \tag{33}$$

其中，因子 1/2 是约定俗成的，不会影响极小化解。对于光滑解，E_{strong} 是 $\mathbf{c}$ 的可微泛函，因为谱表示和残差都关于系数可微。

在离散情形下，Q 上的所有积分均使用张量积高斯–勒让德求积公式进行近似。令 $\{z_q\}_{q=1}^{M_Q}$ 表示Q 上的求积节点，$\{w_q\}_{q=1}^{M_Q}$ 表示相应的正权重。定义对角权重矩阵 $\mathbf{W}$ =diag$(w_1, \dots, w_{M_Q}) \in \mathrm{R}^{M_Q\times M_Q}$，其元素为 $W_{q,\,q} = w_q$。将基函数求值汇集为特征矩阵 $\mathbf{\Phi}_Q \in \mathrm{R}^{M_Q\times N}$，其元素为 $(\mathbf{\Phi}_Q)_{q,\,n} = \Phi_n(z_q)$；将残差求值汇集为向量 $\mathbf{r}^Q(\mathbf{c}) \in \mathrm{R}^{M_Q}$，其分量为 $r_q^Q(\mathbf{c}) = r(x_q, t_q;\,\mathbf{c})$。离散强形式能量为

$$E_{\text{strong}}^Q(\mathbf{c}) \approx \frac{1}{2}\sum_{q=1}^{M_Q} w_q\left[r_q^Q(\mathbf{c})\right]^2, \tag{34.1}$$

其中，$M_Q = Q_xQ_yQ_t$ 是求积点的总数。若方便，也可以将因子 1/2 吸收进去，但此处保留它以简化梯度表达式。于是，离散强形式能量可简洁地表示为

$$E_{\text{strong}}^Q(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}[\mathbf{r}^Q(\mathbf{c})]^T\mathbf{W}\mathbf{r}^Q(\mathbf{c}). \tag{34.2}$$

E_{strong}^Q 关于系数 c_n 的梯度形式上表示为

$$\frac{\partial}{\partial c_n}E_{\text{strong}}^Q(\mathbf{c}) = \sum_{q=1}^{M_Q} w_q r(z_q;\mathbf{c})\frac{\partial}{\partial c_n}r(z_q;\mathbf{c}), \tag{35}$$

由于 r 及其对 $\mathbf{c}$ 的依赖关系都表示在计算图中，因此可以通过自动微分精确计算。对于线性偏微分方程，F 关于 u 是线性的，因此 $r(x,t;\mathbf{c})$ 关于 $\mathbf{c}$成为仿射函数；在这种情况下，E_{strong}是二次泛函，其极小化解原则上可通过求解线性方程组获得。然而，采用基于梯度的优化，可以在不改变底层代码结构的情况下，将同一表述统一应用于非线性偏微分方程、混合边界条件以及更复杂的损失组合。

与强形式能量不同，系数空间中的弱（伽辽金）能量基于在积分意义下将残差投影到谱基函数上 [27–30]。对于每个模态索引 n，定义伽辽金残差

$$R_n(\mathbf{c}) = \int_0^T \int_\Omega r(x,t;\mathbf{c})\Phi_n(x,t)\, dxdt. \tag{36}$$

这里的“弱”指的是将（强形式或通过变分构造的）残差投影到试探空间 [11–15], [27–30] 上所得到的伽辽金矩方法。通过分部积分推导变分形式时，所得的 $R_n(\mathbf{c})$ 表达式涉及低阶导数（例如 ∇u_N，而非 Δu_N），从而改善条件性；当前的系数空间目标函数通过定义 r 及相应的求积计算，兼容这两种选择。量 R_n 衡量强残差未能与由 $\{\Phi_n\}$ 张成的有限维试探空间正交的程度。若对于所有 n，$R_n(\mathbf{c}) = 0$，则 $r(\cdot,\cdot;\,\mathbf{c})$ 与试探空间正交；对于线性问题，这一条件与系数的经典伽辽金方程组一致。弱形式变分能量取伽辽金残差向量的平方 L^2 范数，

$$E_{\text{weak}}(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}[R_n(\mathbf{c})]^2 = \frac{1}{2}\|\mathbf{R}(\mathbf{c})\|_2^2, \tag{37}$$

其中 $\mathbf{R}(\mathbf{c}) = (R_1(\mathbf{c}), \dots\, R_N(\mathbf{c}))^T \in \mathrm{R}^N$。与强形式中一样，定义 R_n 的积分采用相同的高斯–勒让德求积规则进行近似。令 $\Phi_n(z_q)$表示在第 q个求积点处取值的第 n个基函数，可得

$$R_n^Q(\mathbf{c}) \approx \sum_{q=1}^{M_Q} w_q\Phi_n(z_q)r(z_q;\mathbf{c}). \tag{38}$$

因此，离散伽辽金残差可以简洁地写为

$$\mathbf{R}^Q(\mathbf{c}) = \mathbf{\Phi}_Q^T\mathbf{W}\mathbf{r}^Q(\mathbf{c}). \tag{39}$$

于是，弱形式能量变为

$$E_{\text{weak}}^{Q}(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\left\|\mathbf{\Phi}_{Q}^{T}\mathbf{W}\mathbf{r}^{Q}(\mathbf{c})\right\|_{2}^{2}. \tag{40}$$

其关于 $\mathbf{c}$ 的梯度可以用 $\mathbf{r}^{Q}(\mathbf{c})$ 的雅可比矩阵表示，但在实际应用中，通过对上述表达式进行自动微分来获得。对于线性偏微分方程，令 $\nabla E_{\text{weak}}^{Q}(\mathbf{c}) = 0$ 等价于对所有 n 强制要求 $R_n^{Q}(\mathbf{c}) = 0$，从而得到标准的谱伽辽金系统；对于非线性问题，弱形式能量提供了一种自然的非线性最小二乘表述，既保留了伽辽金方法的结构，又兼容基于梯度的优化。

在系数空间中，强形式能量与弱形式能量的选择会对数值行为产生重要影响。强形式能量会对所有求积节点上的逐点残差施加相同惩罚，这有助于控制偏微分方程在特定位置的行为，但存在高阶导数或解呈现陡峭梯度时，可能导致条件性不佳。相比之下，弱形式能量通过与平滑基函数积分来抑制残差，这可以改善条件性，并更贴近变分形式的理论特性。在所提出的框架中，两种表述均通过统一的应用程序接口得到支持：用户指定 $E(\mathbf{c})$ 应解释为 E_{strong}^{Q} 还是 E_{weak}^{Q}，随后优化过程会在系数空间中以相同方式进行。

对于时变问题，偏微分方程及其变分形式不会自动强制满足初始条件；必须将其作为额外项明确纳入目标函数。令 $u_0(x)$ 表示在 $t = 0$ 时给定的初始数据。谱近似的初始条件偏差为

$$\text{pp}$$

$$\delta_{\text{IC}}(x;\mathbf{c}) \;=\; u_N(x,0;\mathbf{c}) - u_0(x). \tag{41}$$

据此，将初始条件损失定义为一种 L^2 型范数：

$$L_{\text{IC}}(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\int_{\Omega} |\delta_{\text{IC}}(x;\mathbf{c})|^2\, dx. \tag{42}$$

在实际应用中，该积分通过在 Ω 上采用一维或二维求积规则进行近似，或者在空间中的一组切比雪夫内部节点处求值。离散形式为：

$$L_{\text{IC}}^{Q}(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\sum_{p=1}^{M_{\text{IC}}} \omega_p^{\text{IC}}\left[u_N(x_p,0;\mathbf{c}) - u_0(x_p)\right]^2, \tag{43}$$

其中，x_p 是专门用于初始时刻的节点，ω_p^{IC} 是相应的权重。为方便起见，此处同样包含因子 $1/2$。该损失会惩罚谱近似与初始数据之间的偏差，并在总目标函数中乘以一个正权重 λ_{IC}，以平衡其相对于偏微分方程能量的影响。

为控制系数向量的大小和光滑性，并减轻对特定求积点和配置点集合的过拟合，可在目标函数中加入正则化项。一种简单而有效的选择是对系数施加 l^2 惩罚：

$$R_{\text{reg}}(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{c}\|_2^2 = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N} c_n^2, \tag{44}$$

这对应于系数空间中的蒂霍诺夫正则化 [65]。当所选基函数相对于适当的内积是正交的（或近似正交）时，这种惩罚会抑制大振幅的高频模态，并使解倾向于更平滑的表示。正则化项由参数 $\lambda_{\text{reg}} > 0$ 缩放，从而得到组合目标函数

$$J(\mathbf{c}) = E(\mathbf{c}) + \lambda_{\text{IC}} L_{\text{IC}}(\mathbf{c}) + \lambda_{\text{reg}} R_{\text{reg}}(\mathbf{c}), \tag{45}$$

其中，$E(\mathbf{c})$ 根据所选的 VSL 形式，取 $E_{\text{strong}}(\mathbf{c})$ 或 $E_{\text{weak}}(\mathbf{c})$。离散形式下，优化所用的目标函数为

$$J^{Q}(\mathbf{c}) = E^{Q}(\mathbf{c}) + \lambda_{\text{IC}} L_{\text{IC}}^{Q}(\mathbf{c}) + \lambda_{\text{reg}} R_{\text{reg}}(\mathbf{c}), \tag{46}$$

该目标函数完全由对求积节点和诊断节点的求和，以及 $\mathbf{c}$ 的代数函数构成。还可以计算额外的诊断项（例如在另一组配置点上评估偏微分方程残差），以监测解的质量，但这些项无需直接纳入训练损失。

定义目标函数 $J^{Q}(\mathbf{c})$ 后，系数空间中的学习便可归结为一个优化问题

$$\min_{\mathbf{c}\in\mathbb{R}^N} J^{Q}(\mathbf{c}). \tag{47}$$

谱参数化的关键优势在于，优化是在低维欧几里得空间中进行的，其中 $N = N_x N_y N_t$ 谱自由度通常远少于等效节点离散化所需的网格点数量。此外，从 $\mathbf{c}$ 到目标函数的映射完全可微，并在深度学习框架中实现，因此能够使用专为高维非凸问题设计的稳健基于梯度的优化器。在所提出的实现中，系数向量 $\mathbf{c}$ 被声明为可训练张量，而梯度

$\nabla J^Q(\mathbf{c})$ 通过自动微分获得，该方法在内部会依次传播经过基函数求值、导数计算、残差构造和求积累加的敏感度。

基于梯度的优化是迭代进行的。从初始猜测 $\mathbf{c}^{(0)}$ 出发，按照 [60-64], 生成序列 $\{\mathbf{c}^{(k)}\}$

$$\mathbf{c}^{(k+1)} = \mathbf{c}^{(k)} - \alpha_k \mathcal{P}_k \left(\nabla J^Q\left(\mathbf{c}^{(k)}\right)\right), \tag{48}$$

其中，$\alpha_k > 0$ 是步长，$\mathcal{P}_k$ 是与所选优化器相关的预条件算子或缩放算子。对于简单的梯度下降，$\mathcal{P}_k$ 是恒等算子，α_k 是学习率；对于 Adam 等自适应方法，$\mathcal{P}_k$ 根据一阶与二阶矩的估计值对梯度的各个分量进行重新缩放。在VSL框架中，采用具有衰减或重启学习率调度的 Adam 优化器，从而增强对目标函数中各向异性曲率的鲁棒性，并实现快速的初期进展，随后进行微调。具体而言，采用带重启的余弦衰减调度方案，使学习率在逐渐收缩的范围内振荡。这有助于在早期更充分地探索目标函数景观，同时随着有效步长减小，支持稳定的微调。

从实践角度来看，梯度计算的主要开销在于对所有求积点处的残差及其导数进行求值，以及计算弱形式能量所需的矩阵-向量乘法。由于基函数具有全局性且光滑，在积分中只需相对较少的求积点即可达到较高精度，从而使计算成本保持在可控范围内。此外，基函数和求积公式的张量积结构使许多运算能够向量化，并在现代硬件加速器上高效执行。因此，优化循环与标准神经网络训练流程相似：每个训练轮次中，均在一组固定的配点和求积节点上计算目标函数及其梯度，优化器更新系数，并记录能量值、偏微分方程残差和初始条件误差等诊断指标。

由此得到的学习系数向量 $\mathbf{c}^\star$ 定义了一个谱近似 $u_N(\cdot,\cdot;\,\mathbf{c}^\star)$，该近似在满足初始条件和正则化项的前提下，使所选变分能量近似达到最小。与基于神经网络的场空间模型不同，后者的参数是深层架构的权重，解则由非线性映射的前向传播产生；VSL 表述使解的表示极为紧凑且易于解释：$\mathbf{c}^\star$的每个分量都乘以一个已知的基函数，该基函数具有清晰的空间和时间结构。这一特性有助于后处理、误差分析以及与经典谱求解器进行比较，也凸显了 VSL 的核心思想：通过直接在谱系数空间中学习，将现代机器学习的表达能力和优化机制，与谱 Galerkin 方法的解析清晰性和收敛保证结合起来。

5. 架构与学习率调度

所提出的 VSL 框架依托于参数空间中刻意设计的简洁“架构”，并结合一种充分利用现代优化实践的复杂学习率调度。与通过深层非线性网络对解场进行参数化的神经代理模型不同，VSL 采用简单的线性参数化，以精心选取的谱基的系数作为参数。因此，模型的复杂性体现在基函数和变分能量中，而非参数化本身。这种架构选择带来了紧凑且易于解释的表示，只要适当控制学习率，就能通过基于梯度的方法高效优化。本节将系数空间架构形式化为线性映射，详细介绍训练中使用的余弦衰减重启学习率，并讨论关键的实现要点，包括与 TensorFlow 自动微分的集成、导数计算的处理，以及优化超参数的实际配置。

从架构角度来看，VSL 采用的可以视为系数空间中的单层纯线性网络。基于第 4 节中的系数空间表述，离散的系数到场映射可简洁地写为 $\mathbf{u}(\mathbf{c}) = \mathbf{\Phi c}$，其中 $\mathbf{\Phi}$ 是固定的基函数求值矩阵（由选定基和节点集确定），而 $\mathbf{c}$ 是可训练系数向量，见图 2。用标准神经网络记法表示，这就是一个全连接线性层，$\mathbf{u} = \mathbf{W c} + \mathbf{b}$，其中 $\mathbf{W} = \mathbf{\Phi}$ 和 $\mathbf{b} = \mathbf{0}$（或使用时的固定提升偏置），即没有激活函数 [66, 67]，也没有隐藏层深度 [63, 64]。

因此，表达能力并非来自深度、宽度或非线性激活函数，而是来自全局谱试验空间的丰富性，以及训练中采用的物理信息目标函数；该目标函数可以包含强形式残差范数、弱形式／伽辽金投影、初始条件与边界条件惩罚项以及正则化。由于空间与时间导数作用于固定的基函数，并且对系数仍保持线性，即使控制偏微分方程涉及梯度或拉普拉斯算子，导数计算也同样具有线性。这正是 VSL 模型紧凑且易于解释的原因：$\mathbf{c}$ 中的每个分量都直接缩放一个已知的时空模态，而训练的过程就是在偏微分方程驱动的目标函数下，寻找这些模态的最佳线性组合。

学习问题仍然并非易事，这并非因为网络架构复杂，而是因为损失景观受偏微分方程算子和所选表述的影响；对于非线性偏微分方程，将线性展开与非线性物理项组合后，会得到关于系数的非线性（通常也非凸）残差。这一视角阐明了它与

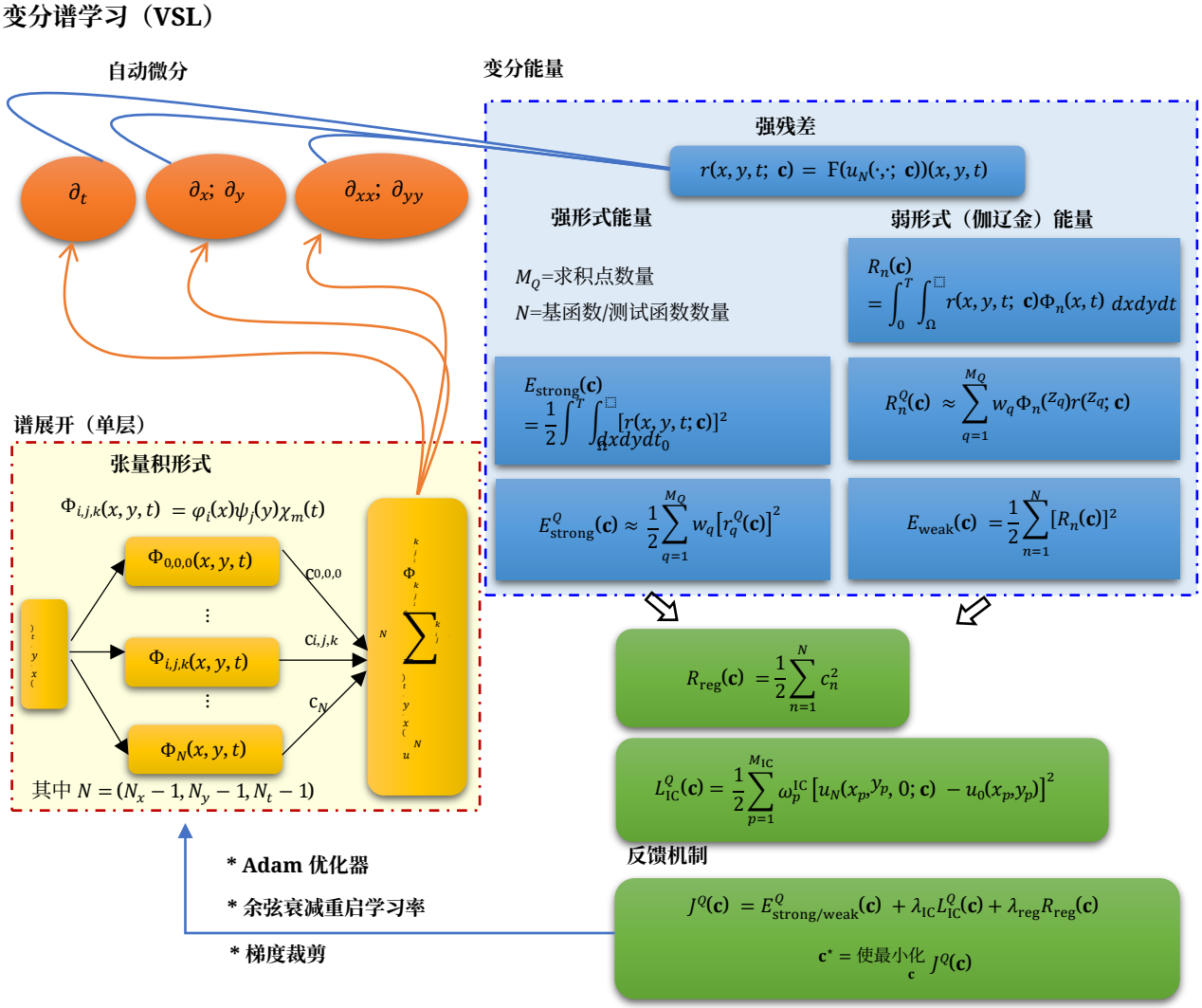


图 2。 VSL 架构详解（系数空间变分求解器）。VSL流程在系数空间中的流程图。张量积、满足狄利克雷条件的切比雪夫基定义了固定特征映射 $\mathbf{\Phi}_Q$ 和线性解试探形式 $u_N(z) = \mathbf{\Phi}_Q(z)\mathbf{c}$。在高斯–勒让德求积节点 z_q （权重为 w_q）处，自动微分计算所需导数，以构造强残差 $r(z_q;\ \mathbf{c}) = F(u_N)(z_q)$ 或弱形式（伽辽金）矩 $R^Q(\mathbf{c}) = \mathbf{\Phi}_Q^T \mathbf{W} r^Q(\mathbf{c})$。这些要素共同构成离散训练目标函数 $J^Q(\mathbf{c}) = E^Q(\mathbf{c}) + \lambda_{\text{IC}} L_{\text{IC}}^Q(\mathbf{c}) + \lambda_{\text{reg}} R_{\text{reg}}(\mathbf{c})$（强形式或弱形式能量，以及初始条件和系数正则化项）。随后，通过基于梯度的更新对谱系数 $\mathbf{c}$ 进行优化（例如使用带重启的余弦衰减和可选梯度裁剪的 Adam），从而得到训练后的系数向量 $\mathbf{c}^\star$ 以及在整个时空区域上的相应谱近似 $u_N(\cdot;\mathbf{c}^\star)$。

物理信息神经网络的区别：深度代理模型的归纳偏置和表达能力很大程度上源于网络架构，而 VSL 则通过可解释的谱试探空间以及变分/基于物理的目标函数，明确地编码归纳偏置。因此，VSL 提供了一种紧凑、透明的参数化，其中每个系数都缩放一个已知模态，便于进行诊断并与经典谱方法直接比较；同时，它还能使用标准的基于梯度的优化器和现代学习率调度，在低维欧几里得系数空间中实现高效优化。

对于足够光滑的解，众所周知，谱展开能够快速收敛，其收敛速度通常相对于基函数规模呈指数级。在本框架中，这意味着只需相对较少的系数 c_n，便能近似解 u，尤其是在基函数适配边界条件（例如使用满足狄利克雷条件的空间模态）和时间行为时。此外，对于具有线性强迫项的线性偏微分方程，系数空间中的目标函数是二次函数，原则上可以通过求解线性方程组得到极小化解。然而，通过保留通用的基于梯度的优化循环，同一架构无需修改也能处理非线性偏微分方程和混合形式。从架构上看，VSL 模型因此类似于广义线性模型，它采用精心构造的物理信息特征空间，并通过变分损失对偏微分方程、边界条件和初始条件进行编码。

系数架构中没有隐藏层和非线性激活函数，也带来了理想的稳定性性质。例如，映射 $\mathbf{c} \mapsto u_N$ 连续且可微，其关于 $\mathbf{c}$ 的雅可比矩阵就是

特征矩阵 $\mathbf{\Phi}$。当偏微分方程算子为线性时，残差是 $\mathbf{c}$的仿射函数，强形式能量或弱形式能量的梯度也会成为 $\mathbf{c}$ 的仿射变换。因此，对于线性偏微分方程算子和二次损失组合（包括二次正则化），系数空间目标函数是关于 $\mathbf{c}$的凸二次函数；经典结果保证，在适当的步长限制下，梯度下降会收敛到唯一的全局最小值点。在实践中，我们采用 Adam，以增强稳健性并便于调参；对于目标函数通常非凸的非线性偏微分方程，仍保留相同的系数空间表述。即使偏微分方程中存在非线性，基函数的结构通常也会带来比深度神经网络架构更平滑的损失景观，从而降低出现病态优化行为的风险。因此，主要挑战不在于模型容量，而在于通过恰当的学习率调度和停止准则，高效地遍历系数空间。

鉴于这种架构简单性，学习率调度对于实际优化性能至关重要。在 VSL 实现中，谱系数模型和物理信息神经网络基线均采用 Adam，并结合带重启的余弦衰减调度进行训练。令 $\eta_0 > 0$ 表示初始（峰值）学习率，令 $\alpha \in [0,1)$ 表示每个周期内的最小学习率比例，并令 $k \in \mathbb{N}_0$ 表示全局步数索引。该调度分为多个周期，索引为 $j = 0,1,2,\ldots$，每个周期的步数长度按几何级数递增

$$T_j = T_0\,(t_{\mathrm{mul}})^j, \tag{49}$$

其中，$T_0 > 0$ 为第一个周期的长度，$t_{\mathrm{mul}} > 0$ 为用户定义的乘数 [49]。令周期 j 开始时的累计步数为

$$S_j = \sum_{i=0}^{j-1} T_i\,, \qquad S_0 = 0, \tag{50}$$

并将当前周期内的归一化局部步数定义为

$$\tau = \frac{k - S_j}{T_j} \in [0,1), \qquad \text{for the unique } j \text{ such that } S_j \le k < S_{j+1}. \tag{51}$$

可选地，可使用乘数 $m_{\mathrm{mul}} > 0$跨周期缩放峰值学习率，从而定义周期峰值

$$\eta_j = \eta_0 (m_{\mathrm{mul}})^j. \tag{52}$$

步数 k 处带重启的余弦衰减学习率为

$$\eta(k) = \eta_j \left[\alpha + \frac{1}{2}(1-\alpha)(1+\cos(\pi\tau))\right], \tag{53}$$

使得 $\eta(k)$ 在每个周期内从 η_j 平滑下降至 $\alpha\eta_j$，并在下一个周期开始时重启至 η_{j+1}。在此处报告的实验中，通常通过选择 $m_{\mathrm{mul}} = 1$ 来保持峰值学习率不变。

采用这一调度策略有两个原因。首先，在每个周期的初始阶段，τ 较小且 $\eta(k)$ 接近其峰值，因此可以进行相对较大的更新，从而改善早期探索，并减少目标函数平坦或曲率较弱区域中的停滞。其次，随着周期推进且 $\tau \to 1$，学习率逐渐衰减至 $\eta_{\min}$，使优化器实际上转变为一种微调机制，能够围绕局部吸引盆进行细微而精确的调整。随后，重启机制会在下一个周期开始时再次提高学习率，使优化过程能够探索新的吸引盆，以防前一个吸引盆并非最优。在偏微分方程的系数学习中，当变分能量因非线性、非凸正则化或复杂的边界条件而包含多个局部极小值时，这种探索与利用之间的相互作用尤其有用。

从数值计算的角度来看，带重启的余弦衰减也提供了一种合理的方法，可在较长训练时域内降低学习率，同时不必采用纯粹的单调调度。如果选择周期长度 T_j，使其通过 $t_{\mathrm{mul}} > 1$ 随 j 几何增长，那么早期周期较短，有利于快速探索；后期周期则较长，强调在更长时间间隔内进行微调。在 VSL 实现中，典型选择包括：T_0 设为几百次迭代左右，$t_{\mathrm{mul}} \approx$ 设为 2，以及选择 α 使得 $\eta_{\min} \approx 10^{-2}\eta_0$。这种配置会产生一个初始阶段，其学习率相对较大；随后进入步长非常小的末期阶段。当最小化由弱形式能量和高阶导数产生的平滑但可能病态的目标函数时，这种配置颇具优势。

将此调度策略整合到 VSL 训练循环中非常简单。系数向量 $\mathbf{c}$ 表示为 TensorFlow 变量，并使用余弦衰减重启调度策略作为学习率参数来构造 Adam 优化器。在每个优化步骤中，通过在优化器的内部步数计数器处对调度策略求值，自动获取当前学习率 $\eta(k)$。随后，训练循环依次计算损失 $J^{Q}(\mathbf{c})$，通过自动微分计算其相对于 $\mathbf{c}$ 的梯度，可选地应用梯度裁剪以限制梯度的 l^2-范数，最后使用当前学习率，根据 Adam 更新规则更新 $\mathbf{c}$。出于诊断用途，会同步记录学习率历史 $\{\eta(k)\}$ 和损失值，以便后验分析该调度策略如何影响收敛行为。

基于梯度的系数空间优化可通过梯度裁剪进一步稳定 [68]。计算出 $\nabla J^{Q}(\mathbf{c})$ 相对于 $\mathbf{c}$的梯度后，将梯度向量裁剪至其 l^2-范数不超过预设阈值（通常为 1 左右）。形式上，若 $g = \nabla J^{Q}(\mathbf{c})$ 且 $\|g\|_2 > G_{\max}$，裁剪后的梯度为

$$\tilde{g} = \frac{G_{\max}}{\|g\|_2} g, \tag{54}$$

否则 $\tilde{g} = g$。此操作可防止梯度中的瞬态尖峰导致参数更新过大，尤其是在涉及高阶导数时。随后，将裁剪后的梯度连同当前学习率 $\eta(k)$ 一并传递给 Adam 优化器。在 TensorFlow 中，此操作通过对系数向量 $\mathbf{c}$ 的梯度应用 tf.clip_by_norm 来实现，并在 Adam 更新之前执行。在系数空间设置中，参数数量适中且损失曲面相对平滑，因此在训练后期很少触发梯度裁剪；不过，在解距离变分最优解较远的训练初期，它仍可能发挥作用。

6. 基准测试 I – 椭圆型泊松问题（1D 和 2D）

基准测试 I 聚焦于一维和二维椭圆型泊松问题，作为评估 VSL 在稳态偏微分方程上的表现的主要测试平台；这类方程的解析性质和数值性质都已得到充分理解。选择泊松方程，是因为它具有典型的变分形式，在位势理论和扩散领域具有核心地位，并为比较强形式与弱形式能量、谱近似以及不同的学习与求解器范式提供了简洁的场景。在最简单的形式下，一维基准测试考虑单位区间 $\Omega = (0,1)$ 上的算子 $-d^2/dx^2$ ，并施加齐次狄利克雷边界条件 [2]。标准的制造解设为 $u^\star(x) = \sin(\pi x)/\pi^2$，根据关系 $-u^{\star\prime\prime}(x) = f(x)$，对应的右端项为 $f(x) = \sin(\pi x)$。这种选择使边界条件 $u^\star(0) = u^\star(1) = 0$ 自动得到满足，且精确解在 $[0,1]$，上光滑，因此非常适合进行谱近似。二维扩展定义在单位正方形 $\Omega = (0,1)^2$ 上，算子为 $-\Delta u = -(\partial_{xx}u + \partial_{yy}u)$，并在四条边上施加齐次狄利克雷条件。一个自然的可分离制造解为$u^\star(x,y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$，由此得到 $f(x,y) = 2\pi^2 \sin(\pi x)\sin(\pi y)$，且同样满足 $u^\star = 0$ 于 $\partial\Omega$。这两个一维和二维问题构成一个基准测试族，其中区域和系数都很简单，精确解和强迫项均有解析表达式，并且满足谱收敛所需的正则性假设。

在本基准测试中，泊松方程的变分结构为定义 VSL 中使用的强形式能量和弱形式能量提供了直接途径。在一维问题的弱形式中，需要求 $u \in H^1(0,1)$，使其满足

$$\int_0^1 u'(x)v'(x)dx = \int_0^1 f(x)v(x)dx\,, \qquad \text{for all } v \in H_0^1(0,1), \tag{55}$$

这等价于对能量泛函的极小化

$$J(u) = \frac{1}{2}\int_0^1 |u'(x)|^2 dx - \int_0^1 f(x)u(x)dx\,. \tag{56}$$

与 J 相关的欧拉–拉格朗日方程恢复了弱形式，并且在标准条件下，极小化解与 $H_0^1(0,1)$ 中的唯一解一致。在二维中也存在类似结构，其弱形式为

$$\int_\Omega \nabla u(x,y)\cdot\nabla v(x,y)dxdy = \int_\Omega f(x,y)v(x,y)dxdy\,, \qquad \text{for all } v \in H_0^1(\Omega), \tag{57}$$

其能量为

$$J(u) = \frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla u|^2 dxdy - \int_\Omega f\,u\,dxdy\,. \tag{58}$$

除这些经典能量泛函外，还可以定义强形式最小二乘能量，通过在 L^2 范数中惩罚微分算子的残差。对于一维泊松方程，该残差为 $\mathrm{R}(u)(x) = -u''(x) - f(x)$，强形式能量为

$$E_{\text{strong}}(u) = \frac{1}{2}\int_\Omega (-u''(x) - f(x))^2 dx\,. \tag{59}$$

在二维中，相应的残差为 $\mathrm{R}(u)(x,y) = -\Delta u(x,y) - f(x,y)$，强形式能量为

$$E_{\text{strong}}(u) = \frac{1}{2}\int_\Omega (-\Delta u(x,y) - f(x,y))^2 dxdy\,. \tag{60}$$

在 VSL 中，未知解并非由场空间神经网络表示，而是通过满足边界条件的基上的谱展开来表示。对于一维问题，逼近空间由函数 $\{\phi_k\}_{k=0}^{N_x-1} \subset H_0^1(0,1)$ 张成，这些函数由映射到该区间上的切比雪夫多项式构造而成。这种构造确保 $\phi_k(0) = \phi_k(1) = 0$ 对所有 k均成立，从而将狄利克雷边界条件嵌入逼近空间。近似解写作$u_N(x;\mathbf{c}) = \sum_{k=0}^{N_x-1} c_k\phi_k(x)$，其中 $\mathbf{c} = (c_0, \dots, c_{N_x-1})^T$ 是谱系数向量。在二维中，

逼近空间是各坐标方向上一维基函数的张量积张成空间。若 $\{\phi_i^{(x)}\}_{i=0}^{N_x-1}$ 和 $\{\phi_j^{(y)}\}_{j=0}^{N_y-1}$ 分别是在 x方向和 y方向上满足边界条件的基，则二维基函数为 $\Phi_{ij}(x,y) = \phi_i^{(x)}(x)\phi_j^{(y)}(y)$，近似解则写作 $u_N(x,y;\mathbf{c}) = \sum_{i=0}^{N_x-1}\sum_{j=0}^{N_y-1} c_{ij}\Phi_{ij}(x,y)$。系数向量 $\mathbf{c}$ 在一维中的维数为 N_x ，在二维中的维数为 N_xN_y；从系数到函数值的映射是线性的，且其解析形式已知。

上述变分能量通过将 u 替换为 $u_N(\cdot;\mathbf{c})$ 转换到系数空间，并使用高阶数值求积近似相关积分。对于一维强形式能量（全局残差），定义

$$E_{\text{strong}}(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\int_0^1 \left(-u_N''(x;\mathbf{c}) - f(x)\right)^2 dx \approx \frac{1}{2}\sum_{q=1}^{Q_x} w_q \left(-u_N''(x_q;\mathbf{c}) - f(x_q)\right)^2, \tag{61}$$

其中 $\{x_q, w_q\}_{q=1}^{Q_x}$ 是 $[0,1]$, 上的高斯–勒让德节点与权重，而 $u_N''(x_q;\mathbf{c})$通过自动微分获得。二维强形式能量使用 $[0,1]^2$, 上的张量积数值求积 $\{x_{q_x}, w_{q_x}\}$、$\{y_{q_y}, w_{q_y}\}$，得到

$$E_{\text{strong}}(\mathbf{c}) \approx \frac{1}{2}\sum_{q_x=1}^{Q_x}\sum_{q_y=1}^{Q_y} w_{q_x}w_{q_y}\left(-\Delta u_N\left(x_{q_x}, y_{q_y};\mathbf{c}\right) - f\left(x_{q_x}, y_{q_y}\right)\right)^2. \tag{62}$$

在弱形式（伽辽金）变体中，针对每个基函数构造离散残差。在一维中，测试函数 ϕ_n 对应的连续伽辽金残差（经典能量泛函）为

$$R_n(\mathbf{c}) = \int_0^1 \left(u_N'(x;\mathbf{c})\phi_n'(x) - f(x)\phi_n(x)\right)dx, \tag{63}$$

该式通过求积进行数值近似。将这些残差汇集为向量 $\mathbf{R}(\mathbf{c}) \in \mathrm{R}^{N_x}$后，弱形式能量为

$$E_{\text{weak}}(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{N_x-1}\left(R_n(\mathbf{c})\right)^2 = \frac{1}{2}\|\mathbf{R}(\mathbf{c})\|_2^2. \tag{64}$$

一种类似的二维构造使用张量积测试函数 Φ_{ij} 和标准弱形式残 l

$$R_{ij}(\mathbf{c}) = \int_{\Omega}\left[\nabla u_N(x,y;\mathbf{c})\cdot\nabla\Phi_{ij}(x,y) - f(x,y)\Phi_{ij}(x,y)\right]dxdy. \tag{65}$$

从而得到 $E_{\text{weak}}(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\sum(_{ij}\ R_{ij}\ \mathbf{c}\ (\ ))$。这相当于对伽辽金弱形式残差求平方，而不是直接投影强残差。由此得到的能量泛函 $E_{\text{strong}}(\mathbf{c})$ 和 $E_{\text{weak}}(\mathbf{c})$ 继承了底层泊松问题的强制性和对称性，并为系数空间学习提供了结构良好的目标函数。

此基准测试的 VSL 设置包括选择谱阶数 N_x (以及二维情形下的 N_y)，选取足以准确积分相关多项式的求积阶数 Q_x、Q_y ，并初始化系数向量 $\mathbf{c}$，通常取零。系数被视为可训练参数，并通过基于梯度的方法最小化 $E_{\text{strong}}(\mathbf{c})$ 或 $E_{\text{weak}}(\mathbf{c})$ 来更新。梯度 $\nabla_{\mathbf{c}}E_{\text{strong}}$ 和 $\nabla_{\mathbf{c}}E_{\text{weak}}$ 通过反向模式自动微分计算，这种方法能够高效处理为获得二阶导数和梯度贡献所需的嵌套微分。对于椭圆型泊松基准问题，不存在时间维度，也没有初始条件项，因此 VSL 中的总损失简化为选定的变分能量加上可选的 l²-正则化项 $\lambda_{\text{reg}}\|\mathbf{c}\|_2^2$ ，该项可稳定优化并滤除高频模态。实际上，VSL 中最小化的损失形式为

$$J_{\text{VSL}}(\mathbf{c}) = E_{\text{strong/weak}}(\mathbf{c}) + \lambda_{\text{reg}}\|\mathbf{c}\|_2^2, \tag{66}$$

基准测试中将探讨强形式与弱形式之间的选择。

为更好地衡量 VSL 的性能，我们考虑两类基线方法：经典谱配置求解器，以及采用解析边界提升的场空间物理信息神经网络。经典的一维配点法采用切比雪夫–洛巴托节点 $\{x_j\}_{j=0}^{N_{\text{spec}}}$ ，这些节点通过将节点 $z_j = \cos(\pi j/N_{\text{spec}})$ 从 $[-1,1]$ 映射到物理区间 $[0,1]$, 上构造而成。利用标准切比雪夫公式构造微分矩阵 D ，以近似 d/dx ；二阶导数矩阵 D^2则近似 d^2/dx^2。将 D^2 限制在内部节点上，并在边界施加边界条件 $u = 0$ ，即可得到线性方程组$-D_{\text{int}}^2 u_{\text{int}} = f_{\text{int}}$，其中 u_{int} 和 f_{int} 分别是解和强迫项在内部的取值。该方程组通过直接分解求解。在二维情况下，组合 x 和 y 方向上的切比雪夫–洛巴托网格，并通过一维二阶导数矩阵的克罗内克和组装离散拉普拉斯算子；同样，通过消去边界节点来施加边界条件。由此得到的代数方程组 $-Lu_{\text{int}} = f_{\text{int}}$ 可提供高阶参考解，据此测量误差。

物理信息神经网络基线使用定义在场空间中的浅层前馈神经网络，并通过解析提升施加边界条件，以近似求解相同的泊松问题。在一维情况下，解的参数化形式为 p

$$u_\theta(x) = x(1-x)v_\theta(x), \tag{67}$$

其中 v_θ 是一个参数为 θ 且具有光滑非线性激活函数的神经网络。乘法因子 $x(1-x)$ 确保$u_\theta(0) = u_\theta(1) = 0$，因此无需施加边界惩罚。损失定义为在配置点处计算的偏微分方程残差均方值，

$$\mathcal{L}_{\text{PINN}}(\theta) = \frac{1}{|\mathcal{S}|}\sum_{x_i \in \mathcal{S}} \left(-u_\theta''(x_i) - f(x_i)\right)^2 , \tag{68}$$

导数通过自动微分获得。在二维情况下，采用类似的提升方式，

$$u_\theta(x,y) = x(1-x)y(1-y)v_\theta(x,y), \tag{69}$$

损失函数则对张量积配点集上 $-\Delta u_\theta - f$ 的均方残差进行惩罚。物理信息神经网络采用与 VSL 相同的优化器和学习率调度进行训练，以便隔离参数化和损失定义所产生的影响，而非优化设置差异所带来的影响。

泊松基准测试的结果采用与离散化无关的指标和方法特定指标进行评估。对于每种方法，均在稠密均匀测试网格上计算近似解 u_{num}，并与精确解 $u^\star$进行比较。相对 L^2 误差，[59],

$$L^2_{\text{rel}} = \|u_{\text{num}} - u^\star\|_{L^2} / \|u^\star\|_{L^2}, \tag{70}$$

以及相对 L^∞ 误差，

$$L^\infty_{\text{rel}} = \|u_{\text{num}} - u^\star\|_{L^\infty} / \|u^\star\|_{L^\infty}, \tag{71}$$

通过求积或测试网格上的离散范数进行数值计算。对于 VSL，还会监测训练轮次中变分能量 $E_{\text{strong/weak}}(\mathbf{c})$的衰减情况，以及在独立配置点上评估的任何诊断残差。对于经典配点求解器，重点考察离散化误差随谱分辨率N_{spec}的变化。对于物理信息神经网络，则会考察残差损失的训练轨迹、对配置点的潜在过拟合，以及对独立测试网格的泛化能力。

在这一维泊松边值问题的基准测试中，三种求解器呈现出明显不同的精度–成本特征（见图 3）。经典切比雪夫–洛巴托配置法使用 $N_{\text{spec}} = 32$，精度和效率均为最高：在密集测试网格上，其结果达到 $L^2_{\text{rel}} = 8.429 \times 10^{-8}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} = 2.114 \times 10^{-7}$。采用弱形式能量泛函训练时，系数空间中的 VSL 表现也颇具竞争力。仅使用 $N = 16$ 个节点和狄利克雷切比雪夫基时，基于能量的训练达到近谱精度，结果为 $L^2_{\text{rel}} = 5.025 \times 10^{-7}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} = 5.883 \times 10^{-7}$。此外，诊断性强形式残差（在内部切比雪夫点上评估）从 $\sim 5.23 \times 10^{2}$ 降至规定容差 10^{-10}，并在训练轮次 ≈ 941时停止；这表明学得的系数向量对应一个高质量的弱形式极小化解，同时也以很高精度满足偏微分方程的强形式。硬边界条件物理信息神经网络（深度为 4、宽度为 64，采用双曲正切激活函数）无需调节边界权重即可稳健收敛（边界损失按构造始终为零），并在 3000 个训练轮次内持续降低偏微分方程残差损失至 $\sim 2 \times 10^{-5} - 10^{-4}$，得到合理但精度较低的近似，结果为 $L^2_{\text{rel}} = 6.218 \times 10^{-4}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} = 8.791 \times 10^{-4}$。总体而言，对于这一光滑线性问题，谱求解器（配置法和基于能量的 VSL）能够给出接近机器精度的解，其中配置法的效率高出许多；而物理信息神经网络则提供了稳定的物理约束近似，但在相近的训练预算下，精度仍逊于其他方法。

将 VSL 的目标函数从变分能量（弱形式）切换为积分强形式残差$E_{\text{strong}}(\mathbf{c}) \approx \int (_0^1 u_{xx} + \quad \pi x \quad ^2 dx \sin())$后，训练行为发生了显著变化，最终精度也有所下降（见图 4）。全局残差 VSL 解的精度仅为$L^2_{\text{rel}} = 4。420 \times 10^{-4}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} = 7。374 \times 10^{-4}$，与物理信息神经网络相当（或略好），但远不及基于能量的 VSL。这一对比表明，对于这个泊松边值问题，弱形式的能量泛函在系数空间中提供了条件显著更好、稳定性更高的优化目标；而直接最小化强形式残差—这需要计算二阶导数，因此对 float32 自动微分和激进的热重启更为敏感—会导致训练振荡，并且即使计算预算大幅增加，精度仍然较差。

请注意，由于 VSL 和物理信息神经网络（PINN）均采用基于随机梯度的优化，并通过 float32 自动微分进行训练，因此报告的停止轮次、损失轨迹和最终误差指标应理解为单次运行的代表性结果，而非确定不变的数值；重复运行时，最终 L^2_{rel} 和 L^∞_{rel} 误差以及达到诊断容差时的训练轮次预计都会出现一定程度的运行间变异（尤其是对于 VSL 早停准则和非单调强形式/全局残差目标）。

在具有齐次狄利克雷边界条件、精确解为 $u^\star(x, \ y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$的二维泊松基准测试中，三种求解器在精度–成本权衡方面表现出明显差异；它们均使用切比雪夫–Lobatto 求值网格 $N_{\text{spec}} = 24$（见图 5 和 6）。对于这个光滑的线性问题，采用 $(N_x = N_y = 25)$ 的经典二维切比雪夫配置法几乎得到了精确解：其相对误差达到接近机器精度的水平，分别为 $L^2_{\text{rel}} \approx 8。09 \times 10^{-15}$ 和$L^\infty_{\text{rel}} \approx 9。44 \times 10^{-15}$。

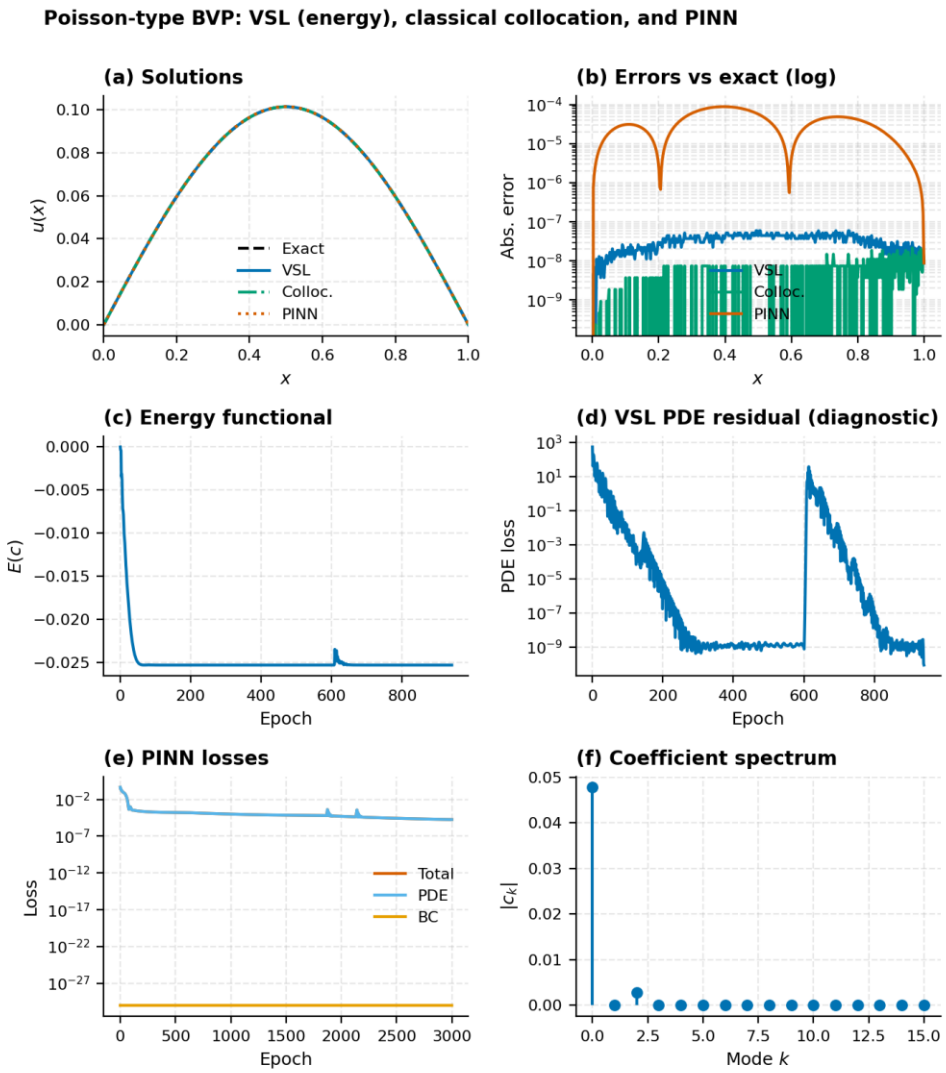


图 3。一维泊松边值问题的概览比较（3×2 网格）： $u''(x) = -\sin(\pi x)$，定义域为 $x \in [0,1]$，满足齐次狄利克雷条件 $u(0) = u(1) = 0$。面板 (a) 比较了精确解、采用弱形式泊松能量训练的 VSL（狄利克雷切比雪夫基，$N = 16$）、经典切比雪夫–洛巴托配置法（$N_{\text{spec}} = 32$）以及硬边界条件 PINN（tanh 多层感知机，宽度 64，深度 4）在密集网格上的解。面板 (b) 展示了逐点绝对误差 $|u_{\text{num}} - u_{\text{exact}}|$（对数刻度）。面板 (c)–(d) 展示 VSL 训练历史：(c) 主要目标函数（能量泛函）随训练轮次的变化；(d) 在切比雪夫内部点处计算的诊断性强形式残差损失 $\langle (u_{xx} + \sin(\pi x))^2 \rangle$。面板 (e) 展示 PINN 训练损失（偏微分方程损失；边界损失仅作为诊断项显示，因为硬边界条件试探函数可精确满足 $u(0) = u(1) = 0$）。面板 (f) 展示学习得到的 VSL 系数谱 $|c_k|$ 随模态索引 k的变化。

使用标准弱形式能量泛函在系数空间中训练 VSL 时，该方法在紧凑的张量积狄利克雷切比雪夫基 ($N_x = N_y = 8$) 下达到了接近谱精度的水平。在报告的运行中，VSL 解的误差分别为 $L^2_{\text{rel}} \approx 1.38 \times 10^{-7}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} \approx 1.79 \times 10^{-7}$。训练曲线显示，经求积加权的强形式残差和诊断用配点残差均迅速收敛至 $\mathcal{O}(10^{-8})$，大约只需 ~ 400 训练轮次。这与以下事实相符：最小化 $E_{\text{weak}}(u)$ 为泊松问题提供了条件良好的目标函数，并避免直接优化二阶导数残差。边界提升物理信息神经网络基线（深度为 4、宽度为 64，采用双曲正切激活函数）在精度上的收敛较慢，但无需调节边界权重，表现依然稳健。在弱形式实验中，物理信息神经网络在训练期间将偏微分方程残差从 $\mathcal{O}(10^1)$ 降至 $\mathcal{O}(10^{-4})$，得到一个具有中等精度的解，其误差为 $L^2_{\text{rel}} \approx 9.27 \times 10^{-5}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} \approx 1.39 \times 10^{-4}$，即精度低于基于能量的 VSL。

将 VSL 从变分能量目标函数切换为全局强形式最小二乘目标函数，会显著改变训练行为（见图 7 和 8）。尽管训练初期求积残差稳步下降（例如，从 $\mathcal{O}(10^2)$降至 $\mathcal{O}(10^{-2})$附近），但在余弦热重启下，优化过程的稳定性显著降低：目标函数和诊断性配点残差呈现明显的非单调变化，并在重启事件后多次上升（例如，在训练轮次 ~ 500 附近，以及 ~ 1500附近，全局残差跳回到 $\mathcal{O}(10^{-1}) - \mathcal{O}(10^1)$。

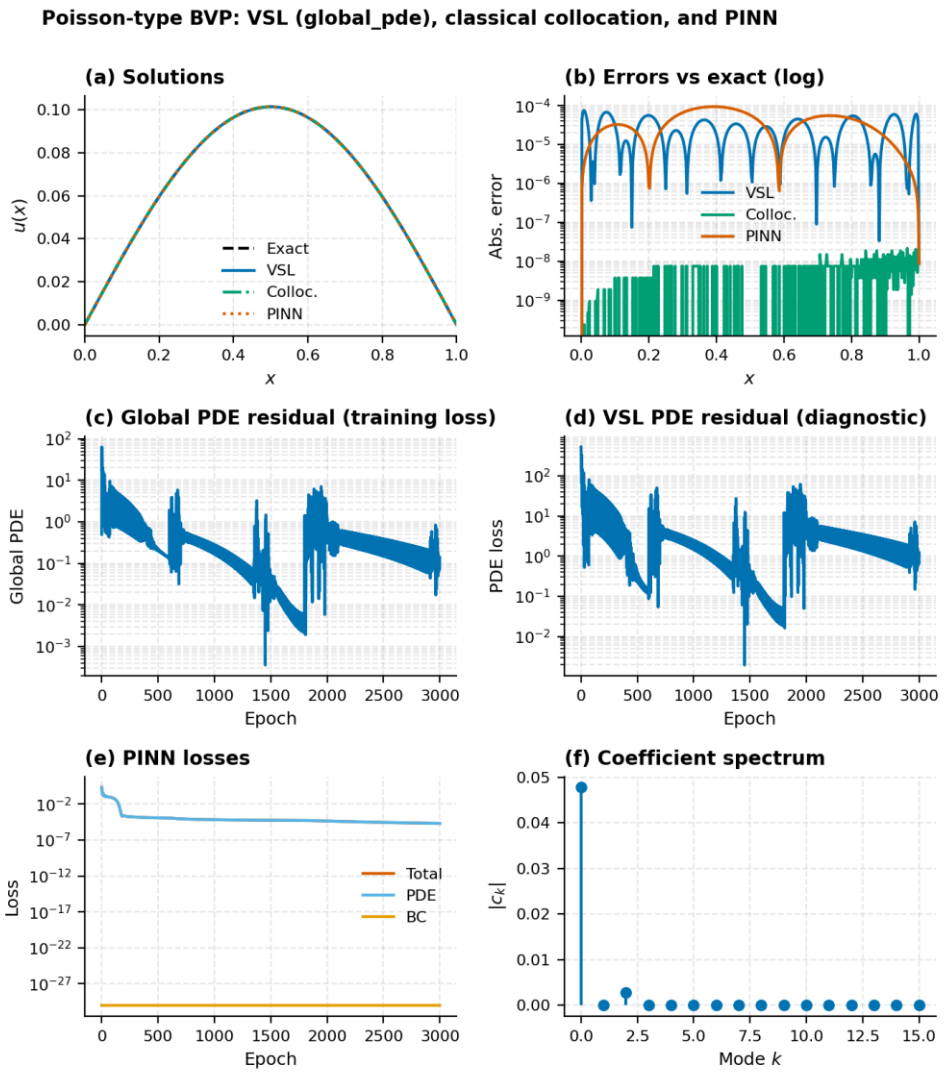


图 4。针对同一泊松基准测试的概览比较（3×2 网格），其中 VSL 使用积分强形式残差进行训练。各面板与图 3相对应：(a) 密集网格解比较（精确解 vs 使用狄利克雷切比雪夫基 $N = 16$ 与配点 $N_{\text{spec}} = 32$ 与硬边界条件 PINN 的全局偏微分方程 VSL），(b) 逐点绝对误差（对数尺度），(c) VSL 主目标 $E_{\text{strong}}(\mathbf{c}) \approx \int ($ $_0^1$ $u_{xx} +$ πx $^2 dx$ sin()），使用高斯–勒让德求积计算；(d) 在切比雪夫内部点评估的诊断残差损失；(e) 物理信息神经网络损失历史；(f) 学习得到的 VSL 系数谱 $|c_k|$。该图显示，以全局强形式残差目标取代弱形式能量目标时，非单调性会增加，精度则会降低。

因此，与弱形式运行相比，最终精度大幅下降：全局强形式 VSL 解最终达到 $L^2_{\text{rel}} \approx 8.33 \times 10^{-5}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} \approx 1.35 \times 10^{-4}$。作为比较，在同一强形式实验中，物理信息神经网络达到$L^2_{\text{rel}} \approx 6.64 \times 10^{-5}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} \approx 7.12 \times 10^{-5}$，其表现可与全局强形式 VSL 结果相媲美（且略胜一筹）。

对这些基准测试的分析强调了与 VSL 设计直接相关的几个定性方面。首先，由于制造解足够光滑且区域简单，随着基函数数量增加，VSL 和经典配置法中谱基对应的逼近误差会迅速衰减，这与谱收敛理论一致。优化将变分能量降至接近机器精度后，VSL 中占主导地位的误差预计就是这种谱逼近误差，因此 VSL 继承了底层谱空间的收敛行为。其次，强形式和弱形式的能量从互补的角度反映了解的质量。在强形式下，最小化 $\int(-\Delta u_N - f)^2$ 可在求积误差范围内确保偏微分方程逐点平衡；在弱形式下，最小化$\sum(R_n(\mathbf{c}))^2$ 可确保残差与选定基正交。对于泊松算子，两种能量的条件数都良好；在精确求积下，它们的极小化解与伽辽金解一致，因此实践中观察到的差异可归因于求积和优化细节。第三，将 VSL 与场空间物理信息神经网络进行比较，凸显了

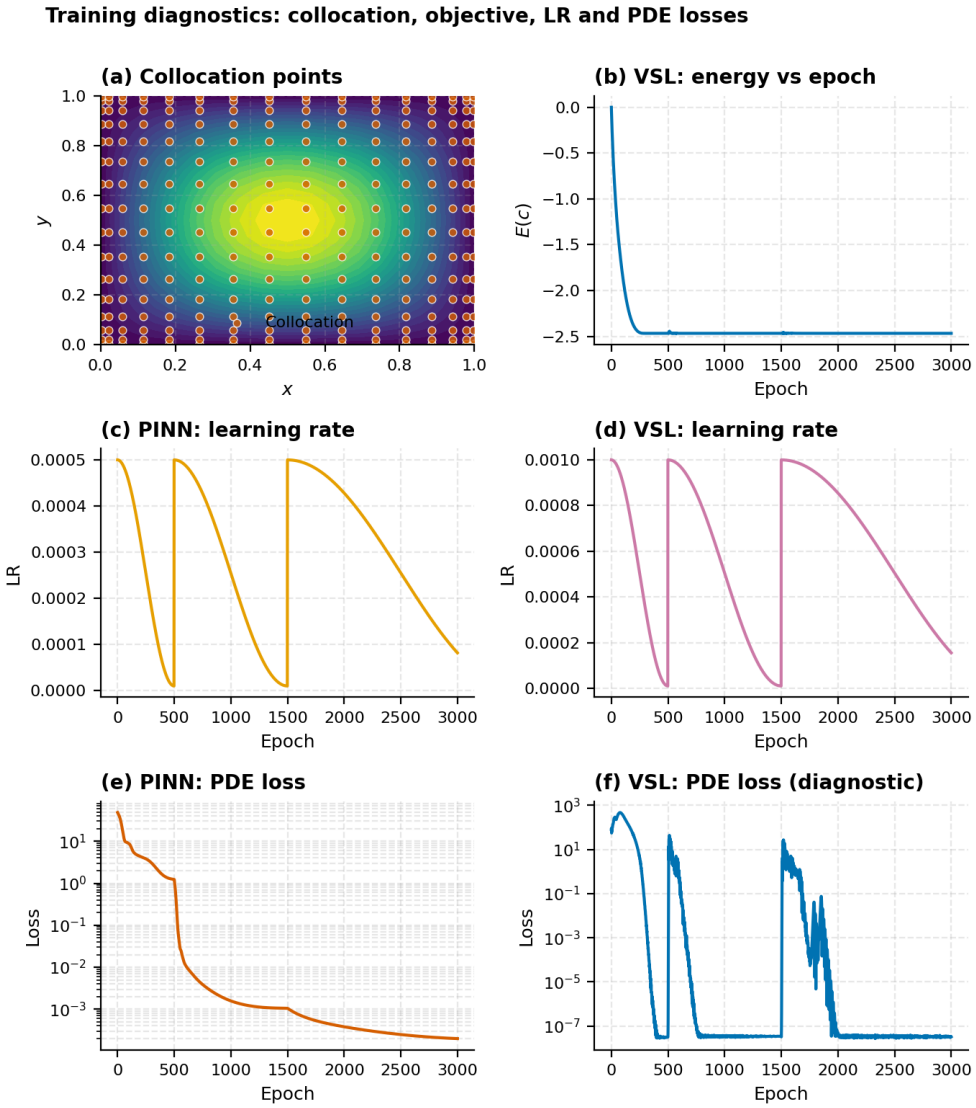


图5。二维泊松基准测试弱形式目标函数的训练诊断。(a) 用于诊断偏微分方程残差和物理信息神经网络训练的内部配置点，显示在精确解等值线上。(b) VSL 训练目标函数随训练轮次的变化，其中优化目标函数是通过张量积高斯–勒让德求积计算的离散能量 $E(\mathbf{c})$。(c) 物理信息神经网络学习率调度（采用余弦退火和热重启参数）。（d）VSL 学习率调度（采用余弦退火、相同的重启参数和基础学习率 10^{-3}）。（e）物理信息神经网络偏微分方程残差损失随训练轮次的变化，在边界提升下，将配置点处的强形式残差 ($u_{xx} + u_{yy} + f$) 计算为强形式残差均方。(f) VSL 诊断偏微分方程残差损失随训练轮次的变化，在配置网格上计算为强形式残差均方；在基于能量的设定中，该诊断项并非优化目标函数，而是用于验证学习到的系数向量所得到的解是否与偏微分方程一致。

参数化和损失结构的影响。VSL 在低维系数空间中运作，通过线性映射得到函数值，且其损失严格源自变分原理；而物理信息神经网络则在维度高得多的权重空间中运作，其损失景观也更为复杂。这一区别体现在优化轨迹的结构上：VSL 的能量衰减通常是单调的，并与具有物理意义的量相对应；而物理信息神经网络损失曲线可能表现出更不规则的行为。

7. 基准测试 II – 一维和二维时变扩散方程

基准测试 II 考察一维和二维时变扩散方程，旨在评估 VSL 在这一典型抛物型问题上的表现；该问题要求高保真地捕捉空间和时间动力学。模型问题定义在时空柱体 $Q = \Omega \times I$ 上，其中 $\Omega = (0,1)^2$ 是 R^2 中的单位正方形，$I = [0,1]$ 是单位时间区间。控制方程为热型扩散方程 [30]

$$u_t(x,y,t) - \nu\left(u_{xx}(x,y,t) + u_{yy}(x,y,t)\right) = f(x,y,t), \qquad (x,y,t) \in Q, \tag{72}$$

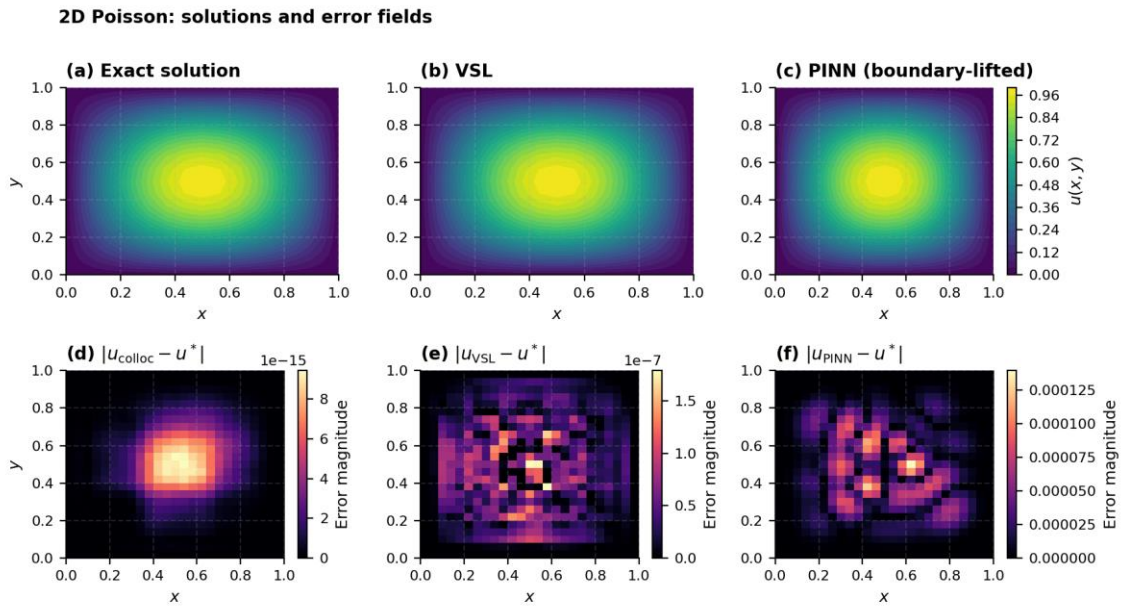


图 6。二维泊松方程：解与误差场（弱形式目标函数）。上排：（a）精确解 $u^\star(x,y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$，（b）VSL 解 u_{VSL} 以张量积狄利克雷切比雪夫基表示，其中 $(N_x, N_y) = (8,8)$，以及（c）边界提升物理信息神经网络解 $u_{\mathrm{PINN}} = x(1-x)y(1-y)v_\theta(x,y)$。下排：共同切比雪夫–洛巴托求值网格上的绝对误差场：（d）$|u_{\mathrm{colloc}} - u^\star|$ 由经典二维切比雪夫配置法得到（在边界上施加狄利克雷条件，并对内部进行线性求解），（e）$|u_{\mathrm{VSL}} - u^\star|$，以及（f）$|u_{\mathrm{PINN}} - u^\star|$。

其扩散系数为常数 $\nu > 0$。空间边界上施加齐次狄利克雷边界条件，

$$u(x,y,t) = 0, \qquad (x,y) \in \partial\Omega, t \in I, \tag{73}$$

且初始条件由 b 给出 y

$$u(x,y,0) = u_0(x,y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y), \qquad (x,y) \in \Omega. \tag{74}$$

为实现精确的误差量化，采用如下形式构造一个精确解 p

$$u^\star(x,y,t) = e^{-t}\sin(\pi x)\sin(\pi y), \tag{75}$$

该函数在空间和时间上均光滑，并与边界条件相容。将 $u^\star$ 代入偏微分方程可得 g

$$u_t^\star = -e^{-t}\sin(\pi x)\sin(\pi y), \qquad u_{xx}^\star + u_{yy}^\star = -2\pi^2 e^{-t}\sin(\pi x)\sin(\pi y), \tag{76}$$

因此，强迫项为

$$f(x,y,t) = (2\nu\pi^2 - 1)e^{-t}\sin(\pi x)\sin(\pi y). \tag{77}$$

这种构造确保 $u^\star$ 精确满足偏微分方程、齐次狄利克雷边界条件和初始条件，从而为比较数值求解器提供了一个便于解析处理的基准测试。

对于相应的一p维扩散g基准问题，在 Ω = 0、1 和 $t \in$(0、) 1 上，我们采用

$$u_t(x,t) - \nu u_{xx}(x,t) = f(x,t), \qquad u(0,t) = u(1,t) = 0, \qquad u(x,0) = \sin(\pi x), \tag{78}$$

其制造解为 $u^\star(x,t) = e^{-t}\sin(\pi x)$。代入可得 $u_t^\star = -e^{-t}\sin(\pi x)$ 和 $u_{xx}^\star = -\pi^2 e^{-t}\sin(\pi x)$，因此 $f(x,t) = (\nu\pi^2 - 1)e^{-t}$ $\sin(\pi x)$。 (79)

我们将二维扩散基准问题作为主要测试问题，并首先展示其结果。随后报告一维扩散基准问题的结果，该问题是通过对二维设置进行空间降维得到的一个较简单特例。

VSL 实现针对 $u(x,y,t)$ 在系数空间中引入了有限维谱试探函数，该函数由空间中的满足狄利克雷条件的切比雪夫基和时间中的切比雪夫基构造而成。在每个空间方向上，例如 $x \in [0,1]$，通过映射后的切比雪夫构造定义一组基函数 $\{\phi_k^{(x)}\}_{k=0}^{N_x-1} \subset H_0^1(0,1)$，其形式为 $\phi_k^{(x)}(x) = T_{k+2}(2x-1) - T_k(2x-1)$，其中 T_n 是第一类切比雪夫多项式的第 n 个。此定义确保对所有 k，$\phi_k^{(x)}(0) = \phi_k^{(x)}(1) = 0$，因此，$x$方向上的齐次狄利克雷边界条件已内置于逼近空间中。类似地，在 y方向上构造一组 $\{\phi_\ell^{(y)}\}_{\ell=0}^{N_y-1}$。在时间方向上，采用定义于 $[0,1]$ 上的切比雪夫基 $\{\psi_m\}_{m=0}^{N_t-1}$，其定义为 $\psi_m(t) = T_m(2t-1)$。于是，完整的时空近似空间就是这些一维基函数的张量积张成空间，其基函数为 $\Phi_{k\ell m}(x,y,t) = \phi_k^{(x)}(x)\phi_\ell^{(y)}(y)\,\psi_m(t)$，指标范围为 $k = 0$、……、$N_x - 1$，l $= 0$、……、$N_y - 1$，以及 $m = 0$、……、$N_t - 1$。近似解写作

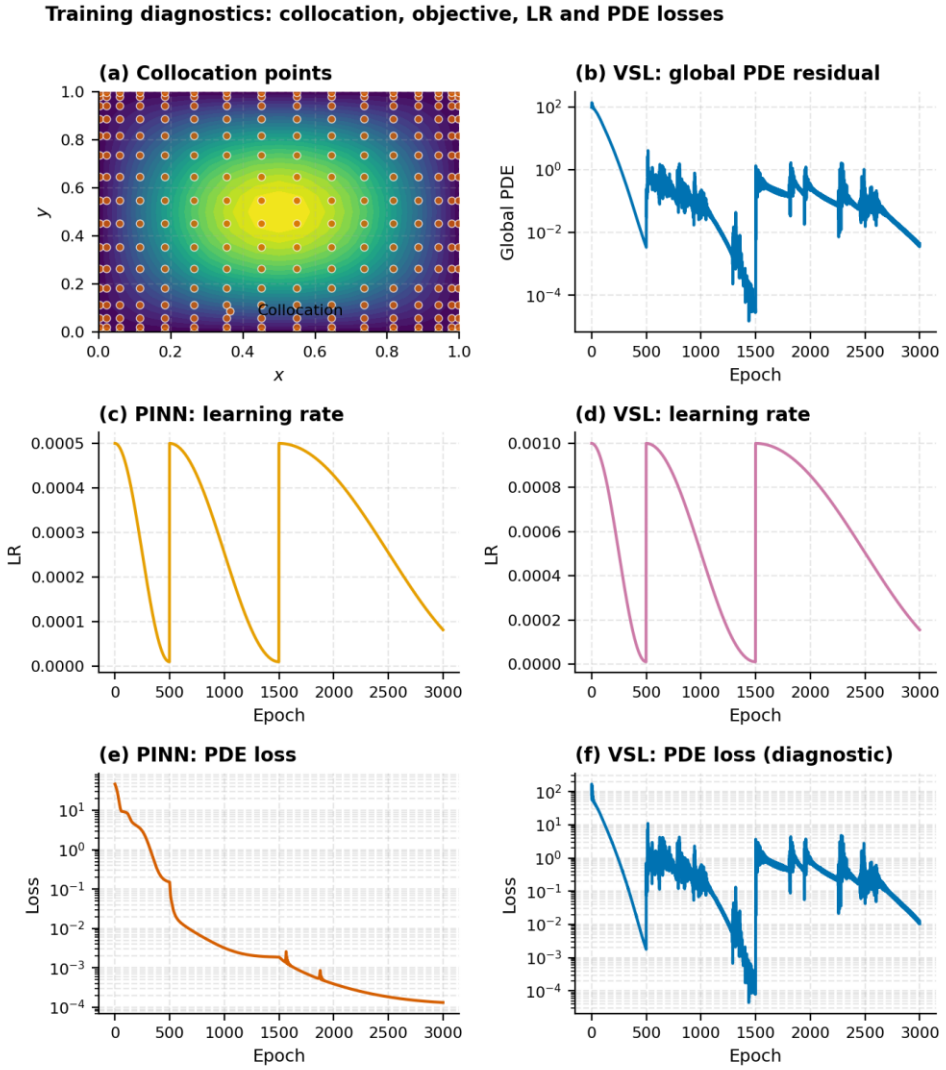


图 7。 二维泊松方程：与图5相同，但采用 VSL 强形式目标。

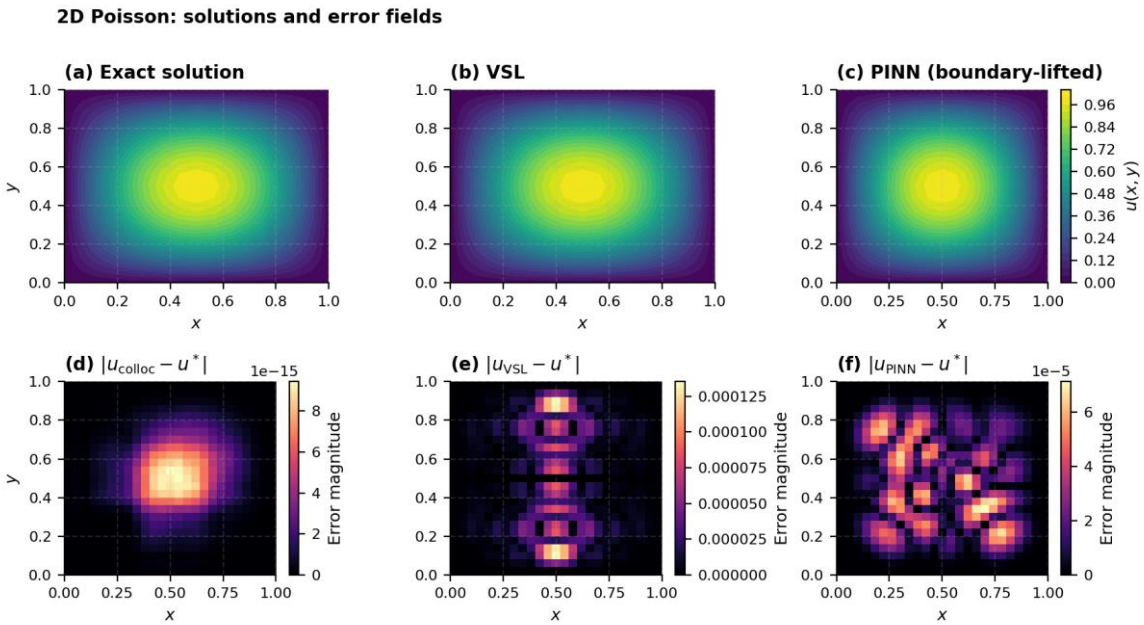


图 8。 二维泊松方程：与图6相同，但采用 VSL 强形式目标。

$$u_N(x,y,t;\mathbf{c}) = \sum_{k=0}^{N_x-1}\sum_{\ell=0}^{N_y-1}\sum_{m=0}^{N_t-1} c_{k\ell m}\Phi_{k\ell m}(x,y,t)\,, \tag{80}$$

其中，$\mathbf{c}$ 表示维度为 $N_xN_yN_t$的谱系数向量。由于每个空间基函数在边界上都为零，任意系数向量$\mathbf{c}$ 都能生成满足齐次狄利克雷条件的近似解u_N ，无需在优化过程中使用惩罚项或进行约束强制。

通过将 $u_N(\cdot;\mathbf{c})$代入$E_{\text{strong}}(u)$，并使用张量积高斯–勒让德求积近似时空积分，可得到扩散问题在系数空间中的强形式 VSL 能量。设$\{x_{q_x}, w_{q_x}\}$、$\{y_{q_y}, w_{q_y}\}$和$\{t_{q_t}, w_{q_t}\}$分别为各坐标上 [0,1] 的高斯–勒让德节点与权重，其中 $q_x = 1$，…，Q_x q_y =1，…，Q_y，且$q_t = 1$，…，Q_t。强形式能量的求积近似为

$$E_{\text{strong}}(\mathbf{c}) \approx \frac{1}{2}\sum_{q_x=1}^{Q_x}\sum_{q_y=1}^{Q_y}\sum_{q_t=1}^{Q_t} w_{q_x}w_{q_y}w_{q_t}\left(\mathfrak{M}\left(x_{q_x},y_{q_y},t_{q_t};\mathbf{c}\right)\right)^2, \tag{81}$$

$$\mathfrak{M}\left(x_{q_x},y_{q_y},t_{q_t};\,\mathbf{c}\right) = u_{N,t}\left(x_{q_x},y_{q_y},t_{q_t};\mathbf{c}\right) - \nu\left(u_{N,xx}\left(x_{q_x},y_{q_y},t_{q_t};\mathbf{c}\right) + u_{N,yy}\left(x_{q_x},y_{q_y},t_{q_t};\mathbf{c}\right)\right) - f\left(x_{q_x},y_{q_y},t_{q_t}\right). \tag{82}$$

使用嵌套的自动微分磁带计算 u_N 的空间与时间导数，无需针对每个基函数推导解析导数表达式。弱形式能量，即矩残差能量或伽辽金最小二乘（GLS），通过先构造伽辽金残差

$$R_{k\ell m}(\mathbf{c}) = \iiint_Q \mathcal{R}(u_N(\cdot;\mathbf{c}))(x,y,t)\Phi_{k\ell m}(x,y,t)\,dxdydt\,, \tag{83}$$

其中 $\mathrm{R}(u_N(\cdot;\,\mathbf{c}))(x,y,t) = u_{N,t}(x,y,t;\,\mathbf{c}) - \nu\,(u_{N,xx}(x,y,t;\,\mathbf{c}) + u_{N,yy}(x,y,t;\,\mathbf{c})) - f(x,y,t)$，用相同的张量积数值求积进行近似，然后定义

g

$$E_{\text{weak(GLS)}}(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{N_x-1}\sum_{\ell=0}^{N_y-1}\sum_{m=0}^{N_t-1}\left(R_{k\ell m}(\mathbf{c})\right)^2. \tag{84}$$

重要的是，能量计算中不会对空间进行分部积分。也就是说，微分算子仍作用于 $\mathrm{R}(u_N)$ 中的试函数场 u_N ，而“弱化”完全来自将强残差与基函数进行测试（投影），并对所得矩加以惩罚。这一选择是有意为之：它产生了一种通用且与算子无关的构造，可用于线性或非线性偏微分方程，无需针对不同情形分别推导分部积分后的双线性形式及相关边界通量项。由于u_N 由光滑谱基表示，且边界条件通过构造来施加（例如，使用满足边界条件的基函数或提升），因此强残差及其矩均定义良好，并且可通过自动微分高效计算。

为纳入初始条件 $u\ x,\ \ 0\ \ = u\ \ x,$ (VSL 会添加一个单独的初始条件项 $_0$ y rm

$$\mathcal{L}_{\text{IC}}(\mathbf{c}) = \frac{1}{|\mathcal{S}_{\text{IC}}|}\sum_{(x_i,y_i)\in\mathcal{S}_{\text{IC}}}\left(u_N(x_i,y_i,0;\mathbf{c}) - u_0(x_i,y_i)\right)^2, \tag{85}$$

其中，$\mathcal{S}_{\text{IC}}$ 是在 $t = 0$ 处的一组空间配置点，通常选择每个坐标方向上的切比雪夫–高斯内部节点。VSL 总损失的形式为

$$\mathcal{J}_{\text{VSL}}(\mathbf{c}) = E_{\text{strong/weak(GLS)}}(\mathbf{c}) + \lambda_{\text{IC}}\mathcal{L}_{\text{IC}}(\mathbf{c}) + \lambda_{\text{reg}}\|\mathbf{c}\|_2^2, \tag{86}$$

其中，λ_{IC} 和 λ_{reg} 分别是初始条件项和正则化项的权重。系数初始化后，使用 Adam 等自适应优化器最小化损失，并通过余弦退火重启学习率调度塑造训练动态。

为提供经典的高阶参考，基准测试包含一个谱配置法求解器：该求解器使用切比雪夫–洛巴托点离散空间，并采用克兰克–尼科尔森格式推进时间。在每个空间方向中，例如 x，构造洛巴托节点 $z_j = \cos(\pi j/N_x^{\text{spec}})$ 位于 $[-1,1]$ 上，并通过 $x_j = (z_j+1)/2$ 将其映射到 $[0,1]$ 。利用涉及缩放向量和节点两两差值的标准公式构造切比雪夫微分矩阵 D_x；物理坐标中的二阶导数矩阵 D_{xx} 通过 $D_{xx} = 4D_x^2$ 获得，以考虑 $[-1,1]$ 与 $[0,1]$之间的仿射映射。在 y中采用相同的构造，得到 D_{yy}。限制到内部索引，并与单位矩阵形成克罗内克积，可得到作用于内部自由度的离散拉普拉斯算子 L 。对于内部值 $u_{\text{int}}(t)$，半离散系统可写为

$$\frac{d}{dt}u_{\text{int}}(t) = \nu L u_{\text{int}}(t) + f_{\text{int}}(t), \tag{87}$$

其中 $f_{\text{int}}(t)$是强迫项的内部值。在步长为 $\{t_n\}_{n=0}^{N_t^{\text{steps}}}$ 的均匀时间网格上，Δt，I 是内部单位矩阵，克兰–克–尼科尔森更新公式为

$$\left(I - \frac{\Delta t}{2}\nu L\right)u_{\text{int}}^{n+1} = \left(I + \frac{\Delta t}{2}\nu L\right)u_{\text{int}}^{n} + \frac{\Delta t}{2}(f_{\text{int}}^{n+1} + f_{\text{int}}^{n}), \tag{88}$$

初始数据 u_{int}^{0} 通过在内部配置节点处计算 $u_0(x,y)$ 得到。每个时间步都将边界值设为零，以满足齐次狄利克雷条件。该方案在时间上具有二阶精度，在空间上具有高阶精度，并且对扩散方程无条件稳定，因此可作为严格的基准，用于比较 VSL 和物理信息神经网络方法。

此基准测试的物理信息神经网络基线采用场空间神经参数化，并通过解析提升来满足边界条件和初始条件。定义一个具有若干隐藏层和平滑激活函数（例如双曲正切）的神经网络 $v_\theta(x,y,t)$，其定义域为 $\mathbb{R}^3$。物理解表示为

$$u_\theta(x,y,t) = (1-t)u_0(x,y) + t\,x(1-x)y(1-y)\,v_\theta(x,y,t), \tag{89}$$

其中，$u_0(x,y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$ 是给定的初始剖面。该提升确保在 $t = 0$，

$$u_\theta(x,y,0) = u_0(x,y), \tag{90}$$

并且在空间边界 $x \in \{0,1\}$ 或 $y \in \{0,1\}$ 上，因子 $x(1-x)y(1-y)$ 为零，从而对所有 t 均有 $u_\theta = 0$。因此，损失中只有偏微分方程约束需要显式施加。物理信息神经网络损失定义为在时空中的配置点 $\{(x_i, y_i, t_i)\}$ 处计算的偏微分方程残差均方值，

$$\mathcal{L}_{\text{PINN}}(\theta) = \frac{1}{|\mathcal{S}_{\text{pde}}|}\sum_{(x_i,y_i,t_i)\in\mathcal{S}_{\text{pde}}}\left(u_{\theta,t}(x_i,y_i,t_i) - \nu\left(u_{\theta,xx}(x_i,y_i,t_i) + u_{\theta,yy}(x_i,y_i,t_i)\right) - f(x_i,y_i,t_i)\right)^2, \tag{91}$$

导数同样通过自动微分获得。尽管初始条件以解析方式施加，但仍可监测单独的初始条件诊断损失，以量化自动微分和实现细节导致的数值偏差。PINN 使用与 VSL 相同的优化器和余弦退火重启学习率调度进行训练，以确保性能差异源于参数化和损失结构，而非优化选择。

对二维扩散基准问题的讨论强调了三种方法在概念上的差异。VSL 将扩散问题视为精心构造的谱子空间中的全局时空变分问题，通过构造满足边界条件，并通过专门的损失项施加初始条件。时空视角的优势在于不需要单独的时间步进过程：解在 Q 上近似为单个函数，所有时间动力学都通过谱时间基和时空能量来刻画。这与经典配置基准方法形成对比，后者采用半离散策略：对空间进行谱离散，并使用 Crank–Nicolson 推进时间，实际上将问题分解为一系列椭圆方程求解。经典方法虽然十分成熟且高效，但对于必须将时间与其他坐标（如参数维度或随机维度）置于同等地位的情形，其适用性不那么自然。相比之下，PINN 原则上具有很强的灵活性，因为神经网络架构理论上能够适应复杂的解结构，并可扩展至更一般的几何形状。然而，由于其参数化具有高维、非线性的特点，优化景观更加复杂，而且偏微分方程残差损失通常需要平衡多个贡献项及其尺度。相比之下，VSL 的线性系数空间参数化和物理推导的能量，使优化问题更接近于具有固定特征映射的平滑非线性最小二乘系统，因此与经典数值分析更加契合。

我们首先通过带有 $\nu = 1$ 的一维热方程展开数值研究。我们考虑定义在 $(0,1)\times(0,1)$ 上、精确解为 $u^\star(x,t) = e^{-t}\sin(\pi x)$ 且具有相应强迫项的构造的一维热方程。我们比较三种求解器：(i) 在张量积切比雪夫空间中采用 ($N_x = N_t = 8$) 的 VSL，通过 Adam 和余弦衰减重启进行训练；(ii) 一种经典参考方法，在空间上采用切比雪夫–洛巴托配置法、在时间上采用 Crank–Nicolson，并使用 ($N_x^{\text{spec}} = 32$) 和 ($N_t = 64$)；(iii) 采用提升的物理信息神经网络（PINN），以解析方式强制满足狄利克雷边界条件和初始条件。

经典配点法（见图 9-12）达到了预期的空间谱精度/高阶精度。在 $t = 1$ 处，其相对误差为 $L^2_{\text{rel}} = 2.284\times10^{-6}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} = 2.316\times10^{-6}$。这与针对该光滑问题、充分分辨的切比雪夫– Crank–Nicolson 参考方法的表现一致，并证实了基准方法在数值上的可靠性。

在 GLS弱形式中（见图 9 和图 10），优化针对张量积试探/测试基的强残差矩平方进行最小化（伽辽金投影能量）。训练将 GLS弱能量降至非常小的值（例如，在后续训练轮次中为 $E_{\text{weak(GLS)}} \sim 10^{-5} - 10^{-8}$ ），而诊断用的强残差由于重启计划而发生振荡。在最终时刻，VSL 达到 $L^2_{\text{rel}} = 7.929\times10^{-5}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} = 1.116\times10^{-4}$。切换到强形式VSL目标函数（见图 11 和图 12）后，在相同谱秩和优化器设置下，解的质量得到提升。在 t =1 时，我们得到 $L^2_{\text{rel}} = 5.646\times10^{-5}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} = 8.299\times10^{-5}$，并且时空最大误差急剧下降至 $\max(|u_{\text{VSL}} - u^\star|) \approx 5.86\times10^{-5}$。

PINN 训练（见图 9-12）采用提升试探函数，因此初始条件和边界条件在构造时即得到满足，这一点反映在所报告的 IC diagnostic 恒为零。尽管如此，偏微分方程残差损失的下降速度仍慢于 VSL，且最终时刻的误差仍大于两种 VSL 变体：在 GLS弱形式实验中 $L^2_{\mathrm{rel}} = 4。860 \times 10^{-4}$，$L^{\infty}_{\mathrm{rel}} = 5。043 \times 10^{-4}$，以及 $\max(|u_{\mathrm{PINN}} - u^{\star}|) \approx 7。96 \times 10^{-4}$；在强形式实验中$L^2_{\mathrm{rel}} = 4。133 \times 10^{-4}$，$L^{\infty}_{\mathrm{rel}} = 3。883 \times 10^{-4}$，以及 $\max(|u_{\mathrm{PINN}} - u^{\star}|) \approx 7。55 \times 10^{-4}$。这与众所周知的事实一致：即使对于简单的抛物型偏微分方程，PINN优化也具有很强的刚性；同时，这也凸显了直接在结构化谱系数空间中求解的优势。

对于带有 $\nu = 0.1$ 的二维热方程，图 13 和图 14 总结了使用时空GLS弱形式能量训练的系数空间VSL模型在紧致张量积切比雪夫基（N_x、N_y、N_t）= (6,6,6)下的表现。在 t =1 时，GLS 弱形式解再现了制造解 $u^{\star}(x、y、t) = e^{-t}\sin(\pi x)\sin(\pi y)$ 的正确空间结构，相对误差为 $L^2_{\mathrm{rel}} = 1.028 \times 10^{-3}$ 和 $L^{\infty}_{\mathrm{rel}} = 1.807 \times 10^{-3}$。经典切比雪夫–洛巴托配点 + Crank–Nicolson求解器提供了精确得多的参考结果，在相对 L^2_{rel} 和 $L^{\infty}_{\mathrm{rel}}$ 中均为 1.30×10^{-5}，最大绝对误差也非常小，仅为 $\approx 4.78 \times 10^{-6}$；而 PINN（宽度（= 64）、深度（= 4））达到 2.56×10^{-3}(L^2_{rel}) 和 5.041×10^{-3} ($L^{\infty}_{\mathrm{rel}}$)。因此，在此配置下，GLS弱形式VSL在最终时刻明显比 PINN 更准确，但其精度仍比经典谱参考解低约两个数量级。

图 14 中的诊断结果阐明了 GLS 弱形式训练的训练行为。弱形式能量 $E_{\mathrm{weak(GLS)}}$ 下降了多个数量级，并达到极小值（低至 $\sim 10^{-9}$ 约在训练轮次 $\approx$ 1400），这表明残差的 Galerkin矩已受到强烈抑制。同时，逐点强残差诊断（在切比雪夫内部配置点处评估的均方偏微分方程残差）在训练早期并非单调下降，甚至可能在 GLS 弱能量已经很小时仍然较大（例如，诊断中的偏微分方程残差在训练轮次 100附近达到峰值）。这种解耦是预期现象：GLS 弱形式目标函数推动残差与所选测试函数/基函数保持正交，而诊断则在另一组点上监测逐点残差幅值。总体而言，GLS弱形式 VSL目标函数能够有效地以积分（Galerkin）意义施加偏微分方程约束，并在基函数规模适中的情况下生成高质量解，但最终精度归根结底受到 GLS 弱目标函数与此处所采用的低维系数表示共同限制。

将 VSL 切换到强形式空间–时间残差最小二乘目标函数在相同的基函数分辨率下显著提高了精度(6,6,6)。在 $t = 1$ 处，强形式 VSL 达到 $L^2_{\mathrm{rel}} = 4。806 \times 10^{-5}$ 和 $L^{\infty}_{\mathrm{rel}} = 7。539 \times 10^{-5}$，显著优于 GLS 弱形式运行，并且更接近经典的切比雪夫–Lobatto 配点 + Crank–Nicolson 参考结果（1.30×10^{-5} 在两种范数下均如此）。相比之下，两轮实验中物理信息神经网络的表现基本保持不变（$L^2_{\mathrm{rel}} \approx 2。52 \times 10^{-3}$，$L^{\infty}_{\mathrm{rel}} \approx 4。81 \times 10^{-3}$），这与仅改变了 VSL 目标函数这一事实相符。图 15 中的解场和误差场也反映了这一点：与 GLS 弱形式相比，强形式 VSL 显著降低了最终时刻的误差幅值，同时保持了正确的定性结构。

图 16 中的训练轨迹表明，强形式 VSL 使优化目标与所监测的诊断指标更加直接地对齐。强形式能量 E_{strong} 迅速下降（从第 0 个训练轮次的1.025×10^{-1} 降至第 $\sim 10^{-8}$ 约≈1400个训练轮次），基于配点的 PDE 残差诊断指标也随之下降，并在学习率重启前达到$\sim 10^{-7}$ 的最佳值。总体而言，强形式目标函数为最小化逐点残差提供了更直接的途径，并且凭借紧凑的系数模型，在$t = 1$ 处达到了接近经典方法的精度。

最后，基准测试 II 展示了 VSL 如何在完全变分的时空表述与现代学习基础设施之间发挥桥梁作用。它表明，在时空中采用全局谱表示，并结合强形式或 GLS 弱变分能量与基于梯度的优化，可以复现经典求解器的行为，同时兼容深度学习中的自动微分和调度工具。与此同时，与物理信息神经网络的比较凸显了结构化、可解释的系数空间学习与更灵活但较难分析的场空间神经求解器之间的权衡。因此，这项基准测试在阐明 VSL 用于含时偏微分方程时的优势与局限方面发挥着核心作用，并为后续基准测试中探讨的非线性扩散–对流系统等更具挑战性的情形奠定了基础。

8. 基准测试 III – Burgers 型扩散–对流问题

基准测试 III 针对 Burgers 型扩散–对流问题，旨在探究当扩散动力学上叠加非线性输运项时，VSL 的表现 [58]。与前两个基准测试中的纯椭圆型和线性抛物型模型问题不同，Burgers 型方程引入了对流非线性，使解与其自身梯度相耦合。即使对于光滑的制造解，这种非线性也会导致梯度变得更陡，残差景观可能更加复杂，且非线性代数系统的雅可比矩阵同时取决于解及其导数。因此，本基准测试考察此前在各类线性算子上接受测试的系数空间 VSL 表述，在偏微分方程算子变为非线性时是否仍然稳定且准确，以及其

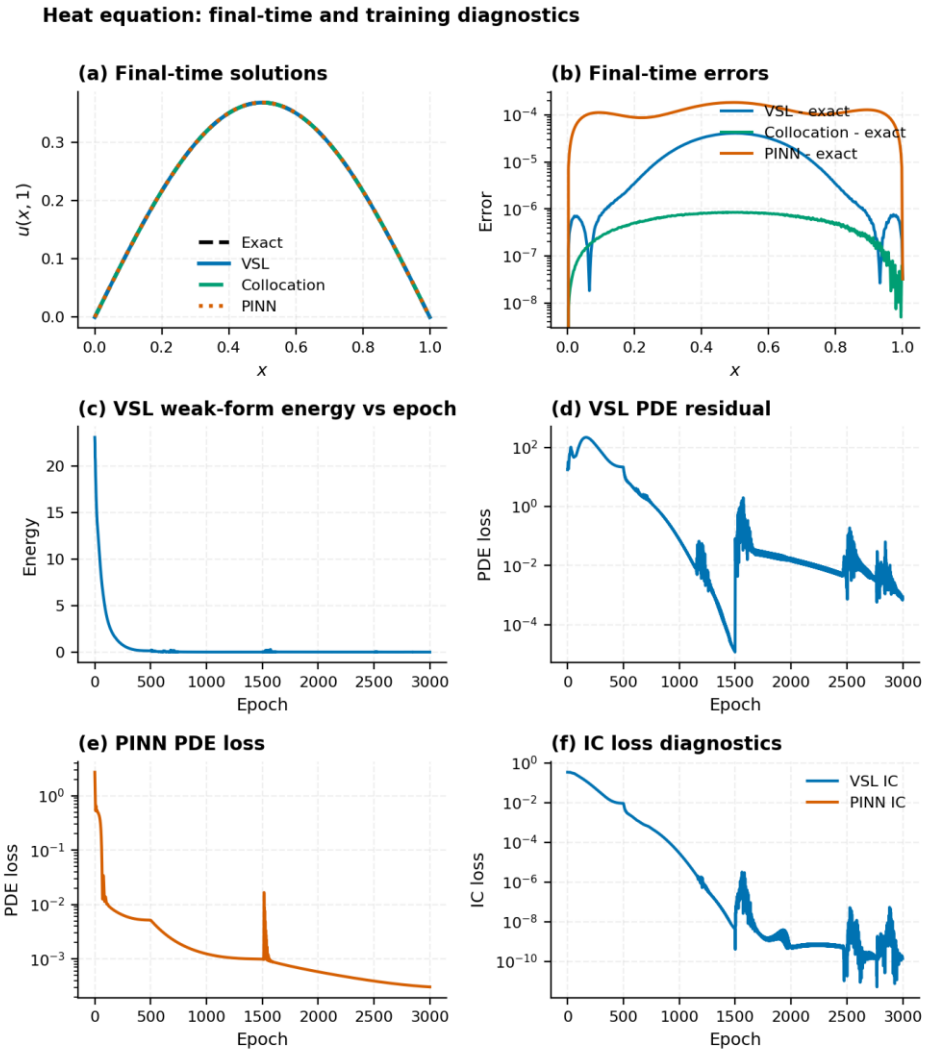


图 9。一维热方程基准的最终时刻精度与训练诊断概览。(a) 最终时刻剖面 $u(x,1)$：精确解、VSL、经典配置法和 PINN。(b) 最终时刻绝对误差 $|u(x,1) - u^\star(x,1)|$，以对数刻度显示。(c) VSL 目标函数历史（弱矩残差能量 E_{weak}）。(d) 在固定配置点集上评估的 VSL 诊断强形式偏微分方程残差损失。(e) PINN 训练期间的偏微分方程残差损失。(f) VSL 和 PINN 的初始条件诊断损失。

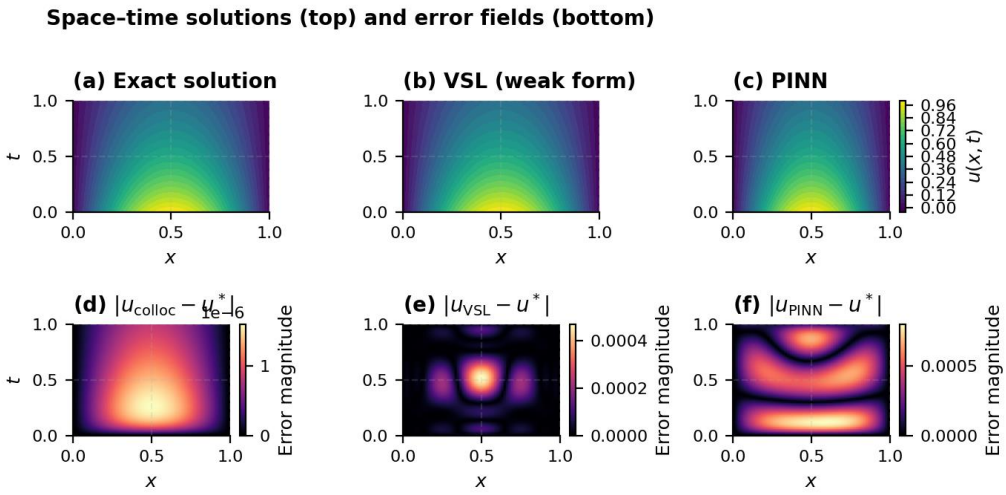


图 10。一维热方程在 $(x,t) \in [0,1] \times [0,1]$ 上的时空比较。上排：(a) 精确解 $u^\star(x,t) = e^{-t}\sin(\pi x)$；(b) VSL 预测 $u_{\text{VSL}}(x,t)$（矩残差/Galerkin“弱”目标函数）；(c) 使用解析初始条件/边界条件提升的 PINN 预测 $u_{\text{PINN}}(x,t)$。下排：绝对误差场 (d) $|u_{\text{colloc}} - u^\star|$ 采用切比雪夫–洛巴托配置法并以 Crank–Nicolson 时间步进求解；(e) $|u_{\text{VSL}} - u^\star|$；(f) $|u_{\text{PINN}} - u^\star|$。

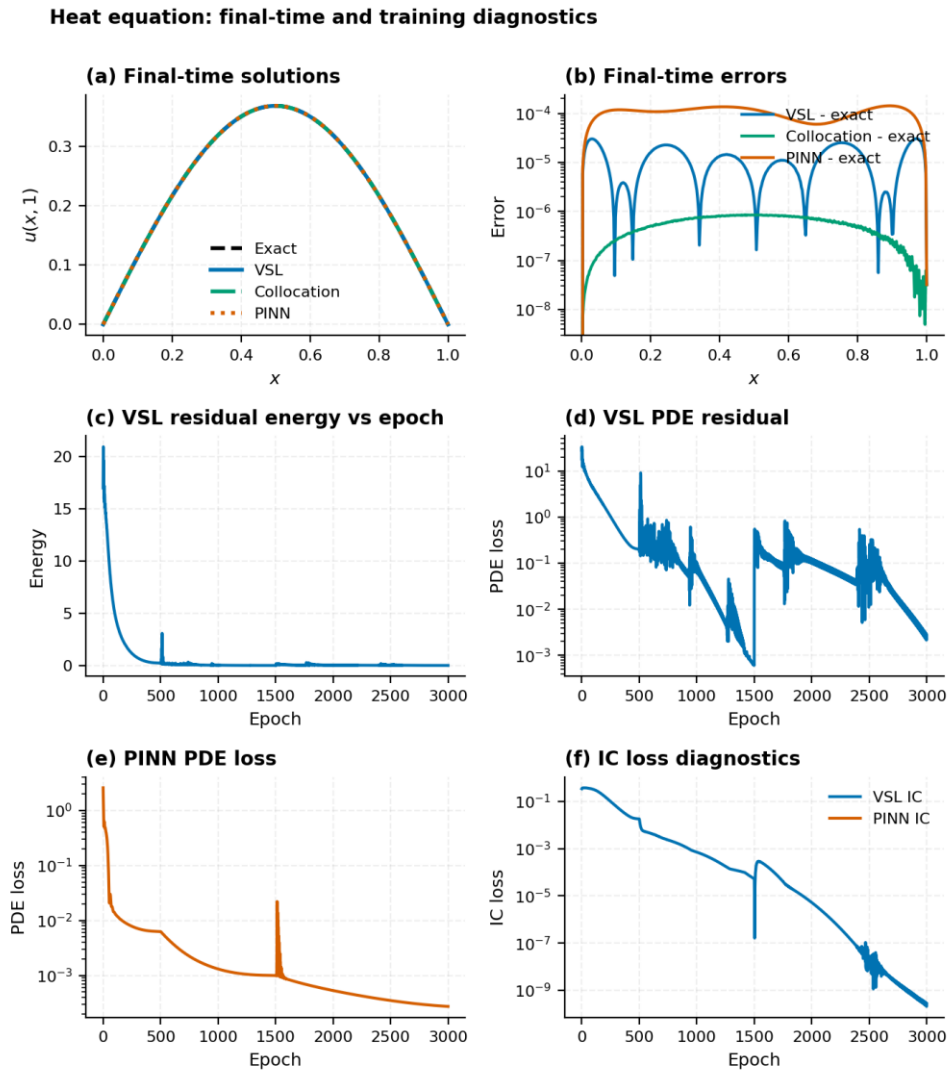


图11。时空–一维热方程在 （x， t） ∈ [0,1] × [0,1]。 与图9相同，但采用 VSL 强形式目标。

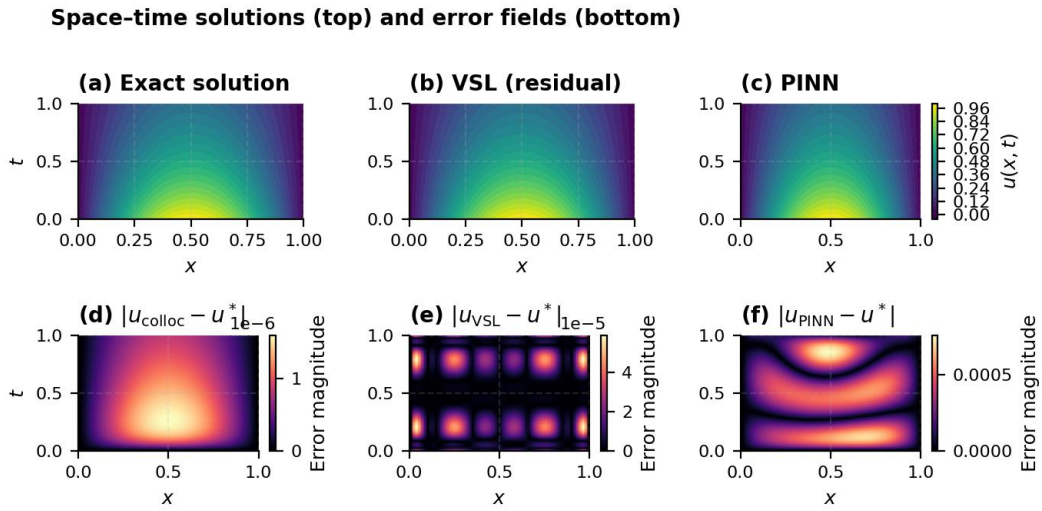


图12。时空–一维热方程在 （x， t） ∈ [0,1] × [0,1]。 与图10相同，但采用 VSL 强形式目标。

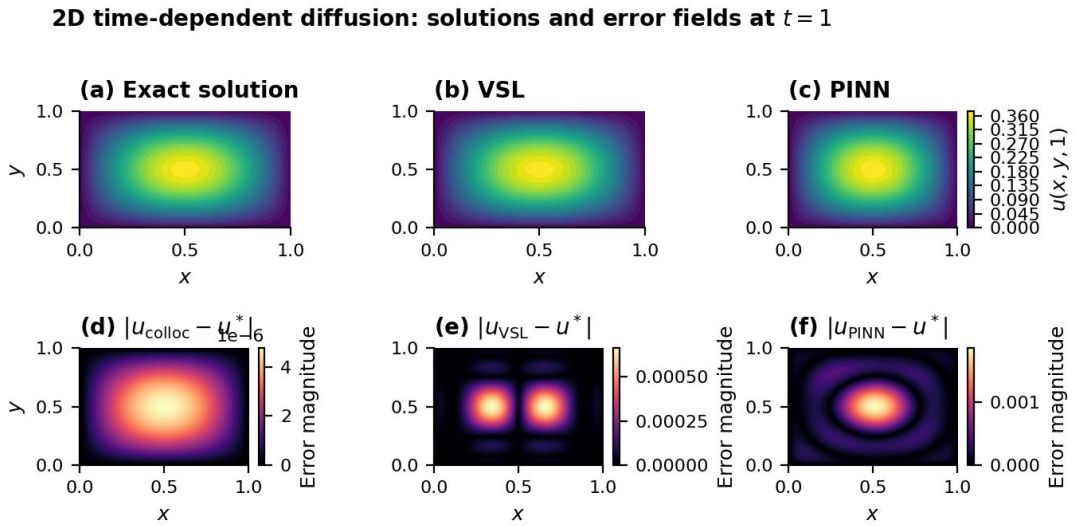


图 13。（弱形式 VSL）在 $t = 1$ 时二维时变扩散基准的终时刻解与误差场。(a–c) 共同的 $N_x \times N_y$ 测试网格上的解场：(a) 构造精确解 $u^\star(x, y, 1) = e^{-1} \sin(\pi x) \sin(\pi y)$，(b) 通过最小化时空伽辽金（弱形式）最小二乘能量得到的 VSL 预测 $u_{\text{VSL}}(x, y, 1)$，以及 (c) 使用解析提升处理边界条件/初始条件的 PINN 预测 $u_{\text{PINN}}(x, y, 1)$。(d–f) $t = 1$ 时的绝对误差热图：(d) 经典切比雪夫–洛巴托配置法 + Crank–Nicolson，(e) VSL，以及 (f) PINN；各结果均与 $u^\star$ 进行比较。

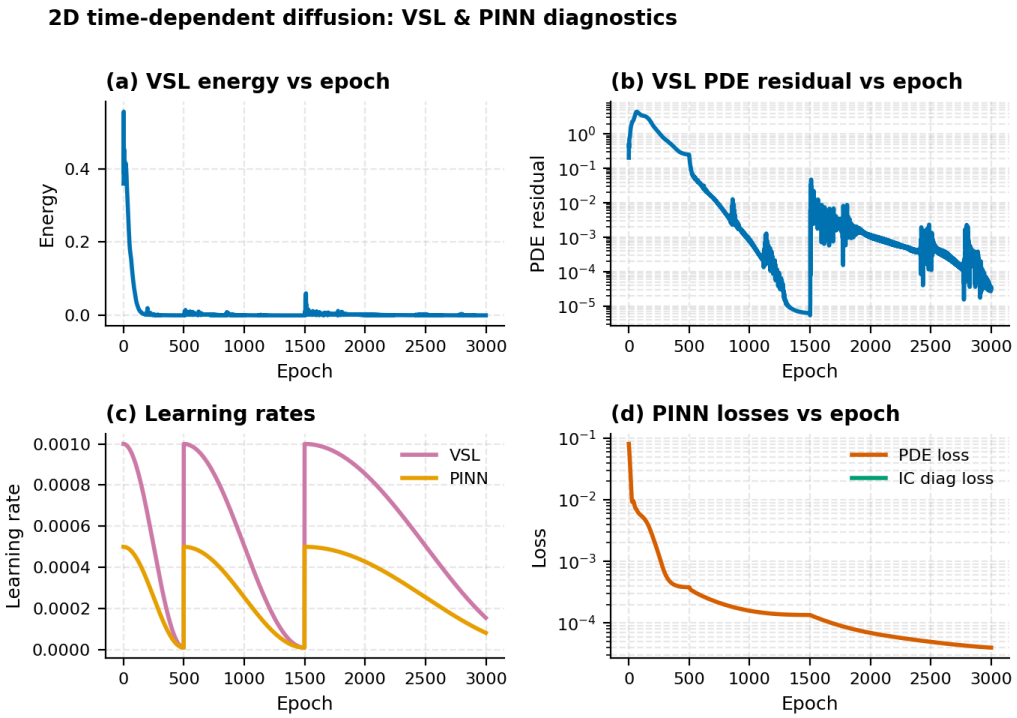


图 14。（弱形式 VSL）二维时变扩散实验（VSL 与 PINN）的训练诊断。(a) VSL 训练能量随训练轮次的变化；该能量对应于系数空间训练所用的弱形式时空伽辽金最小二乘目标函数。(b) 训练过程中，在切比雪夫内部配置点处追踪的 VSL 偏微分方程残差诊断损失（$u_t - \nu \Delta u - f$ 的均方值）。(c) VSL 与 PINN 优化器的余弦衰减重启学习率调度。(d) PINN 训练损失：偏微分方程残差损失和初始条件诊断损失（均采用对数尺度）；边界条件和初始条件通过提升解析地施加。

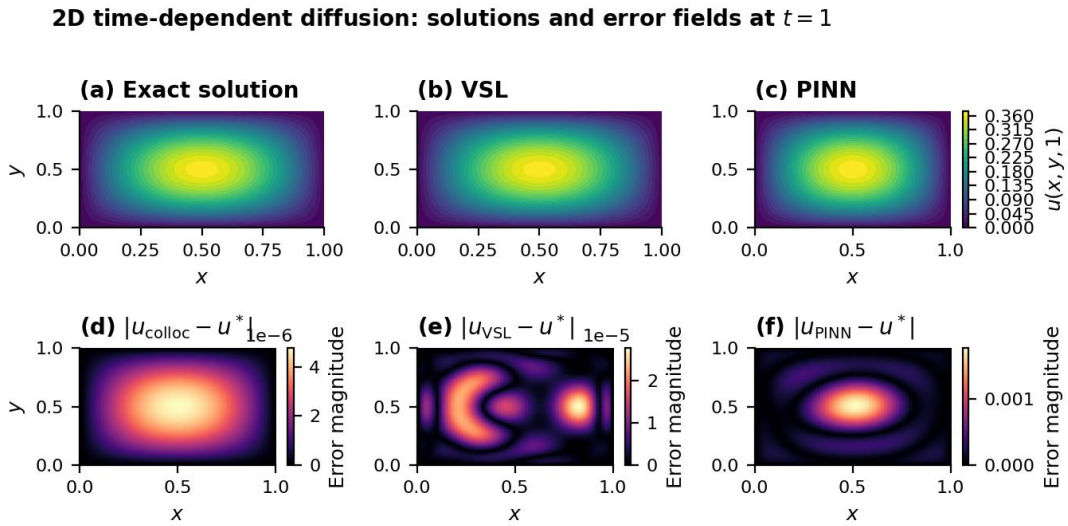


图15。 与图13相同，但针对 VSL 强形式目标。

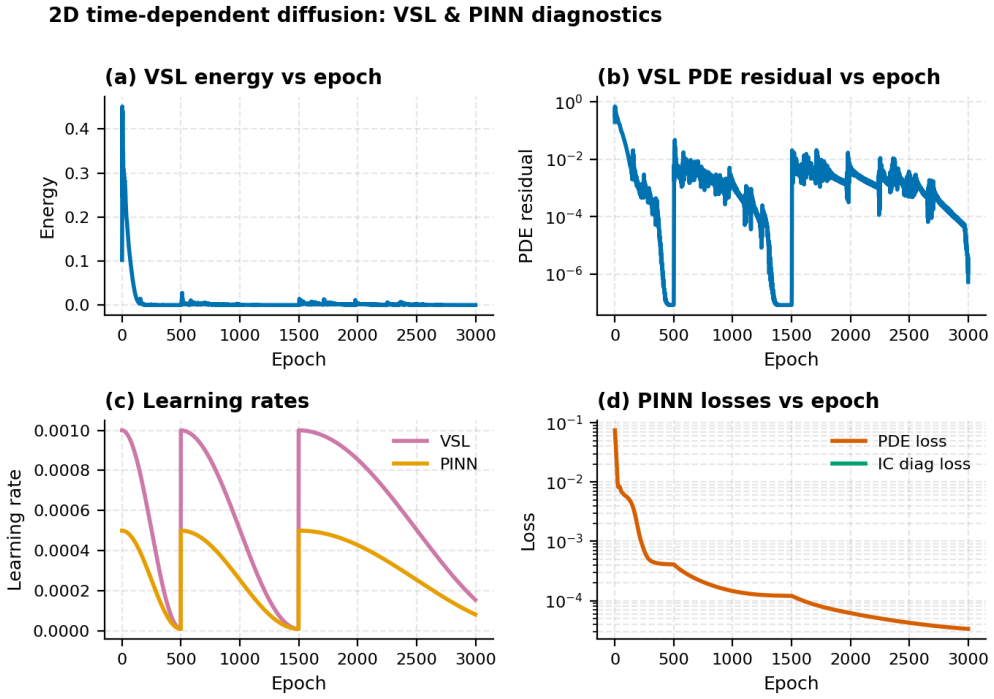


图16。 与图14相同，但针对 VSL 强形式目标。

beha与经典切比雪夫配置点求解器以及直接在物理空间中训练的物理信息神经网络相比 ce.

基准测试 III 的一维（1D）部分考虑单位区间 [58], 上的定常 Burgers 型边值问题

$$\nu u_{xx}(x) - u(x)u_x(x) = f(x), \qquad x \in (0,1), u(0) = u(1) = 0, \tag{92}$$

其中，$\nu > 0$ 是黏性参数，f 由制造解方法选定。具体而言，精确解设定为

$$u^\star(x) = \sin(\pi x), \tag{93}$$

且强迫项定义为 d，使得 $u^\star$ 精确满足强形式偏微分方程和齐次狄利克雷边界条件。Wi th

$$u^\star(x) = \sin(\pi x), \qquad u^\star_x(x) = \pi\cos(\pi x), \qquad u^\star_{xx}(x) = -\pi^2\sin(\pi x), \tag{94}$$

强迫项变为

$$f(x) = \nu u^\star_{xx}(x) - u^\star(x)u^\star_x(x) = -\nu\pi^2\sin(\pi x) - \pi\sin(\pi x)\cos(\pi x). \tag{95}$$

这种制造解构造确保精确解具有已知的闭式表达，从而能够在密集测试网格 [59]上直接计算所有数值方法的 L^2_{rel} 和 L^∞_{rel} 误差。

该基准测试的二维 (2D) 部分将相同策略扩展至单位正方形 $\Omega = (0,1)^2$,–上的稳态 Burgers 型扩散–对流方程

$$\nu\big(u_{xx} + u_{yy}\big)(x,y) - u(x,y)u_x(x,y) - u(x,y)u_y(x,y) = f(x,y), \qquad (x,\ y) \in \Omega, \tag{96}$$

并辅以齐次狄利克雷边界条件

$$u(x,y) = 0, \qquad (x,y) \in \partial\Omega. \tag{97}$$

此处将参考解选为

$$u^\star(x,y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y), \tag{98}$$

通过将其直接代入偏微分方程推导出强迫项。可得

$$\begin{aligned} f(x,y) &= \nu\big(u^\star_{xx} + u^\star_{yy}\big) - u^\star u^\star_x - u^\star u^\star_y \\ &= -2\nu\pi^2 \sin(\pi x)\sin(\pi y) - \pi \sin(\pi x)\sin(\pi y)\,(\cos(\pi x)\sin(\pi y) + \sin(\pi x)\cos(\pi y)). \end{aligned} \tag{99}$$

与一维情形一样，该设置产生了一个解析已知的解，并为比较 ing stron g-以及 GLS弱形式VSL、经典张量积切比雪夫配点法和二维 PINN。

在当前实现中，VSL 能量由在求积节点处评估的强残差构成，并通过加权残差和 Galerkin 投影实现与 GLS 弱形式的联系，而不是组装传统的刚度矩阵。在 VSL框架 中，一维和二维问题都使用满足狄利克雷条件的切比雪夫基在系数空间中进行参数化。在一维情况下，近似解展开为

, pp

$$u_{N_x}(x) = \sum_{k=0}^{N_x-1} c_k \phi_k(x)\ , \tag{100}$$

其中，基函数 $\phi_k(x) = T_{k+2}(2x-1) - T_k(2x-1)$、$k = 0$、……、$N_x - 1$由第一类切比雪夫多项式 T_n构成。根据构造，对于所有 k，$\phi_k(0) = \phi_k(1) = 0$，因此，任意系数向量 $\mathbf{c}$ 都会产生一个严格满足齐次狄利克雷边界条件的场 u_{N_x}。在二维情况下，张量积基由 x 中相同的一维狄利克雷切比雪夫基构成，

y

$$\Phi_{k.\ell}(x,y) = \phi_k^{(x)}(x)\phi_\ell^{(y)}(y), \qquad k = 0,\dots,N_x-1;\ \ell = 0,\dots,N_y-1, \tag{101}$$

从而得到谱近似

$$u_{N_x,N_y}(x,y) = \sum_{k=0}^{N_x-1}\sum_{\ell=0}^{N_y-1} c_{k\ell}\Phi_{k.\ell}(x,y)\,. \tag{102}$$

因此，通过基函数的选择，可在解析上满足 $u = 0$ 在 $\partial\Omega$ 上的边界条件，无需显式引入惩罚项或边界损失。

基于这一谱表示，VSL 定义了如下形式的强残差 g

$$r(x;\mathbf{c}) = \nu u_{N_x,xx}(x;\mathbf{c}) - u_{N_x}(x;\mathbf{c})u_{N_x,x}(x;\mathbf{c}) - f(x), \tag{103}$$

在一维中，以及

$$r(x,y;\mathbf{c}) = \nu\left(u_{N_x,N_y,xx} + u_{N_x,N_y,yy}\right)(x,y;\mathbf{c}) - u_{N_x,N_y}(x,y;\mathbf{c})\left(u_{N_x,N_y,x} + u_{N_x,N_y,y}\right)(x,y;\mathbf{c}) - f(x,y), \tag{104}$$

在二维中。这些残差在高斯–勒让德求积节点处求值，所需导数则通过采用嵌套磁带结构的自动微分获得。随后考虑两种变分能量。强形式 VSL 能量通过最小化残差的平方 L^2 范数来实现，

$$E_{\text{strong}}(\mathbf{c}) = \int_0^1 \big(r(x;\mathbf{c})\big)^2 dx\,, \qquad E_{\text{strong}}(\mathbf{c}) = \iint_\Omega \big(r(x,y;\mathbf{c})\big)^2 dxdy\,, \tag{105}$$

用高斯–勒让德求积近似为g q

$$E_{\text{strong}}(\mathbf{c}) \approx \sum_{q_x=1}^{Q_x} w_{q_x}\left(r\big(x_{q_x};\mathbf{c}\big)\right)^2, \qquad E_{\text{strong}}(\mathbf{c}) \approx \sum_{q_x=1}^{Q_x}\sum_{q_y=1}^{Q_y} w_{q_x}w_{q_y}\left(r\left(x_{q_x},y_{q_y};\mathbf{c}\right)\right)^2. \tag{106}$$

与此同时，GLS 弱形式 VSL 能量定义为：将强残差投影到谱基上，并最小化所得系数向量的平方范数。在一维情形下，定义

$$R_k(\mathbf{c}) = \int_0^1 r(x;\mathbf{c})\phi_k(x)dx\,, \tag{107}$$

弱形式能量为

$$E_{\text{weak(GLS)}}(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{N_x-1}(R_k(\mathbf{c}))^2\,, \tag{108}$$

积分再次通过求积近似。在二维中，Galerkin 残差

$$R_{k.\ell}(\mathbf{c}) = \iint_{\Omega} r(x,y;\mathbf{c})\Phi_{k.\ell}(x,y)dxdy\,, \tag{109}$$

在张量- 乘积高斯–勒让德节点，以及弱能 rgy is

$$E_{\text{weak(GLS)}}(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{N_x-1}\sum_{\ell=0}^{N_y-1}(R_{k.\ell}(\mathbf{c}))^2\,. \tag{110}$$

在强形式和 GLS 弱模式下，系数向量 $\mathbf{c}$ 被视为可训练参数向量，并使用 Adam 和余弦衰减重启学习率调度进行优化。另设一个诊断损失，用于监测在切比雪夫内部配置节点处计算的强残差均方值，从而独立衡量学习得到的系数在能量计算所用求积点之外满足偏微分方程的程度。

用于 1D 对比的经典参考求解器采用切比雪夫–洛巴托配置法，并使用阻尼牛顿迭代。将定义在 $[-1,1]$ 上的切比雪夫–洛巴托节点 $z_k = \cos(\pi k/N)$ 映射至物理坐标 $x = (z+1)/2$，并组装标准的 Trefethen 风格微分矩阵，以近似 d/dx 和 d^2/dx^2。未知量为位于 $j = 1, \dots, N-1$处的内部节点值 $u(x_j)$，而边界值 $u(0) = u(1) = 0$ 则被精确施加。在每个节点处，离散残差都满足强形式偏微分方程，

$$r_j = \nu(u_{xx})_j - u_j\,(u_x)_j - f_j, \tag{111}$$

并利用乘积法则和微分矩阵的结构解析地构造该非线性系统的雅可比矩阵。采用带有简单回溯线搜索的阻尼牛顿法，求解内部自由度。收敛后，使用重心切比雪夫插值将配点解插值到密集测试网格上，以评估误差并绘图。在二维情形下，同样的方法扩展到 x 和 y上的张量积切比雪夫–洛巴托网格。组合各个方向的微分矩阵，以近似 u_x、u_y、u_{xx}、u_{yy}，并在内部网格点处强制满足非线性偏微分方程，同时在所有边界上施加 $u = 0$。得到的规模较大但具有结构的非线性系统仍采用阻尼牛顿法求解，收敛后的网格解则插值到均匀测试网格上，以便与 VSL 和物理信息神经网络进行比较。

基准测试 III 中的物理信息神经网络基线采用多层感知机，通过最小化物理空间中的强形式残差均方进行训练，并通过边界提升解析地施加齐次狄利克雷边界条件。在一维情形下，构造一个标量网络 $v_\theta(x)$，并将 h sical 解表述为

$$u(x) = x(1-x)v_\theta(x), \tag{112}$$

这保证了对于所有网络参数，$u(0) = u(1) = 0$。偏微分方程损失定义为

$$\mathcal{L}_{\text{PINN}}(\theta) = \mathbb{E}_x\left[\left(\nu u_{xx}(x) - u(x)u_x(x) - f(x)\right)^2\right], \tag{113}$$

其中导数通过自动微分计算，期望值则通过切比雪夫内部配置节点进行近似。可以监测额外的诊断边界损失，但对于提升表示，其值仍可忽略。在二维情况下，使用一个具有两个输入的网络 $v_\theta(x,y)$，而提升表示

$$u(x,y) = x(1-x)y(1-y)v_\theta(x,y), \tag{114}$$

在全部四条边上施加齐次狄里克雷条件。二维情况下的物理信息神经网络损失为

$$\mathcal{L}_{\text{PINN}}(\theta) = \mathbb{E}_{(x,y)}\left[\left(\nu\left(u_{xx}+u_{yy}\right) - uu_x - uu_y - f(x,y)\right)^2\right], \tag{115}$$

同样在切比雪夫内部配置点处进行近似。在两个维度中，网络均使用 Adam 和余弦衰减重启进行训练，并记录损失历史以供分析。

三类求解器之间的比较通过定量和定性诊断共同进行。定量方面，所有方法均在稠密均匀网格上（1D 中为 400 个点，2D 中为 (64×64)）与构造精确解进行比较。报告 VSL、经典配置法和物理信息神经网络的 L^2_{rel} 和 L^∞_{rel} 范数。定性方面，基准测试采用一组诊断图：1D 中叠加的解剖面、对数尺度的逐点绝对误差曲线、VSL 能量和强残差历史、物理信息神经网络损失历史，以及学习得到的切比雪夫系数 c_k 的谱。在 2D 中，通过对解和误差场进行等高线及热图可视化，并展示固定 y 处的中线切片，可以直观评估各方法在整个区域内准确复现精确解结构的能力。

我们从一维Burgers方程开始数值研究（见图17和图18）。对于具有制造解 $u_{\text{exact}}(x) = \sin(\pi x)$ 的定常一维Burgers型边值问题，我们对三种求解器进行了基准测试：(i) 在系数空间中使用具有 $N_x = 16$ 模态的满足狄利克雷条件的切比雪夫基的VSL；(ii) 在 $N_{\text{spec}} = 32$ 个节点上采用阻尼牛顿求解器的经典切比雪夫–洛巴托配置法；以及(iii)边界提升物理信息神经网络（宽度为64、深度为4的Keras多层感知器）。在GLS弱形式VSL变体中，优化目标是最小化最小二乘Galerkin残差。训练日志显示，GLS弱形式能量从初始化时的 $E \approx 1.836$ 大幅下降至第2900轮训练时的 $E \approx 3.05\times 10^{-4}$，同时诊断强残差损失也从初始的5.859降至第2900轮训练时的2.253×10^{-4}。从定量结果看，GLS弱形式取得了 $L^2_{\text{rel}} = 7.605\times 10^{-5}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} = 1.513\times 10^{-4}$ 的相对误差。对于紧凑的谱表示 $N_x = 16$ 而言，这一精度表现良好，并证实即使不直接强制诊断强残差，最小化投影（Galerkin）残差也足以恢复准确解。经典配置法

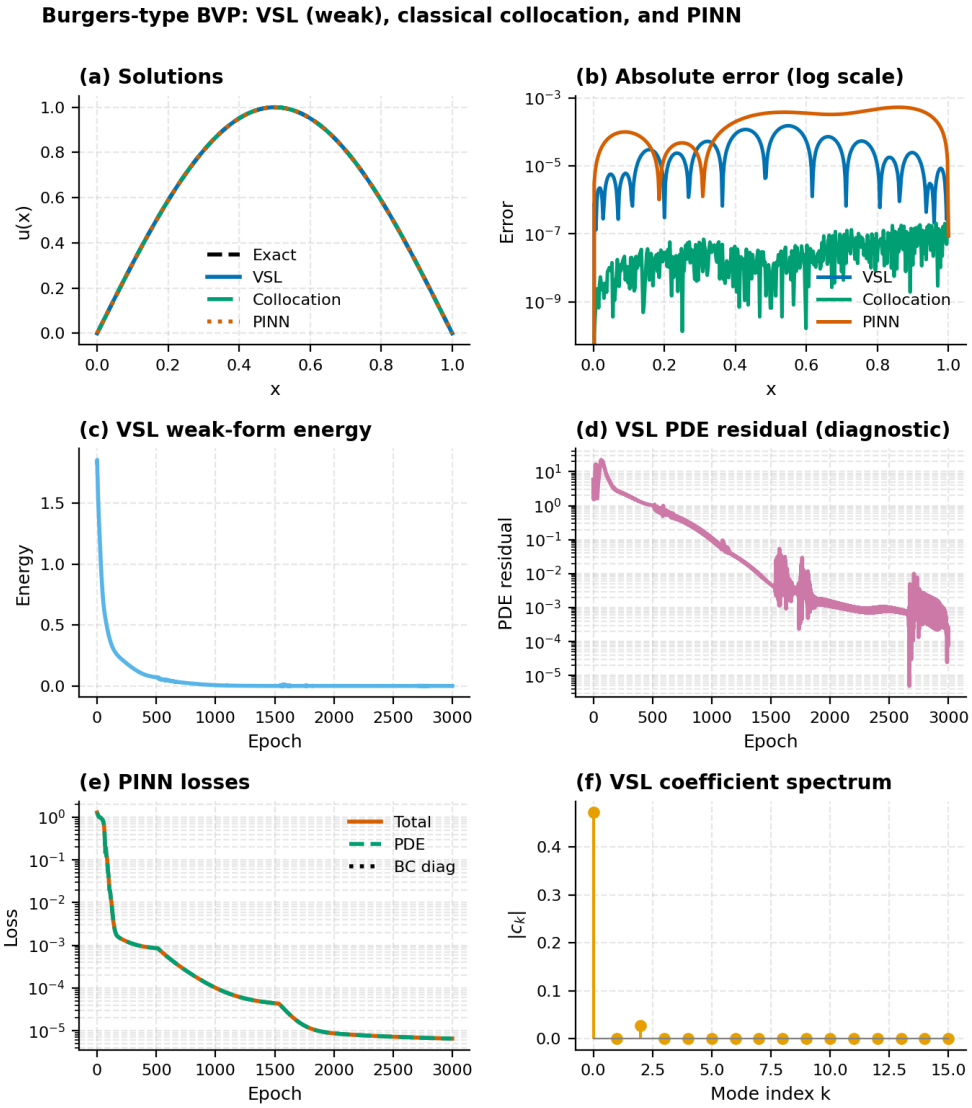


图 17。一维 Burgers 型边值基准测试概览，对比 VSL、经典切比雪夫配置法和 PINN。(a) 密集网格（400 个点）上的数值解：精确制造解 $u(x) = \sin(\pi x)$，与 VSL（满足狄利克雷条件的切比雪夫基，$N_x = 16$）、经典切比雪夫–洛巴托配置法 $N_{\text{spec}} = 32$以及边界提升 PINN（宽度为 64、深度为 4 的 MLP）。(b) 三种方法的逐点绝对误差 $|u_{\text{num}} - u_{\text{exact}}|$，采用对数刻度。(c) VSL 的 GLS 弱形式目标函数 $E_{\text{weak(GLS)}}$(c) 训练曲线。(d) 训练期间在内部切比雪夫点处评估的 VSL 强形式残差损失诊断（对数尺度）。(e) PINN 训练损失（总损失、偏微分方程残差损失，以及由于解析边界提升而接近于零的边界条件诊断 $u(x) = x(1-x)v(x)$。(f) 学得的 VSL 切比雪夫系数 $|c_k|$ 的幅度谱，展示了谱衰减。

提供了最准确且速度最快的基线结果：$L^2_{\text{rel}} = 7。653 \times 10^{-8}$，以及$L^\infty_{\text{rel}} = 2。038 \times 10^{-7}$。当牛顿求解器收敛时，这与光滑制造解所应具有的谱精度相一致。PINN基线平稳收敛至偏微分方程损失 $\approx 6。66 \times 10^{-6}$，在第2900轮训练时达到$L^2_{\text{rel}} = 4。186 \times 10^{-4}$，$L^\infty_{\text{rel}} = 5。296 \times 10^{-4}$。边界提升确保边界条件诊断损失在整个过程中基本保持为零，从而将学习负担限定在内部偏微分方程残差上。总体而言，对于此配置，GLS弱形式VSL结果在精度方面明显优于PINN，但在精度和运行时间两方面仍远逊于经典配置法。

我们使用强形式 VSL 重复了相同的 Burgers 型基准测试，其中优化的目标函数是残差能量 E_{strong} 的求积近似，解则再次由满足狄利克雷条件的切比雪夫基函数$N_x = 16$参数化。在这种设置下，训练动态显示，强残差能量总体上从初始的 $E \approx 1.721$ 降至第 2900 个训练轮次时的 $E \approx 5.234 \times 10^{-3}$。诊断用的偏微分方程残差损失也有所下降，但出现了明显的振荡，尤其是在余弦重启事件之后（例如，在第 1600 个训练轮次附近，偏微分方程损失骤增，随后在之后几个周期中持续波动）。这种行为是热重启的典型特征。在解的精度方面，强形式 VSL 达到了 $L^2_{\text{rel}} = 5.215 \times 10^{-4}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} = 6.596 \times 10^{-4}$。强形式目标函数得到的最终结果明显不如 GLS 弱形式 VSL 情形精确

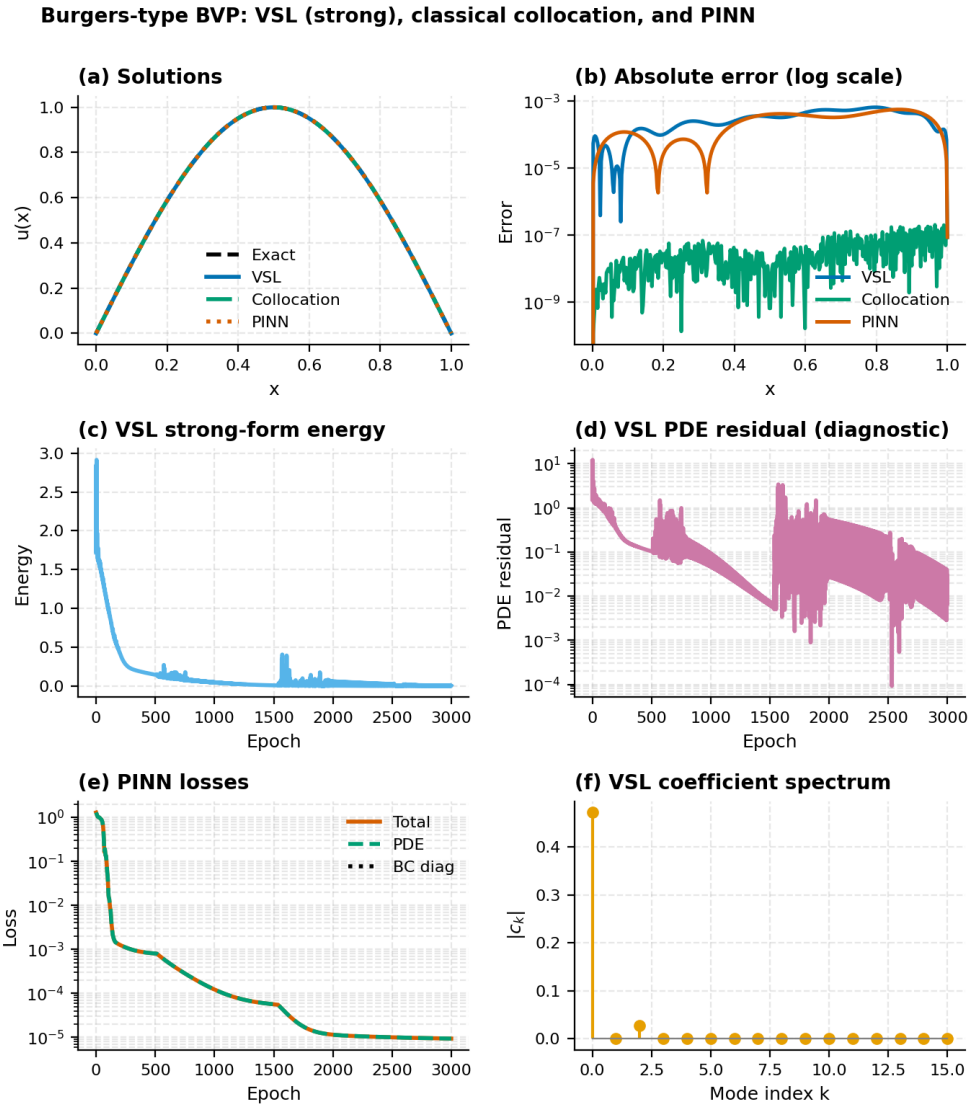


图18。 与图17相同，但针对 VSL 强形式目标。

，精度大约差一个数量级（L^2_{rel}）。这一结果与以下观察一致：逐点（强形式）最小二乘残差最小化可能会过度强调局部化残差结构，并且对优化超参数、重启时机以及求积点／配置点的分布更加敏感；而 GLS 弱形式通过将残差投影到基函数上，实际上起到了“滤波”作用，因此对于光滑解和中等数量的模态，稳定性可能更好。

两个基线的表现与弱形式案例中的测试相似。经典切比雪夫配置法再次达到了接近机器精度的准确度 $L^2_{\text{rel}} = 7.653 \times 10^{-8}$，$L^\infty_{\text{rel}} = 2.038 \times 10^{-7}$，进一步表明，对于这个光滑的一维制造问题，传统的谱牛顿求解仍然是参考方法。PINN 达到了

$L^2_{\text{rel}} = 4\,466 \times 10^{-4}$ $L^\infty_{\text{rel}} = . , . ,$ 且边界

$5\,678 \times 10^{-4}$

提升使边界条件误差保持在可忽略的水平。有趣的是，在本次运行中，PINN 在 L^2_{rel} 上略胜于强形式 VSL，这表明强形式系数学习并非必然更优，必须谨慎调参。

我们在 $\Omega = (0,1)^2$ 上对三个求解器进行了基准测试，问题为带齐次狄利克雷数据、黏性系数为 $\nu = 0.1$ 的二维稳态Burgers型边值问题，并使用精确场 $u^\star(x,y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$ 定义强迫项。比较对象包括：(i) 系数空间中的 VSL，采用满足狄利克雷条件的切比雪夫张量基，并使用 $N_x = N_y = 8$，通过 GLS 弱能量或强形式（逐点残差）能量进行训练；(ii) 采用 $(N_x = N_y = 24)$、通过阻尼牛顿法求解的经典切比雪夫–洛巴托配置离散；以及 (iii) 使用 (64×4) tanh 多层感知机的边界提升物理信息神经网络。误差在均匀的 (64×64) 测试网格上报告。图 19–22 展示了最终场（解和绝对误差）、位于 $(y \approx 0.5)$ 处的中线剖面以及训练诊断。

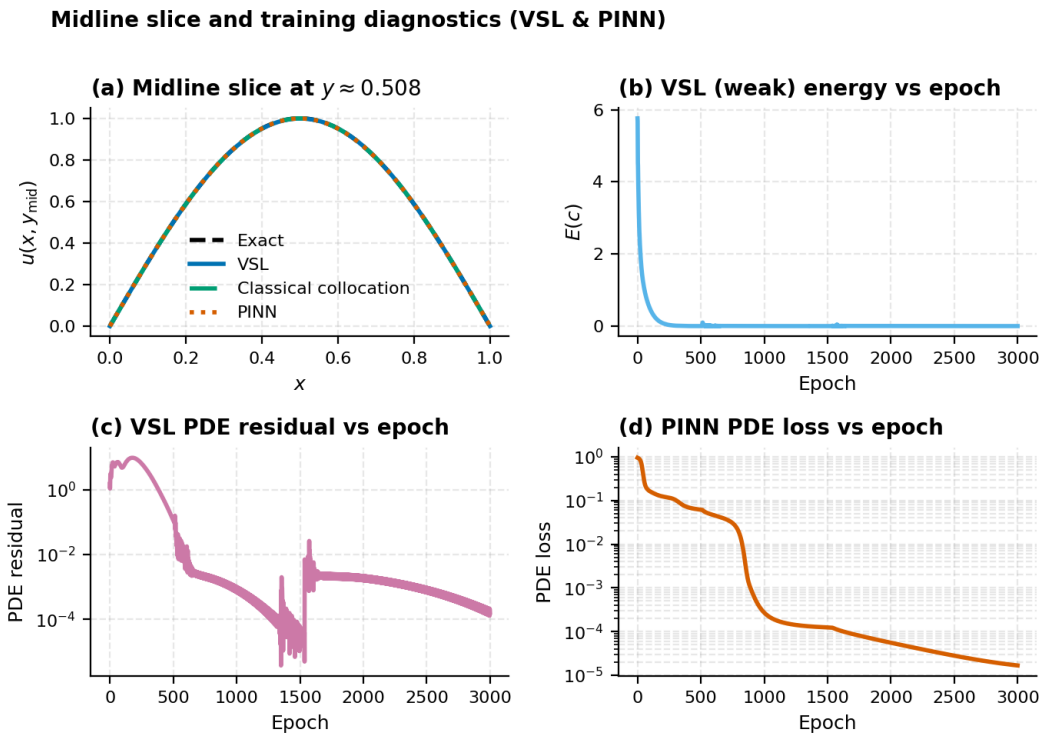


图 19。 VSL（GLS弱能量）。中线验证与训练诊断 $\nu = 0.1$。（a）在 $y_{\mathrm{mid}} \approx 0.5$ 处的中线切片 $u(x, y_{\mathrm{mid}})$，将 VSL、经典配置法和 PINN 与精确解 $u^{\star}$进行比较。（b）VSL 的 GLS弱能量训练历史。（c）在内部诊断配置点上评估的 VSL 强残差均方值（对数尺度）。（d）同一配置点集合上的 PINN 偏微分方程损失（对数尺度）。

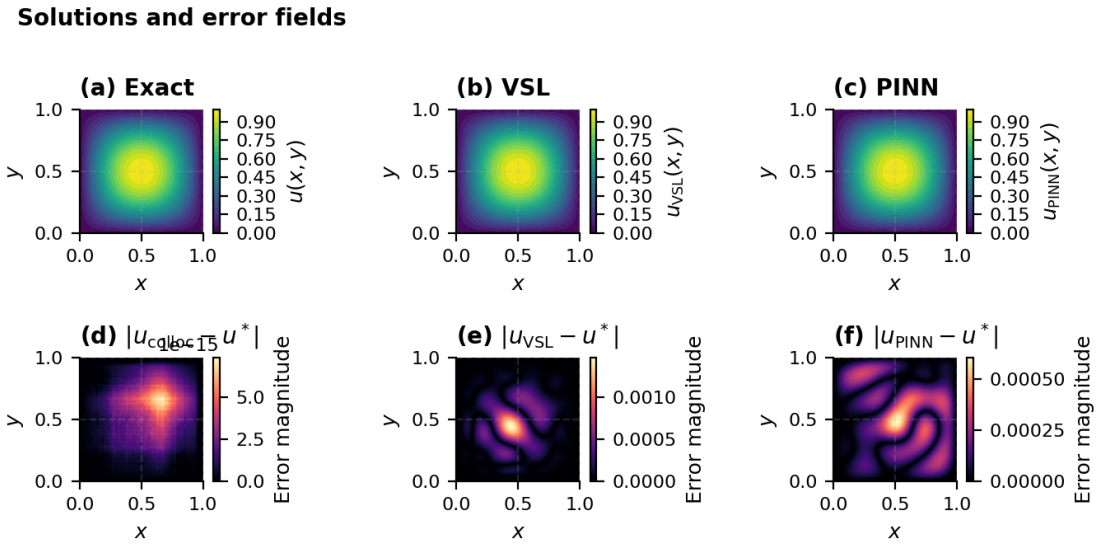


图 20。 VSL（GLS弱能量）。二维定常 Burgers 型问题（$\nu = 0.1$）的解与误差场。顶行：填充等高线图分别表示（a）构造精确解 $u^{\star}(x, y) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$，（b）通过最小化 GLS弱能量获得的 VSL 解 u_{VSL}，以及（c）边界提升物理信息神经网络解 u_{PINN}。底行：均匀测试网格上的绝对误差场——（d）经典切比雪夫–洛巴托配置法误差 $|u_{\mathrm{colloc}} - u^{\star}|$，（e）VSL 误差 $|u_{\mathrm{VSL}} - u^{\star}|$，以及（f）PINN 误差 $|u_{\mathrm{PINN}} - u^{\star}|$。

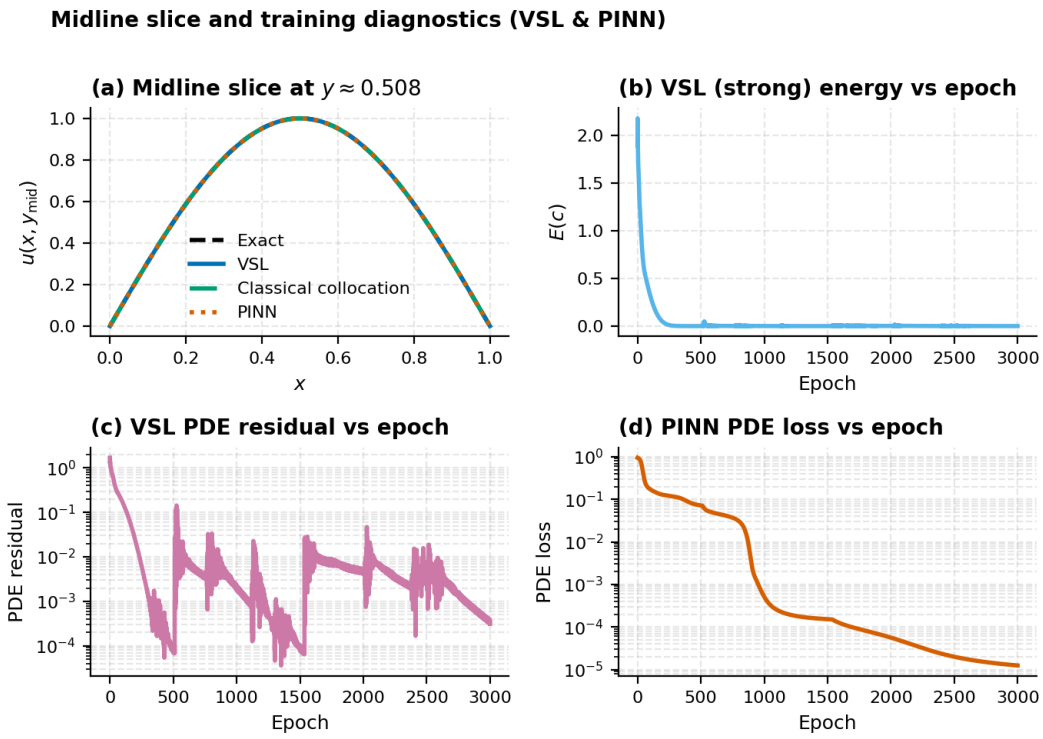


图 21。 与图 19相同，但使用 VSL 强形式目标。

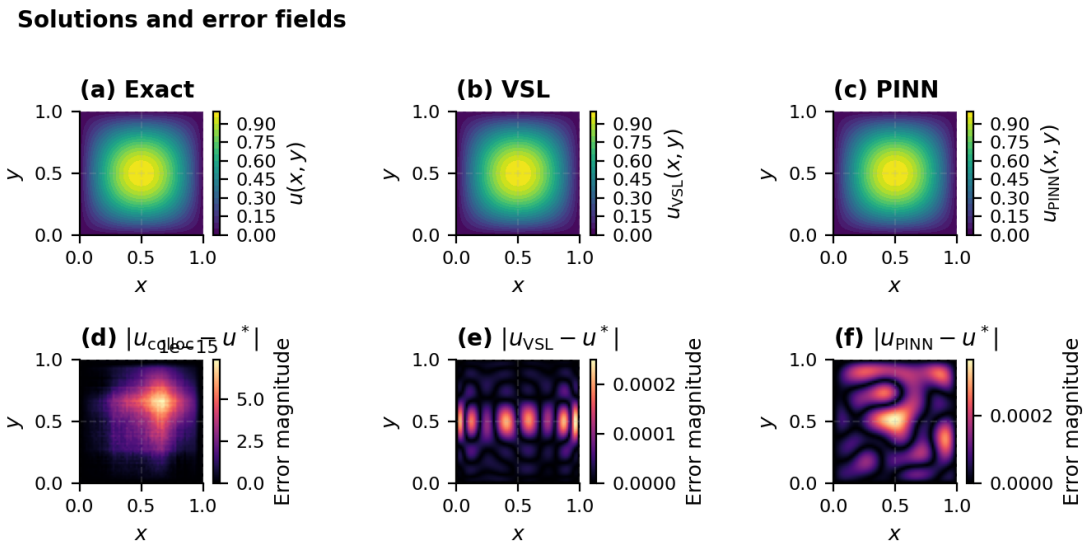


图 22。 与图 20相同，但使用 VSL 强形式目标。

在 GLS 弱形式配置中，VSL 最小化投影（Galerkin）残差向量的平方范数，而不是直接惩罚逐点残差。训练历史显示，弱形式能量 $E_{\text{weak(GLS)}}$ 在初期迅速下降了几个数量级，随后出现与余弦衰减重启相关的非单调变化（在训练轮次 ~ 600 和 ~ 1600 附近可见跳变）。在内部配置点测得的诊断性偏微分方程残差到训练结束时下降至 $10^{-4} - 10^{-3}$ 范围。在测试网格上，GLS 弱形式 VSL 达到 $L^2_{\text{rel}} = 5.696 \times 10^{-4}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} = 1.470 \times 10^{-3}$。

在强形式配置中，VSL 最小化残差最小二乘能量的求积近似。该目标函数与逐点偏微分方程满足性更加直接地一致，并且在谱模型规模相同的情况下，精度有明显提升。训练曲线同样显示出重启引起的非单调性，但该方法在测试网格上达到了显著更小的最终解误差：$L^2_{\text{rel}} = 1.166 \times 10^{-4}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} = 2.513 \times 10^{-4}$。

经典切比雪夫–洛巴托配置法在测试网格上与制造解达到接近机器精度的一致性：$L^2_{\text{rel}} \approx 4.425 \times 10^{-15}$ 和 $L^\infty_{\text{rel}} \approx 7.332 \times 10^{-15}$。对于光滑的制造解而言，这是预期结果

结合高阶谱离散化，并对所得非线性代数系统进行牛顿法求解。物理信息神经网络的偏微分方程损失稳步收敛，在各类学习方法中展现出有竞争力的精度。在弱形式算例中，物理信息神经网络达到$L^2_{\mathrm{rel}} \approx 3。676 \times 10^{-4}$ 和 $L^{\infty}_{\mathrm{rel}} \approx 6。056 \times 10^{-4}$，而在强形式算例中，其结果提升至 $L^2_{\mathrm{rel}} \approx 2。364 \times 10^{-4}$ 和 $L^{\infty}_{\mathrm{rel}} \approx 3。670 \times 10^{-4}$。

9. 贡献总结、关键经验与未来工作

本文介绍并系统评估了 VSL，将其作为一种用于变分偏微分方程求解器的机器学习框架；该框架明确建立在经典泛函分析形式之上，同时利用现代优化与自动微分工具。从本质上看，VSL 回归偏微分方程离散的变分根基，构造由强形式最小二乘表述或 Galerkin 型弱残差表述导出的时空能量。在后一种情况下，根据基准问题和算子结构的不同，“弱”残差可通过适当的分部积分弱形式（例如针对强制椭圆／抛物算子）实现，也可通过将强残差投影到试探基上得到的矩残差投影实现。未知解 u 通过张量积谱基进行参数化，并在空间中解析地满足齐次狄利克雷边界条件：u_N 表示为满足边界条件的空间基函数与时间切比雪夫多项式的线性组合，相应的谱系数$\mathbf{c}$ 则被视为可训练参数。核心目标函数的形式为 $\mathcal{J}(\mathbf{c}) = E_{\mathrm{strong/weak}}(\mathbf{c}) + \lambda_{\mathrm{IC}}\,\mathrm{L_{IC}}(\mathbf{c}) + \lambda_{\mathrm{reg}}\|\mathbf{c}\|_2^2$，其中

$E_{\mathrm{strong/weak}}$ $\mathbf{c}$ IC $\mathbf{c}$ λ_{IC} ( ) 编 $\lambda_{\mathrm{reg}} > 0$

码时空中的偏微分方程约束，L ( ) 在存在初始条件时对其进行施加，而 ， 则分别对初始条件项和正则化项进行加权。在这一框架下，VSL 使用标准深度学习框架实现，通过自动微分组装残差和梯度，并采用配备带重启的余弦衰减学习率调度的基于梯度的方法进行优化。该框架在三类具有代表性的基准问题类别上进行了评估：一维和二维椭圆型泊松问题；以完全时空方式处理的一维和二维时变扩散方程；以及引入非线性输运效应的 Burgers 型扩散–对流问题。在每种情况下，VSL 都与经典切比雪夫谱配置求解器以及采用解析边界—初始条件提升的物理信息神经网络进行了比较，从而形成了一套连贯的实验体系，阐明了相对于传统求解器和场空间机器学习方法而言，系数空间学习的特点。

本研究得出了若干方法论方面的贡献。首先，在系数空间中构造强形式和伽辽金型残差能量，并结合张量积高斯–勒让德求积，为构建与自动微分完全兼容的变分损失提供了一套系统方法。这套计算机制适用于椭圆型、抛物型和轻度非线性偏微分方程；不同基准测试之间仅微分算子和强迫项定义有所变化。其次，在空间方向使用满足狄利克雷条件的切比雪夫基，可通过解析方式施加齐次边界条件：对于任意系数向量 $\mathbf{c}$，逼近均按构造满足给定的空间边界条件，并属于预期的试探空间。此外，多项式基具有足够的光滑性，能够以一致的逐点方式或 L^2 方式计算强形式能量所需的导数（例如 u_t、 u_{xx}、 u_{yy}）。这消除了边界惩罚项，也缓解了物理信息神经网络训练中常见的棘手损失平衡问题。第三，用于时变问题的时空谱参数化无需显式时间步进，而是将演化问题重新表述为系数空间上的一次变分最小化。这有别于将空间离散与时间积分分开的经典时间推进格式，也不同于许多未显式控制逼近空间的物理信息神经网络表述。最后，通过比较 VSL、物理信息神经网络和经典切比雪夫配置法（包括 Crank–Nicolson 型基线方法），本研究为在匹配的制造解设定下解读精度、条件性和优化行为提供了结构化参考；在这些设定中，误差和诊断指标均可可靠量化。

数值实验为 VSL 类方法提供了若干经验教训和实用建议。首先，在针对谱分辨率和求积公式进行适当匹配，并将优化充分推进至接近驻定状态时，对于光滑问题，VSL 的精度可以媲美经典高阶谱求解器；在有利的条件下，还能非常接近其精度。

其次，强形式与弱形式残差能量之间的区别在实践中很重要。对于泊松问题和扩散问题，强形式最小二乘能量易于实现，通常也能实现稳健收敛，但涉及高阶导数，并且可能对求积精度和条件性更加敏感。伽辽金型弱残差能量通常只涉及一阶导数（经分部积分后），对于强制椭圆型和抛物型算子，尤其是底层双线性型对称且强制时，往往具有更好的数值表现。实验表明，这两种表述在 VSL 中均可行，而更合适的选择取决于偏微分方程类型、正则性、导数阶数，以及在所选区域上能够达到的求积精度。

第三个启示涉及全局时空表示在时变问题中的作用。对于二维扩散方程，完整的时空 VSL 形式避免了显式时间步进，并构造出一个在整个时空柱体上全局有效的近似$u_N(x, y, t)$。这一全局视角与优化视角自然契合：训练过程最小化一个汇总所有时间点残差信息的单一能量，而不是逐步传播

信息。当解较为光滑且时间区间适中时，与经典的切比雪夫–洛巴托空间离散结合克兰克–尼科尔森时间步进相比，该方法能够达到具有竞争力的精度；此外，训练过程中能量和诊断残差的演化还提供了有价值的收敛指标。与此同时，实验表明，当存在显著的时间刚性或多个彼此分离的时间尺度时，时空–时间谱表示可能需要谨慎进行时间基选择和正则化；在此类情况下，可能需要更多的时间模态，且优化景观会变得更加微妙。因此，在实践中，应将时间谱分辨率视为可调超参数，并依据能量衰减、独立配点集上的残差监测以及敏感性研究等诊断结果进行调整。

第四个经验是，在所考察的情形下，VSL 中的系数空间学习为过度参数化的场空间物理信息神经网络提供了一种可控且易于解释的替代方案。由于 VSL 参数化关于**c** 是线性的，且特征映射（谱基）固定并可通过解析方式确定，因此非线性完全源自偏微分方程残差及其对**c**的依赖。这使得优化问题类似于结构化特征空间中的确定性非线性最小二乘，而非深度神经网络参数化所对应的高度非凸景观。从经验结果来看，VSL 的训练动态更可预测，对宽度、深度和激活函数选择等架构超参数的敏感性也更低，因为这些超参数在其设计中并不存在。相比之下，物理信息神经网络基线通常需要更仔细的调参，才能实现相当的残差降低；在 Burgers 型问题中尤其如此，因为非线性输运会加剧梯度病态。同时，实验也再次印证了一项重要的权衡：原则上，物理信息神经网络无需显式的基函数设计，在复杂几何和局部特征方面具有更大的灵活性；而 VSL 的性能则与所选谱空间是否合适密切相关。这表明，VSL 尤其适合作为简单或中等复杂区域上的高阶、可解释求解器，也可作为强有力的基准测试方法；而当几何形状、系数或局部特征使简单的全局基难以适用时，物理信息神经网络及其他场空间模型仍颇具吸引力。

第五点经验涉及优化与学习率调度。通过在标准机器学习框架中实现 VSL，并采用带重启的余弦衰减调度，本研究表明，为深度学习开发的优化实践也可以有效应用于系数空间中的变分偏微分方程求解器。这类调度有助于在早期更充分地探索目标函数，并减少在平台状区域中的停滞，同时仍能逐步缩减步长，以支持后期精细化。在各项基准测试中，这些调度有助于 VSL 和物理信息神经网络模型稳定收敛；由于 VSL 的参数数量较少且目标函数景观更平滑，它通常能以更少的有效训练轮次收敛。不过，Burgers 型实验表明，非线性可能导致慢衰减阶段，并增加对调度参数的敏感性，尤其是在使用强形式能量时。因此，实践中建议将 VSL 与对能量、残差和学习率轨迹进行的稳健诊断监测相结合，并将调度参数（初始学习率、重启频率和最小学习率比例）视为重要的超参数；针对不同偏微分方程类别，可能需要对这些参数进行适度调整。

本研究的发现为未来研究开辟了若干方向。一个自然的延伸方向是超越矩形区域和齐次系数，转向更复杂的几何形状和非均匀介质。若要在实现这一目标的同时保留“构造即满足边界条件”的理念，可能需要采用映射坐标、分片局部基或受约束迹空间，并可将其与区域分解相结合。引入曲线坐标映射、谱元，或将局部谱基与有限元或有限体积组件相结合的混合离散，有望在保留系数空间学习范式的同时扩大适用范围。相关地，参数化偏微分方程和不确定性量化 [69-71] 是一个重要的应用领域：我们可以设想学习从参数空间到系数向量的映射，从而将 VSL 作为一个具有变分理论基础的构建模块，融入算子学习架构。

另一个有前景的方向涉及自适应性和基扩充。本研究采用固定的张量积切比雪夫基，对于光滑解十分有效，但遇到局部结构、边界层或近间断时，效率可能会降低。通过层次谱族、多分辨率表示，或由残差指标驱动的局部加密，将自适应基选择纳入 VSL，有望显著拓展该方法的适用范围。这种自适应性也带来了算法方面的问题：如何在训练过程中扩展参数空间，同时保持数值稳定性；此外，还引出了理论问题，即基扩充、系数正则化与学习率调度之间如何相互作用。

从理论角度来看，当能量 $J(\mathbf{c})$ 通过基于梯度的优化最小化，而不是通过直接或迭代线性代数方法求解时，VSL收敛性仍有进一步深入分析的空间。对于线性椭圆型和抛物型问题，在标准假设下，强形式能量和弱形式能量都是凸二次函数，经典理论保证了确定性梯度下降在满足适当步长条件时能够收敛。相比之下，自适应优化器、随机小批量处理、额外损失项或非线性算子（如 Burgers型问题）的使用，促使我们对实际收敛行为和停止准则进行更精细的分析。在现实优化机制下建立收敛速率界、量化学习率调度对误差的影响，以及将系数空间迭代序列与经典伽辽金解联系起来，都是值得严格研究的方向。

最后，VSL最好被视为偏微分方程求解器设计空间中的一个互补方向——连接经典变分离散化与现代机器学习工具——而不应被视为成熟数值格式或物理信息神经网络框架的通用替代方案。它的优势在于与变分理论的紧密结合、高阶谱逼近空间，以及与能够提供自动微分、稳健优化器和调度工具的机器学习软件栈的兼容性。因此，VSL为科学计算领域人工智能的未来发展提供了一个有用的参考点：它为构建变分系数空间求解器提供了具体且可复现的方案；支持在共同的基准问题类别上与场空间物理信息神经网络及经典谱格式进行公平比较；并展示了如何以有原则的方式结合数值分析与深度学习概念。未来若将VSL扩展到更广泛的偏微分方程类别、完善其数值分析，并探索融合谱表示与学习组件的混合架构，有望加深我们对机器学习如何助力设计精确、稳健且可解释的偏微分方程求解器的理解。

代码可用性

本研究用于生成数据、图表和分析的所有代码，以及实现细节，均已公开发布于 Zenodo 存储库（https://doi.org/10.5281/zenodo.18156105）[72]。

参考文献

[1] L. C. Evans，《偏微分方程》，第2版（美国罗得岛州普罗维登斯：美国数学学会，2010）。[2] W. A. Strauss，《偏微分方程：导论》，第2版（美国新泽西州霍博肯：Wiley，2008）。[3] R. J. LeVeque，《常微分方程与偏微分方程的有限差分方法》（美国宾夕法尼亚州费城：SIAM，2007）。[4] J. W. Thomas，《偏微分方程数值方法：有限差分方法》（美国纽约州纽约：Springer，1995）。[5] S. V. Patankar，《数值传热与流体流动》（美国纽约州纽约：Hemisphere，1980）。[6] H. K. Versteeg 和 W. Malalasekera，《计算流体力学导论：有限体积法》，第2版（英国哈洛：Pearson，2007）。[7] O. C. Zienkiewicz 和 R. L. Taylor，《有限元方法：基础与基本原理》，第7版（英国牛津：Butterworth-Heinemann，2013）。[8] S. C. Brenner 和 L. R. Scott，《有限元方法的数学理论》，第3版（美国纽约州纽约：Springer，2008）。[9] P. G. Ciarlet，《椭圆型问题的有限元方法》（荷兰阿姆斯特丹：North-Holland，1978）。[10] A. Quarteroni、R. Sacco 和 F. Saleri，《数值数学》，第2版（德国柏林：Springer，2007）。[11] C. Canuto、M. Y. Hussaini、A. Quarteroni 和 T. A. Zang，《谱方法：单一区域中的基础》（德国柏林：Springer，2006）。[12] J. P. Boyd，《切比雪夫与傅里叶谱方法》，第2版（美国纽约州米尼奥拉：Dover，2001）。[13] L. N. Trefethen，《MATLAB中的谱方法》（美国宾夕法尼亚州费城：SIAM，2000）。[14] D. Gottlieb 和 S. A. Orszag，《谱方法的数值分析：理论与应用》（美国宾夕法尼亚州费城：SIAM，1977）。[15] J. Shen、T. Tang 和 L. L. Wang，《谱方法：算法、分析与应用》（德国柏林：Springer，2011）。[16] M. Raissi、P. Perdikaris 和 G. E. Karniadakis，“物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题和反问题的深度学习框架”，《计算物理学杂志》378，686（2019）。[17] G. E. Karniadakis、I. G. Kevrekidis、L. Lu、P. Perdikaris、S. Wang 和 L. Yang，“物理信息机器学习”，《自然·物理学评论》3，422（2021）。

[18] 375
1339 2018

J. Sirignano 和 K. Spiliopoulos，“DGM：一种用于求解偏微分方程的深度学习算法”，《计算物理学杂志》（）。[19] J. Han、A. Jentzen 和 W. E，“使用深度学习求解高维偏微分方程”，《美国国家科学院院刊》115，8505（2018）。[20] L. Lu、P. Jin 和 G. E. Karniadakis，“ 基于算子通用逼近定理，通过 DeepONet 学习非线性算子 ”，《自然 · 机器智能》 3，218 （ 2021 ）。[21] Z. Li、N. Kovachki、K. Azizzadenesheli、B. Liu、K. Bhattacharya、A. Stuart 和 A. Anandkumar，“用于参数化偏微分方程的傅里叶神经算子”，arXiv:2010.08895（2020）。[22] N. Kovachki、Z. Li、B. Liu、K. Azizzadenesheli、K. Bhattacharya、A. Stuart 和 A. Anandkumar，“神经算子：学习函数空间之间的映射及其在偏微分方程中的应用”，《机器学习研究杂志》24，1（2023）。[23] Z. Li、H. Zheng、N. Kovachki、D. Jin、H. Chen、B. Liu、K. Azizzadenesheli 和 A. Anandkumar，“用于学习偏微分方程的物理信息神经算子”，《ACM/IMS数据科学杂志》1，1（2024）。[24] M. Abadi、P. Barham、J. Chen、Z. Chen、A. Davis、J. Dean、M. Devin、S. Ghemawat、G. Irving、M. Isard、M. Kudlur、J. Levenberg、R. Monga、S. Moore、D. G. Murray、B. Steiner、P. Tucker、V. Vasudevan、P. Warden、M. Wicke、Y. Yu 和 X. Zheng，“TensorFlow：一个大规模机器学习系统”，载于《第12届USENIX操作系统设计与实现研讨会（OSDI）论文集》，265（2016）。[25] A. G. Baydin、B. A. Pearlmutter、A. A. Radul 和 J. M. Siskind，“机器学习中的自动微分：综述”，《机器学习研究杂志》18，1（2018）。[26] A. Griewank 和 A. Walther，《导数计算：算法微分的原理与技术》，第2版（美国宾夕法尼亚州费城：SIAM，2008）。[27] J. L. Lions 和 E. Magenes，《非齐次边值问题及其应用》，第I卷（德国柏林：Springer，1972）。

[28] A. Ern 和 J. L. Guermond，《有限元理论与实践》（美国纽约州纽约：Springer，2004）。[29] C. Johnson，《用有限元方法求解偏微分方程的数值解》（英国剑桥：剑桥大学出版社，1987）。[30] S. Larsson 和 V. Thomée，《偏微分方程的数值方法》（德国柏林：Springer，2003）。[31] I. Babuška 和 M. Suri，“有限元方法的p版本和h-p版本：基本原理与性质”，《SIAM评论》36，578（1994）。[32] M. Ainsworth 和 J. T. Oden，《有限元分析中的后验误差估计》（美国纽约州纽约：Wiley，2000）。[33] W. E 和 B. Yu，“Deep Ritz方法：一种用于求解变分问题的基于深度学习的数值算法”，《数学与统计学通讯》6，1（2018）。[34] E. Kharazmi、Z. Zhang 和 G. E. Karniadakis，“用于求解偏微分方程的变分物理信息神经网络”，arXiv:1912.00873（2019）。[35] S. Wang、Y. Teng 和 P. Perdikaris，“理解并缓解物理信息神经网络中的梯度流病态现象”，《SIAM科学计算杂志》43，A3055（2021）。[36] A. S. Krishnapriyan、A. Gholami、S. Zhe、R. Kirby 和 M. W. Mahoney，“理解并缓解物理信息神经网络中的梯度流病态现象”，载于《神经信息处理系统进展》（NeurIPS）34（2021）。[37] G. K. Jagtap、K. Kawaguchi 和 G. E. Karniadakis，“自适应激活函数加速深度神经网络和物理信息神经网络的收敛”，《计算物理学杂志》404，109136（2020）。[38] G. K. Jagtap、E. Kharazmi 和 G. E. Karniadakis，“扩展物理信息神经网络（XPINNs）：一种面向非线性偏微分方程的通用时空域分解深度学习框架”，《计算物理学通讯》28，2002（2020）。[39] X. Meng、Z. Li、D. Zhang 和 G. E. Karniadakis，“PPINN：用于时变偏微分方程的Parareal物理信息神经网络”，《计算方法应用力学与工程》370，113250（2020）。[40] I. E. Lagaris、A. Likas 和 D. I. Fotiadis，“用于求解常微分方程和偏微分方程的人工神经网络”，《IEEE神经网络汇刊》9，987（1998）。[41] J. Berg 和 K. Nyström，“一种针对复杂几何形状中偏微分方程的统一深度人工神经网络方法”，《神经计算》317，28（2018）。[42] Y. Shin、J. Darbon 和 G. E. Karniadakis，“关于物理信息神经网络对线性二阶椭圆型和抛物型偏微分方程的收敛性”，arXiv:2004.01806（2020）。[43] S. Mishra 和 R. Molinaro，“物理信息神经网络（PINNs）近似偏微分方程时的泛化误差估计”，arXiv:2006.16144（2020）。[44] P. B. Bochev 和 M. D. Gunzburger，《最小二乘有限元方法》（美国纽约州纽约：Springer，2009）。[45] Å. Björck，《最小二乘问题的数值方法》（美国宾夕法尼亚州费城：SIAM，1996）。[46] P. J. Davis 和 P. Rabinowitz，《数值积分方法》，第2版（美国纽约州米尼奥拉：Dover，2007）。[47] J. Nocedal 和 S. J. Wright，《数值优化》，第2版（美国纽约州纽约：Springer，2006）。[48] D. P. Kingma 和 J. Ba，“Adam：一种随机优化方法”，arXiv:1412.6980（2015）。[49] I. Loshchilov 和 F. Hutter，“SGDR：带热重启的随机梯度下降”，arXiv:1608.03983（2017）。[50] L. N. Smith，“用于训练神经网络的循环学习率”，载于《IEEE冬季应用计算机视觉会议论文集》（WACV），464（2017）。[51] S. Boyd 和 L. Vandenberghe，《凸优化》（英国剑桥：剑桥大学出版社，2004）。[52] J. Crank 和 P. Nicolson，“一种对热传导型偏微分方程解进行数值计算的实用方法”，《剑桥哲学学会会刊》43，50（1947）。[53] J. Crank，《扩散数学》，第2版（英国牛津：Clarendon出版社，1975）。[54] E. Hairer 和 G. Wanner，《常微分方程求解II：刚性问题与微分代数问题》，第2版（德国柏林：Springer，1996）。[55] J. S. Hesthaven、S. Gottlieb 和 D. Gottlieb，《时变问题的谱方法》（英国剑桥：剑桥大学出版社，2007）。[56] Y. Saad，《稀疏线性系统的迭代方法》，第2版（美国宾夕法尼亚州费城：SIAM，2003）。[57] J. W. Demmel，《应用数值线性代数》（美国宾夕法尼亚州费城：SIAM，1997）。[58] J. M. Burgers，《非线性扩散方程：渐近解与统计问题》（荷兰多德雷赫特：Reidel，1974）。[59] K. Salari 和 P. Knupp，“通过制造解方法进行代码验证”，桑迪亚国家实验室，SAND2000-1444（2000）。[60] L. Bottou，“随机梯度下降与大规模机器学习”，载于《COMPSTAT 2010会议论文集》，Y. Lechevallier 和 G. Saporta 编（德国海德堡：Physica-Verlag HD），177（2010）。[61] T. Tieleman 和 G. Hinton，“第6.5讲——RMSProp：用梯度近期幅度的运行平均值对梯度进行缩放”，《Coursera：机器学习神经网络》，多伦多大学（2012）。[62] J. Duchi、E. Hazan 和 Y. Singer，“用于在线学习和随机优化的自适应次梯度方法”，《机器学习研究杂志》12，2121（2011）。[63] I. Goodfellow、Y. Bengio 和 A. Courville，《深度学习》（美国马萨诸塞州剑桥：MIT出版社，2016）。[64] M. M. Hammad，《人工神经网络与深度学习：基础与理论》，arXiv:2408.16002（2024）。[65] A. N. Tikhonov 和 V. Y. Arsenin，《病态问题的解》（美国纽约州纽约：Wiley，1977）。[66] M. M. Hammad，“深度学习激活函数：固定形状、参数化、自适应、随机、其他、非标准及集成”，arXiv:2407.11090（2024）。

[67] M. M. Hammad, 《复值神经网络综合综述：反向传播与激活函数的见解》arXiv:2407.19258（2024）。[68] R. Pascanu、T. Mikolov 和 Y. Bengio, 《循环神经网络训练的难点》载于第*30*届国际机器学习会议（*ICML*）论文集，亚特兰大，*GA*，美国，《机器学习研究杂志》会议论文集，**28** 1310（2013）。[69] M. M. Hammad, 《机器学习统计学：*Mathematica* 应用》，arXiv:2310.00004（2023）。[70] M. M. Hammad, 《SNN——TensorFlow 中的薛定谔神经网络：参考实现与实验》10.5281/zenodo.17442982（2025）。[71] M. M. Hammad, 《薛定谔神经网络与不确定性量化：量子机器》arXiv:2510.23449（2025）。[72] M. M. Hammad, 《VSL——TensorFlow 中的变分谱学习：参考实现与实验》 Zenodo（2026）。