arXiv:2602.04082v1 [cs.LG] 3 Feb 2026

基于扩散模型求解高频亥姆霍兹方程的概率框架

YichengZou[b],SamuelLanthaler[c],Hossein Salahshoor[a,b,*]

[a]土木与环境工程系，杜克大学，美国北卡罗来纳州达勒姆[b]机械工程与材料科学系，杜克大学，美国北卡罗来纳州达勒姆[c]数学系，维也纳大学，奥地利维也纳

摘要

确定性神经算子在许多偏微分方程上表现良好，但在近似高频波现象时可能会遇到困难，因为强烈的输入到输出敏感性使算子学习变得具有挑战性，而谱偏差会模糊振荡。我们主张采用概率方法来近似高频区间内的波，并基于分数的条件扩散算子构建了概率框架。在展示亥姆霍兹算子的稳定性分析后，我们介绍了涵盖广泛频率范围的数值实验，并与其他流行的波问题数据驱动方法和机器学习方法进行了基准比较。我们表明，我们的概率神经算子能够持续生成稳健的预测，在 L^2、 H^1和能量范数方面误差最低。此外，与所有其他受测的确定性方法不同，我们的框架还显著捕捉到了输入声速图中的不确定性如何传播至解场。我们认为，我们的结果表明，概率算子学习是一种有原则且有效的方法，可用于在具有挑战性的高频区间求解亥姆霍兹方程等复杂偏微分方程。

关键词：亥姆霍兹方程、扩散模型、概率神经算子、高频波传播、不确定性量化

*通讯作者。电子邮箱：yz886@duke.edu（Yicheng Zou），samuel.lanthaler@univie.ac.at（Samuel Lanthaler），hossein.salahshoor@duke.edu（Hossein Salahshoor）

1. 引言

亥姆霍兹方程是一类椭圆型偏微分方程，可用于描述时谐波传播，在应用科学领域有广泛用途，涵盖从地球物理学到医学领域（如成像和超声治疗） [1–6]。在非均匀介质中求解高频区间的亥姆霍兹方程，需要极精细的计算网格，这往往使计算成本高到难以承受 [7–13]。因此，研究者开始采用基于学习的代理模型，通过快速推理显著降低计算成本，同时力求保持保真度。其中，算子学习旨在学习函数空间之间的映射，而非逐点输入与输出之间的映射。代表性方法包括 DeepONet 和傅里叶神经算子（FNO），以及针对波动物理和弹性力学量身定制的扩展方法 [14–20]。然而，非均匀介质中的高频波场暴露出确定性算子的两个长期存在的局限：（i）算子频谱偏差，即模型倾向于捕捉低频成分，并过度平滑振荡结构，从而损害声学和地震学中至关重要的相位精度与干涉图样 [21–23]；以及（ii）对输入中微小扰动的敏感性（例如声速、几何形状或频率的变化），这些扰动可能导致多模态性或响应急剧变化，而点估计预测器既无法表示，也无法校准这些情况 [24–26]。

概率学习通过对解的分布进行建模，提供了确定性（单输出）替代模型之外的另一种选择，从而捕捉多模态性和输入敏感性 [27–31]。条件扩散模型提供了一种具体工具，可用于研究概率算子学习 [32–37], ，我们旨在将其用于由亥姆霍兹方程描述的高频声学问题。我们构建了一个条件扩散算子，将问题输入（声速图、源掩膜、位置编码）映射为复频域波场，并在从低频到高频的范围内对其进行评估，同时与性能强劲的确定性基线方法（FNO、HNO，以及骨干网络匹配的 U-Net）进行比较。我们的研究围绕高频预测中的两个核心问题展开：（Q1）与确定性替代模型相比，概率算子能否更可靠地保持稳定量——例如子区域内的能量；（Q2）它能否生成经过校准的 不确定性，忠实反映对输入扰动的敏感性？尽管底层前向映射是确定性的，但高频下实际存在的不确定性会使单输出替代模型变得脆弱。我们的概率形式虽然能够有效学习解的条件分布，但利用其均值来获得准确率，并利用其

离散程度来表征认知敏感性。

本文中，我们将条件扩散模型用作概率学习机器，以实现：(i) 学习亥姆霍兹方程解场中的精细特征，这些特征难以捕捉，甚至可能无法由任何确定性模型捕捉；(ii) 学习系数场中不确定性的推前，这一点体现在我们的敏感性研究中。在所有测试频率下，扩散模型在 L^2、 H^1和能量范数方面的误差均最低。我们还证明，扩散模型能够预测远场振幅的统计特性。我们的敏感性分析进一步表明，扩散模型能够稳健地反映真实值的变化，并产生校准不确定性；而确定性算子则系统性地低估离散程度，并遗漏小方差模态。综上，我们的结果表明，概率算子学习是近似求解偏微分方程高频解的一种有前景的方法。

2. 相关工作

亥姆霍兹算子学习。神经算子有望大规模快速构建偏微分方程的替代模型，但亥姆霍兹问题暴露了其核心弱点：难以保留高频结构。傅里叶神经算子能够高效地对低频弹性波进行建模，但往往会平滑振荡——这是谱偏差的一种表现 [16, 17, 38]。为缓解这种谱偏差，研究者提出了多种针对亥姆霍兹问题的专门设计。亥姆霍兹神经算子（HNO）是其中一个重要例子，它在频域中运行，以逐频求解取代时间步进，在保留弹性波场准确率的同时，显著降低内存占用和运行时间 [18, 39]。另一些研究则将解析结构融入替代模型：纽曼级数神经算子针对大波数，以提升稳定性并降低误差 [19], ；多尺度架构则在谱偏差影响最严重的地方提高分辨率 [20]。在我们的研究中，我们采用 HNO 作为基准，与所得结果进行比较。

偏微分方程解场的扩散模型。 扩散模型从不同角度处理这一问题：它们学习的是解的分布，而非单一的点估计。许多研究致力于通过在训练/采样过程中引入残差惩罚和先验，开发物理信息扩散模型，使生成场满足控制方程[34, 40, 41]。尤其是条件扩散，在近似偏微分方程的解方面表现出很高的保真度 [32, 42, 43]。还有一些研究探讨了部分观测场景，旨在根据稀疏

或间接数据 [33, 44–47]。此外，湍流中的统计学习这一概念 [48] 使条件扩散模型等概率方法成为湍流流体建模的一条有前景的途径，近期已有研究对此展开探讨 [49, 50]。此外，大量研究致力于函数空间扩散模型，这类模型直接在连续场上定义先验，以实现与离散化无关的学习，并在不同分辨率之间迁移[35, 37, 51, 52]。

3. 理论框架

本节阐述我们框架的理论基础。在介绍一般设定后，我们聚焦于亥姆霍兹问题，并描述高频区间内亥姆霍兹解对输入的敏感性。由此，我们采用基于条件得分扩散的概率学习方法，并将在最后一个小节中对其进行介绍。

3.1. 偏微分方程的概率算子学习

考虑开连通域 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$上的一个边值问题，其边界为 $\partial\Omega$,

$$\mathcal{L}_\kappa u = f \quad \text{in } \Omega, \qquad \mathcal{B} u = g \quad \text{on } \partial\Omega, \tag{1}$$

其中 $\mathcal{L}_\kappa$ 是一个依赖于系数场 κ （例如声速、密度）的微分算子， f 是源项，而 g 表示边界数据。在标准适定性假设下， （1）诱导出一个解算子

$$\mathcal{S}: \ \mathcal{Z} \to \mathcal{Y}, \qquad z := (\kappa, f, g) \in \mathcal{Z} \ \mapsto \ u = \mathcal{S}(z) \in \mathcal{Y}, \tag{2}$$

对于合适的函数空间（例如 $\mathcal{Z} \subset L^\infty \times L^2 \times H^{1/2}$， $\mathcal{Y} \subset H^1$），经典求解器通过离散化 $\mathcal{S}$，针对每次查询 对（ 1 ）进行离散化，并计算 $u_h \approx u$；在多次查询情形下（几何形状、系数和频率不断变化），这种方法代价高昂。算子学习旨在构建数据驱动替代模型 $\widehat{\mathcal{S}}_\theta: \ \mathcal{Z} \to \mathcal{Y}$ 通过样本对 $\{(z_i, \ u_i)\}_{i=1}^N$ 进行训练，其中 $u_i = \mathcal{S}(z_i)$，从而求解

$$\begin{aligned} \theta^\star &\in \arg\min_\theta \ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{L}\big(\widehat{\mathcal{S}}_\theta(z_i), \, u_i\big), \\ \mathcal{L}(a, b) &:= \|a - b\|_{\mathcal{Y}}, \end{aligned} \tag{3}$$

其中 $\|\cdot\|_{\mathcal{Y}}$ 是解空间中的范数。常见的确定性架构（例如傅里叶神经算子（FNO） [15], DeepONet [14]）通过学习积分核或谱乘子来实现 $\mathcal{S}_\theta$ ，并返回针对输入 的一次性预测 $\widehat{u}_\theta = \mathcal{S}_\theta(z)$ 。 z

概率算子则对解的条件分布进行建模：对于每个 $z \in \mathcal{Z}$，它表示条件分布 $\mathbb{P}(u \mid z)$，并支持采样 $u \sim p_\vartheta(\cdot \mid z)$。我们参数化一个条件生成器 T_ϑ ，并使用潜在高斯分布 $\eta \sim \mathcal{N}(0,\ I)$进行采样，

$$u \ = \ T_\vartheta(\eta; z) \ \sim \ p_\vartheta(\cdot \mid z), \tag{4}$$

其中， $p_\vartheta(\cdot \mid z) = T_{\vartheta,\ \#}\mathcal{N}(0,\ I)$ 是所学习生成器作用于参考高斯分布后得到的推前分布。 T_ϑ 的具体选择及其训练目标取决于概率族；本文聚焦于条件扩散模型，其他实例还包括条件归一化流和函数空间先验。 [32, 33, 35–37, 53]。

3.2. 高频亥姆霍兹方程及概率方法的优势

我们考虑亥姆霍兹方程

$$c^2\nabla^2 u + k^2 u = 0, \tag{5}$$

其具有非均匀声图 $c = c(x)$。亥姆霍兹方程是声学、弹性力学和散射领域时间谐波建模的基础。尽管应用广泛，其数值解仍面临诸多挑战。关于求解亥姆霍兹方程所面临挑战的详细介绍，请参阅 [54] 。简而言之，亥姆霍兹算子既不是厄米对称的，也不满足强制性，并且条件数很差，因此难以通过迭代方法求解。在这些困难的基础上，高波数情形还需要解析短波长并控制色散（“污染”）误差；这些因素共同导致高频亥姆霍兹方程解的近似成为一个困难问题。这些困难推动了使用神经算子求解亥姆霍兹方程的研究[16–18, 38, 39]。

在亥姆霍兹方程的高频率范围内，确定性算子面临的两个障碍会加剧：（i）谱偏差，即神经网络倾向于拟合低频成分并过度平滑振荡，从而降低相位/干涉保真度；以及（ii）输入敏感性，即微小的系数扰动会导致解出现较大的相位偏移。

令 $S\colon \mathcal{Z}\to\mathcal{Y}$ 将声速场 c 映射为复波场 $u = S(c)$。围绕基准值 c_0 进行线性化，并借助弗雷歇可微性，利用微分的算子范数可得：

$$\delta u \;\approx\; DS[c_0]\,(\delta c), \qquad L(c_0) \;:=\; \|DS[c_0]\|_{\mathrm{op}}, \qquad \text{so}\ \frac{\|\delta u\|}{\|u_0\|} \;\lesssim\; L(c_0)\,\frac{\|\delta c\|}{\|c_0\|}, \tag{6}$$

其中 $u_0 := S(c_0)$， $L(c_0)$ 为利普希茨常数。通过标准的几何光学（亦称 WKB 近似）论证，可以明确表示 $L(c_0)$ 随频率的增长情况。我们考察一个一维模型，因为它以最少的复杂性保留了关键思想。

一维亥姆霍兹方程。考虑如下变系数一维亥姆霍兹方程

$$u''(x) + k^2 n(x)^2 u(x) = 0, \qquad n(x) := \frac{1}{c(x)}, \quad x\in[0,\ell], \tag{7}$$

在高频区间 $k \gg 1$。采用 WKB 试探解 $u(x) = a(x)e^{ik\phi(x)}$，并保留主导阶相位（即 k^2 项），可得传播时间 $\tau(x) = \int_0^x ds/c(s)$，以及主导近似

$$u(x) \;\approx\; A_0\,\exp\Big(\pm ik\int_0^x \frac{ds}{c(s)}\Big). \tag{8}$$

现在用 $\|\delta c\|_\infty/\|c_0\|_\infty \ll 1$ 扰动 $c = c_0 + \delta c$。由于 $n = 1/c$，我们有$\delta n(x) = -\delta c(x)/c_0(x)^2 + \mathcal{O}(\delta c^2)$，因此传播时间的扰动满足

$$\delta\tau(x) \;=\; \int_0^x \delta n(s)\,ds \;=\; -\int_0^x \frac{\delta c(s)}{c_0(s)^2}\,ds + \mathcal{O}(\delta c^2). \tag{9}$$

代入（8）（并忽略次阶振幅变化）后，可得由相位主导的相对误差，

$$\frac{\delta u(x)}{u_0(x)} \;\approx\; \exp\big(\pm ik\,\delta\tau(x)\big) - 1, \qquad \Big|\tfrac{\delta u(x)}{u_0(x)}\Big| \;\lesssim\; k\int_0^x \frac{|\delta c(s)|}{c_0(s)^2}\,ds. \tag{10}$$

若 c_0 沿路径近似为常数（或局部有下界$c_{0,\ \min}$），则可简化为

$$\Big|\tfrac{\delta u(x)}{u_0(x)}\Big| \;\lesssim\; \underbrace{\frac{k\,x}{c_0}}_{=:L(k,x,c_0)}\ \frac{\|\delta c\|_\infty}{c_0} \;\le\; \underbrace{\frac{k\,\ell}{c_0}}_{=:L(k,\ell,c_0)}\ \frac{\|\delta c\|_\infty}{c_0}. \tag{11}$$

因此，即使是微小的系数误差，也会在$k\ell \gg 1$之后（即相位累积充分之后）产生量级为一的波场误差。

推广到高维。在几何光学假设下（单条主导射线、无焦散），同样的机制也适用于 $d \geq 2$：接收器 $\boldsymbol{r}$ 处的解可表示为射线形式

$$u(\boldsymbol{r}) \;\approx\; A(\boldsymbol{r})\,\exp\Big(\pm ik\int_{\gamma(\boldsymbol{r})}\frac{ds}{c(s)}\Big), \tag{12}$$

其中 $\gamma(\boldsymbol{r})$ 是从源到 $\boldsymbol{r}$ 、长度为 $\ell(\boldsymbol{r})$ 的射线。扰动 $c = c_0 + \delta c$ 会引起累积相位偏移

$$\delta\phi(\boldsymbol{r}) \;\approx\; -k\int_{\gamma(\boldsymbol{r})}\frac{\delta c(s)}{c_0(s)^2}\,ds, \qquad \frac{\delta u(\boldsymbol{r})}{u_0(\boldsymbol{r})} \;\approx\; e^{\pm i\,\delta\phi(\boldsymbol{r})} - 1, \tag{13}$$

因此，有效敏感性会随 k 和传播距离 $\ell(\boldsymbol{r})$ 增大，并在源附近最小——这正是公式（6）–（7）所形式化描述的标度关系。

如果诱导的相位扰动 $\delta\phi(\boldsymbol{r})$ 可以视为随机的（反映未解析的输入变异性或建模误差），那么均方误差最优的确定性预测器会通过在单位圆上进行向量平均来抑制振荡：

$$\hat{u}_{\mathrm{MSE}}(\boldsymbol{r}) = \mathbb{E}[u(\boldsymbol{r}) \mid z] \;\approx\; u_0(\boldsymbol{r})\,\mathbb{E}\big[e^{\,i\delta\phi(\boldsymbol{r})}\big] \;\approx\; u_0(\boldsymbol{r})\,e^{-\frac{1}{2}\mathrm{Var}[\delta\phi(\boldsymbol{r})]}. \tag{14}$$

指数衰减会导致振幅收缩、干涉模糊以及高频对比度损失——恰恰发生在敏感性因子的标度关系为 $L(k,\ell) \propto k\ell$ 时。

而概率算子则通过将相位模糊和输入敏感性纳入模型，来描述条件分布 $p_\vartheta(u \mid z)$，而不是将它们折叠成单一输出。抽取样本 $\{u^{(s)}\}_{s=1}^{S} \sim p_\vartheta(\cdot \mid z)$ 可以实现：(i) 在预测时保留振荡和多模态性（通过样本表示不确定的相位模式，而非仅表示学习得到的均值）；(ii) 量化校准不确定性，以反映敏感性；以及 (iii) 报告相位相消时的稳定泛函。例如，能量

$$E(u) \;=\; \int_{\Omega}\Big(\|\nabla u(\boldsymbol{r})\|^2 + \tfrac{k^2}{c_0(\boldsymbol{r})^2}\,|u(\boldsymbol{r})|^2\Big)\,d\boldsymbol{r} \tag{15}$$

ˆ 可通过

$$\bar{E} = \frac{1}{S}\sum_{s=1}^{S} E\big(u^{(s)}\big) \qquad E = \mathbb{E}[E(u) \mid z] \approx E\big(\mathbb{E}[u \mid z]\big)$$ 以贝叶斯最优的方式估计能量风险，即使相位色散使其衰减，该估计仍保持稳定。实际应用中，$p_\vartheta(u \mid z)$ 让我们能够将脆弱的 量（相位、逐点场）与稳定的 量（能量、带限摘要）分离，提供用于敏感性感知校准的覆盖诊断，并选择与评估指标相匹配的决策规则，从而在确定性代理模型难以应对之处实现稳健性。

3.3. 用于概率学习的条件扩散模型

本小节介绍我们采用的条件扩散模型，用于对波场进行概率学习。将亥姆霍兹解记为 u_0，我们的目标是在给定偏微分方程输入的情况下，近似条件分布 $p_\theta(u_0 \mid z)$，其中 $u_0 \in \mathbb{C}^{H\times W}$ 和 $z = [\,c,\, m,\, \mathrm{PE}_x,\, \mathrm{PE}_y\,]$ 由声速图 c、二值源掩码 m和正弦位置编码拼接而成（为简便起见，我们假设区域为二维正方形域）。这通过加噪 和去噪 过程实现。第一步是通过前向 加噪链逐步将 u_0 扰乱为 u_T，具体如下：

$$q(u_t \mid u_{t-1}) = \mathcal{N}\big(u_t;\, \sqrt{\alpha_t}\, u_{t-1},\, (1-\alpha_t) I\big), \quad q(u_t \mid u_0) = \mathcal{N}\big(u_t;\, \sqrt{\bar{\alpha}_t}\, u_0,\, (1-\bar{\alpha}_t) I\big), \tag{16}$$

采用调度表 $\{\beta_t\}_{t=1}^{T} \subset (0,\ 1)$、 $\alpha_t = 1 - \beta_t$ 和 $\bar{\alpha}_t = \prod_{s\le t} \alpha_s$。接下来，我们使用时间索引高斯族来近似反向条件分布

$$\begin{aligned} p_\theta(u_{t-1} \mid u_t, \mathrm{z}) &= \mathcal{N}\big(u_{t-1};\, \mu_\theta(u_t, t, \mathrm{z}),\, \sigma_t^2 I\big), \\ \mu_\theta(u_t, t, \mathrm{z}) &= \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}} \left(u_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\, \varepsilon_\theta(u_t, t, \mathrm{z}) \right), \end{aligned} \tag{17}$$

其中，带有时间嵌入的 U-Net 对噪声预测器 ε_θ 进行参数化。需要注意的是，条件化 z 从不加噪。学习目标与条件去噪分数匹配一致，具体如下：

$$\mathcal{L}(\theta) = \mathbb{E}_{u_0, z, t, \varepsilon} \Big\| \varepsilon - \varepsilon_\theta\big(u_t, t, z\big) \Big\|_2^2, \qquad u_t = \sqrt{\bar{\alpha}_t}\, u_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\, \varepsilon, \ \ \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, I), \tag{18}$$

推理过程中，我们通过迭代 $u_T \sim \mathcal{N}(0,\ I)$，经由 $t = T \to 1$ 生成 S祖先采样，从而得到 $\{u_0^{(s)}\}_{s=1}^{S} \sim p_\theta(\cdot \mid z)$。

4. 数据集与训练的详细说明

本节详细介绍数据生成和扩散模型训练。

数据生成。对于固定频率，我们合成一个包含 10000 对声速图和亥姆霍兹解的数据集，即 $\{c_j(x)\ u_j(x)\}_{j=1}^{10000}$。每个 c_j 均由一组高斯随机场（GRF；见附录 A.1生成，其中高斯随机场参数从振幅和相关长度的取值范围内随机选取

在合成的 10000 个数据样本中，我们分别分配 8190、1020 和 500 个用于训练、验证集和测试集。

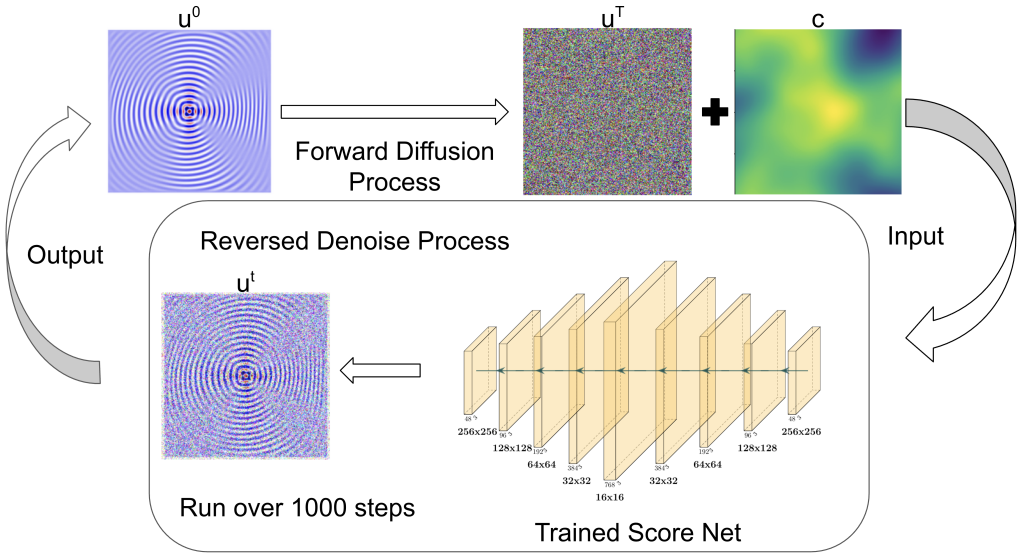


图 1：**用于亥姆霍兹方程的条件扩散。** 前向扩散（上）：波场u_0 按照固定调度表逐步添加噪声，最终成为高斯场 u_T。反向去噪（下）：采样从纯高斯分布 u_T 开始，并以输入 z作为条件，输入包括声速图 c，以及未显示的源掩膜和位置编码。按时间索引的 U-Net（“训练后的评分网络”）预测噪声，并在 $T \approx 1000$ 步中迭代去除噪声，生成样本 $u_0^{(s)}$，使其近似于解的条件分布。

数据集借助亥姆霍兹偏微分方程求解器*J-Wave*生成。该求解器是一个功能强大的谱方法求解器，基于 JAX 开发[55]。具体而言，对于每个声速图 c_j，我们求解亥姆霍兹方程：

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c_j(x)^2}\right) u_j = F, \tag{19}$$

其中， u_j 是在正方形区域内角频率为 $\omega = 2\pi f$ 、采用 256×256 笛卡尔网格表示的复压力场， F 是一个掩膜源项，其圆盘掩膜半径为 r_s=10 个网格点；同时，在边界处采用完美匹配层（PML），以消除边界反射的影响。我们重复上述过程，为六种不同频率生成六个数据集，频率范围为 1.5×10^5 至 2.5×10^6 赫兹。在不失一般性的前提下，为体现具体应用，频率和

声速范围均选取为能够反映组织中超声波建模的情形。在学习过程中，我们将输入扩展为包含归一化的 c、源掩膜和正弦位置编码，并以波场解作为目标。

用于亥姆霍兹算子的条件扩散。 不同于扩散模型在时变偏微分方程中的现有应用，例如 PDE–DIFF [32], ，我们学习一个解算子，它对应于稳态波，这意味着没有时间堆叠，并且每个训练样本都是固定频率下的单个实例。我们采用条件去噪公式，仅对目标波场添加噪声，而输入保持干净并作为条件给定。骨干评分网络采用二维 U-Net，包含五个下采样/上采样阶段（通道宽度为 $[48, 96, 192, 384, 768]$）、每个阶段三个残差块、层归一化、SiLU 和循环填充（图1）。正弦时间嵌入经过一个多层感知机（$128 \to 256 \to 64$），生成一个 64 维上下文向量。条件张量 C 以两种方式使用：(i) 与输入图像堆栈拼接；(ii) 通过线性层将 64 维上下文映射到当前块的通道宽度，以生成 FiLM 缩放/偏移$(\gamma, \beta) \in \mathbb{R}^f$，并应用为$y = \gamma \odot h + \beta$。最后，网络预测一个输出通道（波场振幅）。训练/采样流程和 FiLM 条件化 U-Net 的概览见图1 。更多细节请参阅附录 A）。

5. 结果

我们将实验结果分为三部分：（i）误差分析，量化我们的概率框架的性能，并将其与现有的神经算子基线进行比较；（ii）敏感性分析，考察声速场中的不确定性如何传播为预测波场的变化；以及（iii）初步三维结果，将该方法扩展至完整的三维亥姆霍兹问题，并评估一种基于 U 形视觉变换器（UViT）的增强型扩散骨干网络。为便于理解并进行最坏情况可视化，我们主要在最高频率 $f = 2.5 \times 10^6$赫兹下展示敏感性结果；其他频率和扩展面板见附录。

5.1. 误差分析

我们研究了采用不同噪声调度的多种扩散模型框架，并对扩散采样器进行了消融实验（每种设置仅计算一次 ）

表1：**不同频率下的相对误差**。扩散模型报告 $K=10$个样本的均值±标准差。

频率（赫兹）	指标	U-Net	FNO	HNO	扩散模型
1.5e5	L^2	0.040	0.167	0.115	**0.027** ± 0.004
	H^1	0.071	0.219	0.164	**0.045** ± 0.004
	能量	0.022	0.114	0.071	**0.016** ± 0.003
2.5e5	L^2	0.077	0.190	0.153	**0.028** ± 0.001
	H^1	0.121	0.278	0.219	**0。044** ± 0.001
	能量	0.026	0.086	0.075	**0.013** ± 0.002
5e5	L^2	0.083	0.176	0.133	**0.018** ± 0.002
	H^1	0.122	0.223	0.189	**0.035** ± 0.002
	能量	0.036	0.105	0.069	**0.013** ± 0.005
1e6	L^2	0.101	0.306	0.177	**0.025** ± 0.005
	H^1	0.150	0.352	0.254	**0.040** ± 0.007
	能量	0.033	0.091	0.082	**0.017** ± 0.008
1.5e6	L^2	0.464	0.363	0.398	**0.046** ± 0.011
	H^1	0.639	0.434	0.557	**0.070** ± 0.015
	能量	0.249	0.103	0.162	**0.026** ± 0.015
2.5e6	L^2	0.767	0.412	0.802	**0.095** ± 0.019
	H^1	1.000	0.494	0.996	**0.135** ± 0.028
	能量	0.514	0.141	0.590	**0.036** ± 0.016

针对不同步数预算 $N_t \in \{10, 50, 100, 1000\}$：去噪扩散概率模型采用 线性和余弦 噪声调度，去噪扩散隐式模型（余弦），以及 SDE（余弦）。在测试的采样器中，采用余弦噪声调度的去噪扩散概率模型 在最大步数预算（$N_t = 1000$）下准确率最高。因此，我们采用去噪扩散概率模型作为默认采样器，并在附录 B中提供完整的消融实验详情，表明去噪扩散概率模型始终优于其他方法。为将我们的结果与确定性框架进行比较，我们采用了傅里叶神经算子（FNO）和较新的亥姆霍兹神经算子（HNO），并使用与扩散模型相同的数据集对其进行训练（FNO 和 HNO 的详情见附录 A）。我们计算并分析了 FNO、HNO 和骨干 U-Net 的结果，将其作为确定性基线方法，与我们的概率框架进行比较。表1 汇总了六种不同频率下的相对 L^2 和 H^1 误差，频率范围从较低的 150 千赫兹到 2.5 兆赫。鉴于实际应用中人们往往关注能量，我们还量化了相对能量误差，其定义为 $\mathcal{E}_{\text{energy}}(\hat{u}, u) = |E(\hat{u}) - E(u)|/E(u)$，其中 $E(u) = \int_\Omega (\|\nabla u\|^2 + c(x)^2 |u|^2)\, dx$。

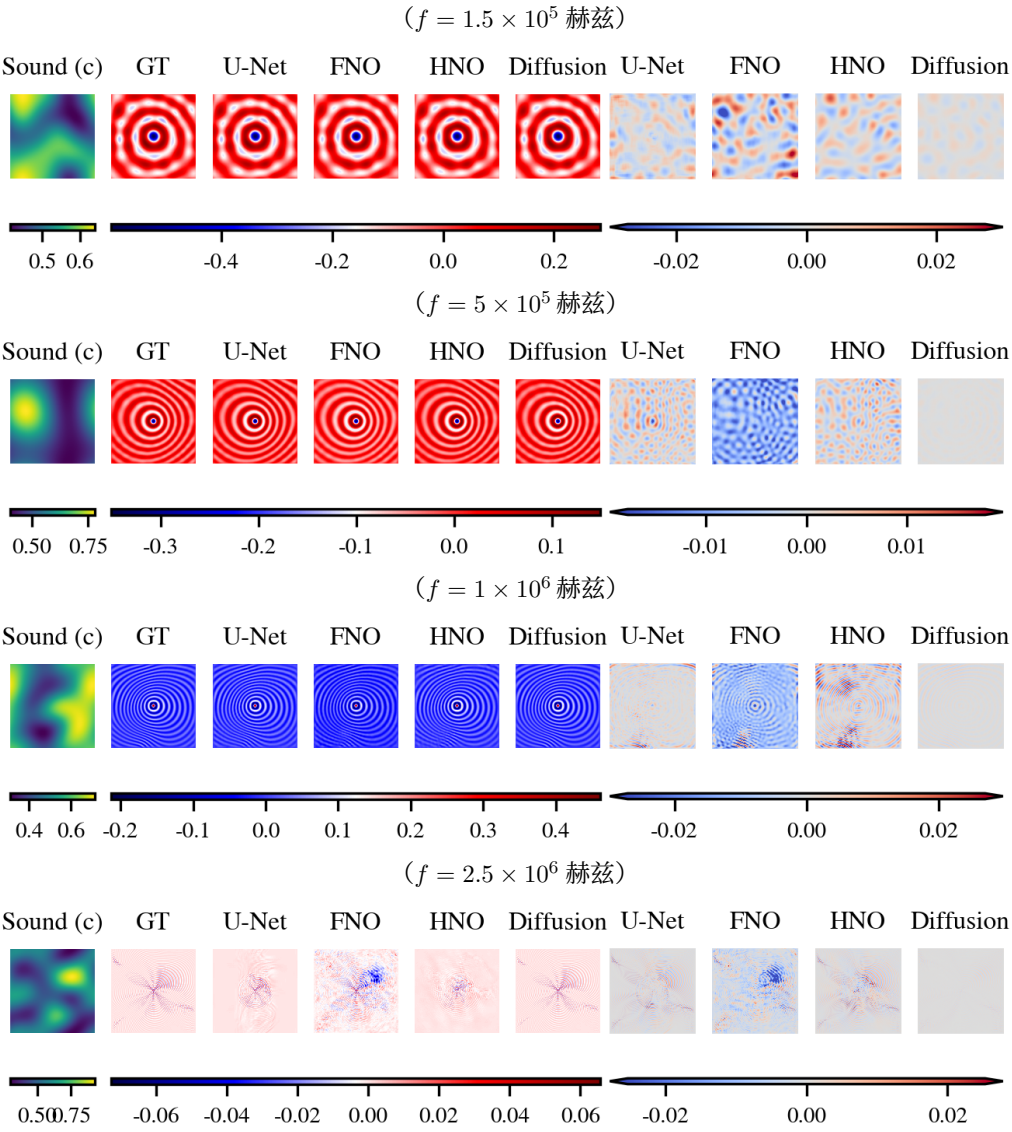


图2：**所选频率下的定性比较**。每行从左到右依次显示声图 (c)、真实值 (GT)、U-Net、FNO、HNO、扩散模型，随后是与真实值的比较。

我们注意到，扩散结果是通过对每个测试输入抽取 $K = 10$ 个样本得到的，并报告均值±标准差。结果表明，扩散模型始终能获得更小的误差；随着频率升高，我们的概率方法的误差比三种确定性方法中表现最好的方法低一个数量级。值得注意的是，在 2.5 兆赫下，扩散模型的相对 L^2 误差为 0.095 ± 0.019，而 U-Net、FNO 和 HNO 的同一指标分别为 0.767、0.412 和 0.802。我们还展示了随机选取的一张声速图对应的计算波场解。图 2 展示了四个频率子集下的真实值（GT）、U-Net、FNO、HNO 和扩散结果及其对应误差（更多结果见 附录 C.2 ）。我们观察到，在捕捉波形和解的精细特征方面，扩散模型优于其他确定性方法。

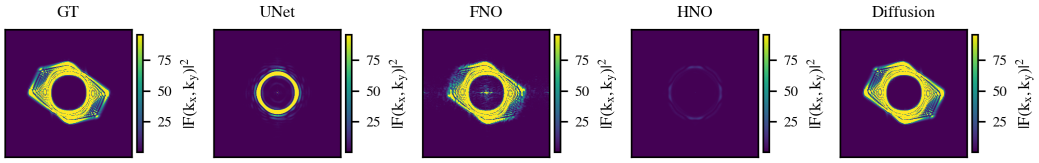


图 3：**二维谱功率比较（ $f = 2.5 \times 10^6$ 赫兹）**。单个测试样本上真实值与各模型的示例傅里叶功率谱 $|F(k_x,\ k_y)|^2$。

为使这些观察更加定量，我们还分析了预测波场的二维傅里叶功率谱。对于固定的高频（例如， $f = 2.5 \times 10^6$赫兹），我们计算真实值与各模型预测的二维快速傅里叶变换，并可视化相应的功率 $|F（k_x,\ k_y）|^2$ 在整个 $（k_x,\ k_y）$域上的分布。如图 3所示，确定性基线方法（尤其是 U-Net 主干网络和 HNO）表现出明显的谱偏差：它们在大波数处过度平滑或错误分配能量，从而显著偏离真实谱。相比之下，扩散模型在低空间频率和高空间频率上均紧密跟踪真实值功率谱，表明其捕捉了全部范围的振荡成分，而不是坍缩到低k 模态。

5.2. 敏感性分析

为了量化声速图中的不确定性如何传递为波场中的不确定性，我们沿系数函数空间中的受控扰动路径探测解映射（图4）。我们首先选取

一个参考介质 c_0 （红色点），并绘制 D=100高斯随机场实现$\{c^{(d)}\}_{d=1}^{D}$，以定义不同的扰动方向/端点（黑色点）。对于每个方向 d，我们构造一个线性同伦

$$c^{(d)}(s) \;=\; (1-s)c_0 + s\,c^{(d)}, \qquad s \in [0,1], \tag{20}$$

离散为 S=100 个插值步骤。在图4的几何视图中，每条虚线射线都表示从 c_0 指向一个高斯随机场端点的路径，同心等值线圆表示固定的插值半径（例如， $s = 0.3$，0。5、0。7、1。0），即偏离基线的程度逐渐增大。

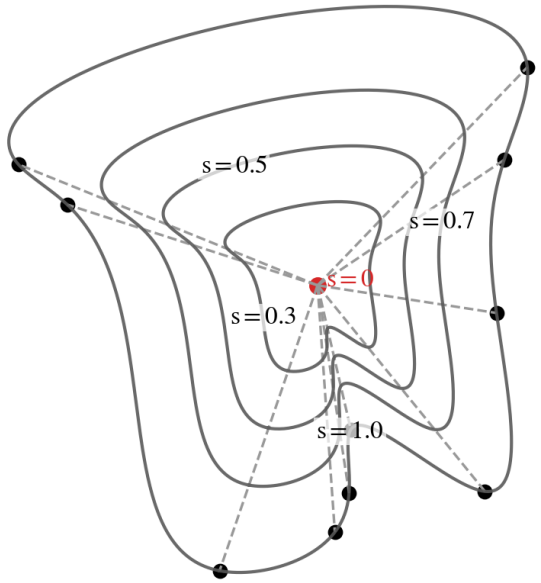


图 4：**系数函数空间与插值路径示意图**。红点表示参考（基线）介质 c_0。周围的黑点 $\{c^{(d)}\}_{d=1}^{D}$ 表示系数空间中不同的高斯随机场方向/实现。对于每个方向 d，我们定义一个线性同伦（虚线射线） $c^{(d)}(s) = (1-s)\,c_0 + s\,c^{(d)}$，其描绘了一条从中心 c_0 指向端点 $c^{(d)}$的路径。同心等值线圆表示固定的插值级别 $s \in \{0.3, 0.5, 0.7, 1.0\}$：向外移动表示偏离 c_0的程度增大，其中 $s = 1.0$ 表示完整的高斯随机场实现。

对于每个系数实现 $c^{(d)}(s)$，我们在 8 个探测像素处评估模型预测$u_M(\cdot;\, c^{(d)}(s))$：4 个靠近源区域，另有 4 个远离完美匹配层边界。对于较小的 s，沿每条虚线路径的初始斜率提供

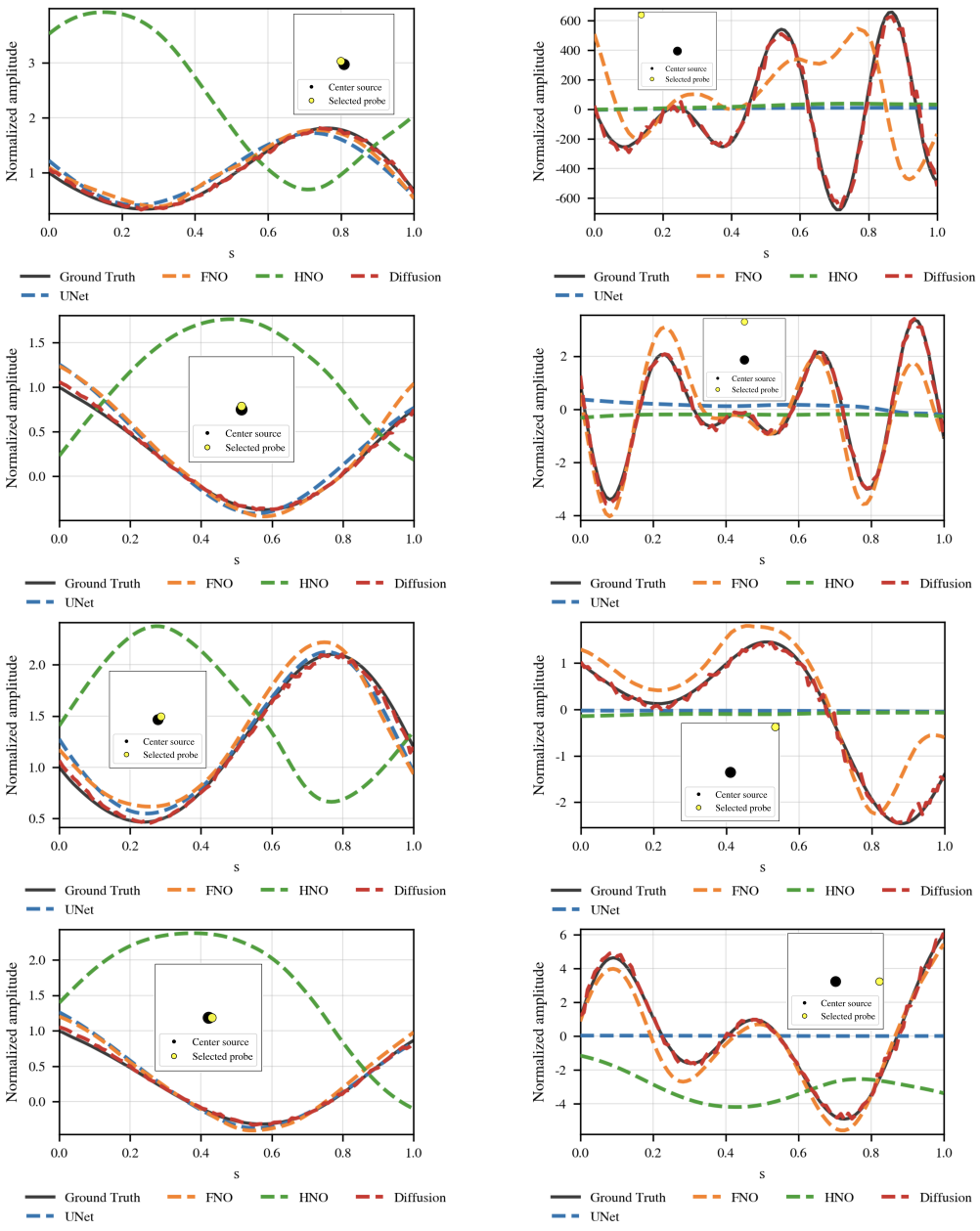
一种局部的方向性敏感性度量，

$$\frac{d}{ds}u(\cdot;\, c^{(d)}(s))\bigg|_{s=0} \;\approx\; DS[c_0]\,[c^{(d)} - c_0], \tag{21}$$

这与高频标度直接相关 $|\delta u/u_0| \lesssim (k\,r/c_0)(\|\delta c\|/c_0)$(第3节）。随着 s 增大（沿等值线圆向外移动），介质偏离 c_0的程度也随之加大，响应越来越多地体现累积相位误差和干涉变化性，而非纯粹的局部线性行为。

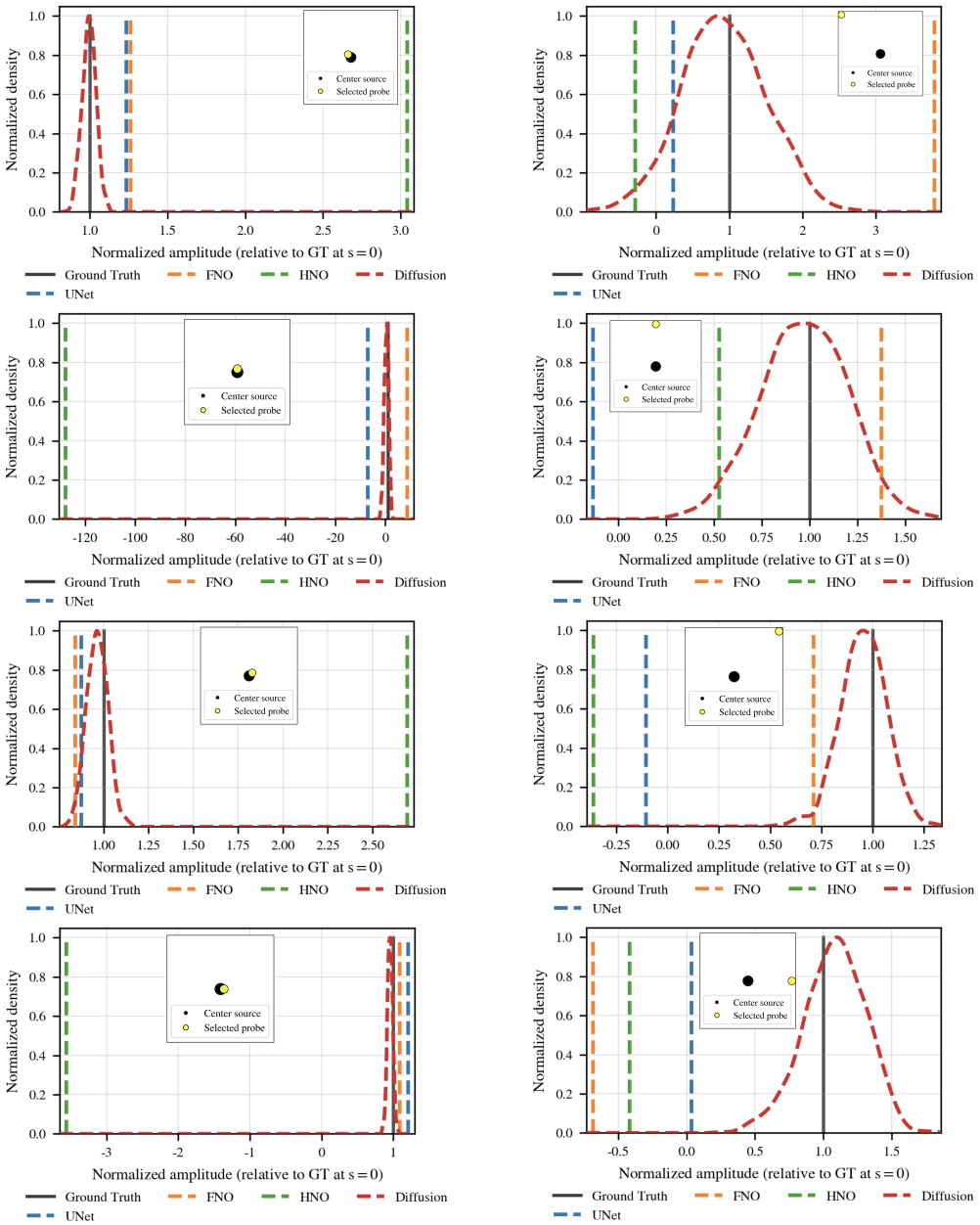
在近处和远处均布置探针，可直接考察源距依赖性 $L \propto k\,r/c_0$。我们采用两种互补的可视化方式：首先，沿固定方向 d 采样，以展示单一路径上的变化率；其次，在固定 s 下跨不同方向进行核密度估计（KDE），以估算 u 在随机系数扰动下的推前变化性。因此，我们在统一的实验设计中，考察 c_0 附近（在s=0 和 s=0.1处）以及有限振幅（约在 $s \approx 1$处）下的局部敏感性。在最高频率（2.5×10^6 赫兹）下，采样图显示出明显差异：在近源探针处，扩散模型和大多数确定性模型都能沿整条路径跟随真实轨迹 $u^\star(s,\ d^\star;\ y,\ x)$，振幅和相位均与之吻合；但在近边界探针处，差异显著扩大——只有扩散模型能够重现复轨迹快速、非单调的振荡和转折点，而大多数确定性模型则出现漂移或变平，这与图2(图5)中的边界过度平滑现象一致。

在密度图视图中，在 s=0所有输入均满足 $c^{(d)}(0) = c_0$，因此求解器产生单一尖峰；确定性模型也会产生尖峰，但相对于求解器的值有偏，而扩散模型给出狭窄但非退化的预测分布，该分布覆盖真实值尖峰——这反映出在高频率下，映射 $c \mapsto u$ 实际上是一对多的（相位模糊、离散化/模型失配和测量噪声使得同一输入下多个波场都是合理的）。我们将这种随机性转化为优势，因为扩散模型学习的是 $p(u \mid x)$而非单一点，从而量化推前分布，而不是锁定一个可能有偏的均值（图6至8）。在 s=1，只有扩散模型捕捉到真实值在各方向上宽广的振幅分布，这再次与定性的边界行为一致（图2和6 至8）。我们还注意到，对于所有敏感性图，我们对每个输入使用一个扩散模型样本，以展示预测分布而非其均值。



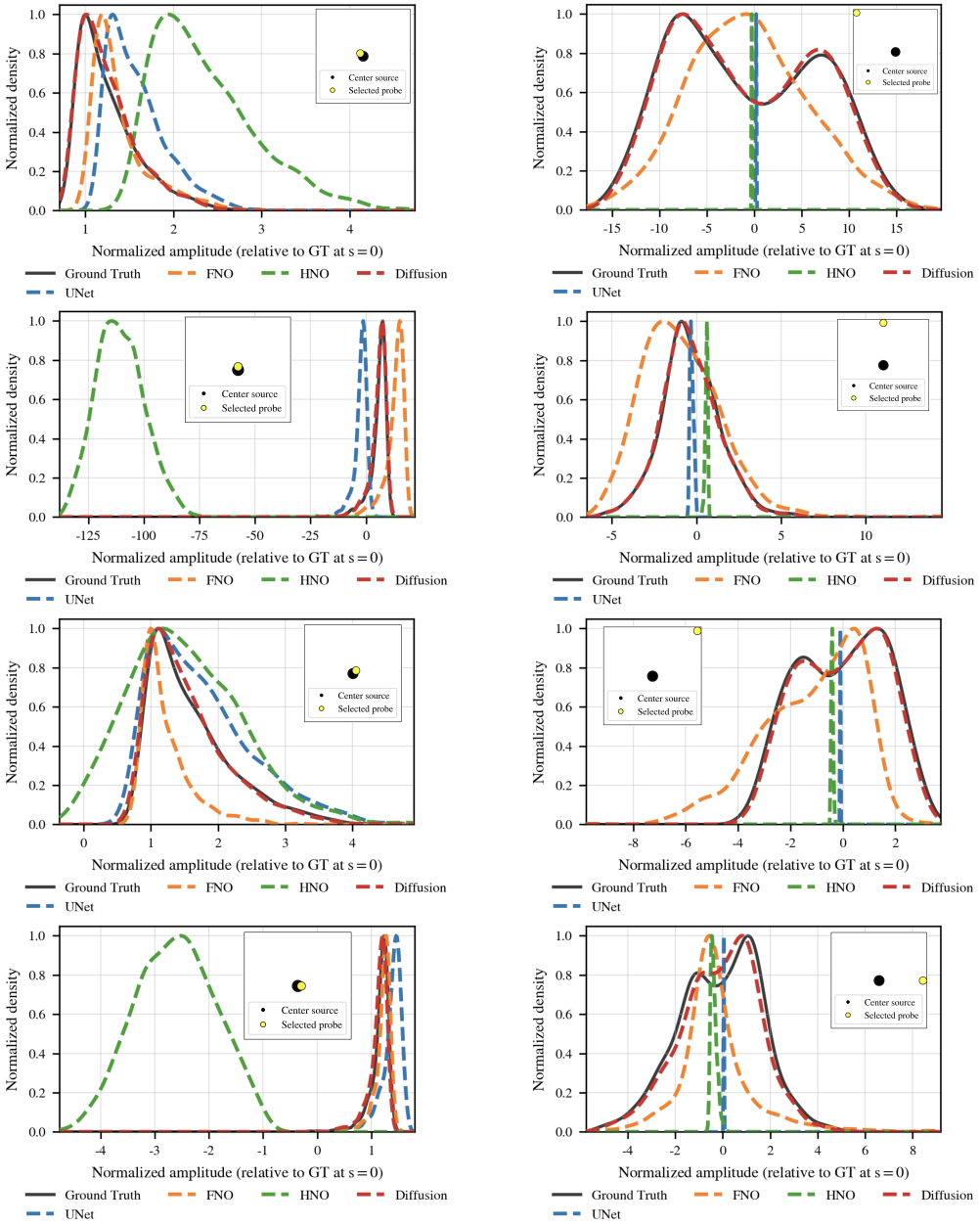
近源　　近边界

图5：**沿系数路径采样d=1（全部4个近探针与全部4个远探针）**。对于每对介质，我们对声速 $c_s = (1-s)c_0 + s\,c_1$ 进行线性插值，使用 $s \in [0,1]$，并跟踪固定探测像素处的波场振幅。左列：近源探针。右列：近边界探针。



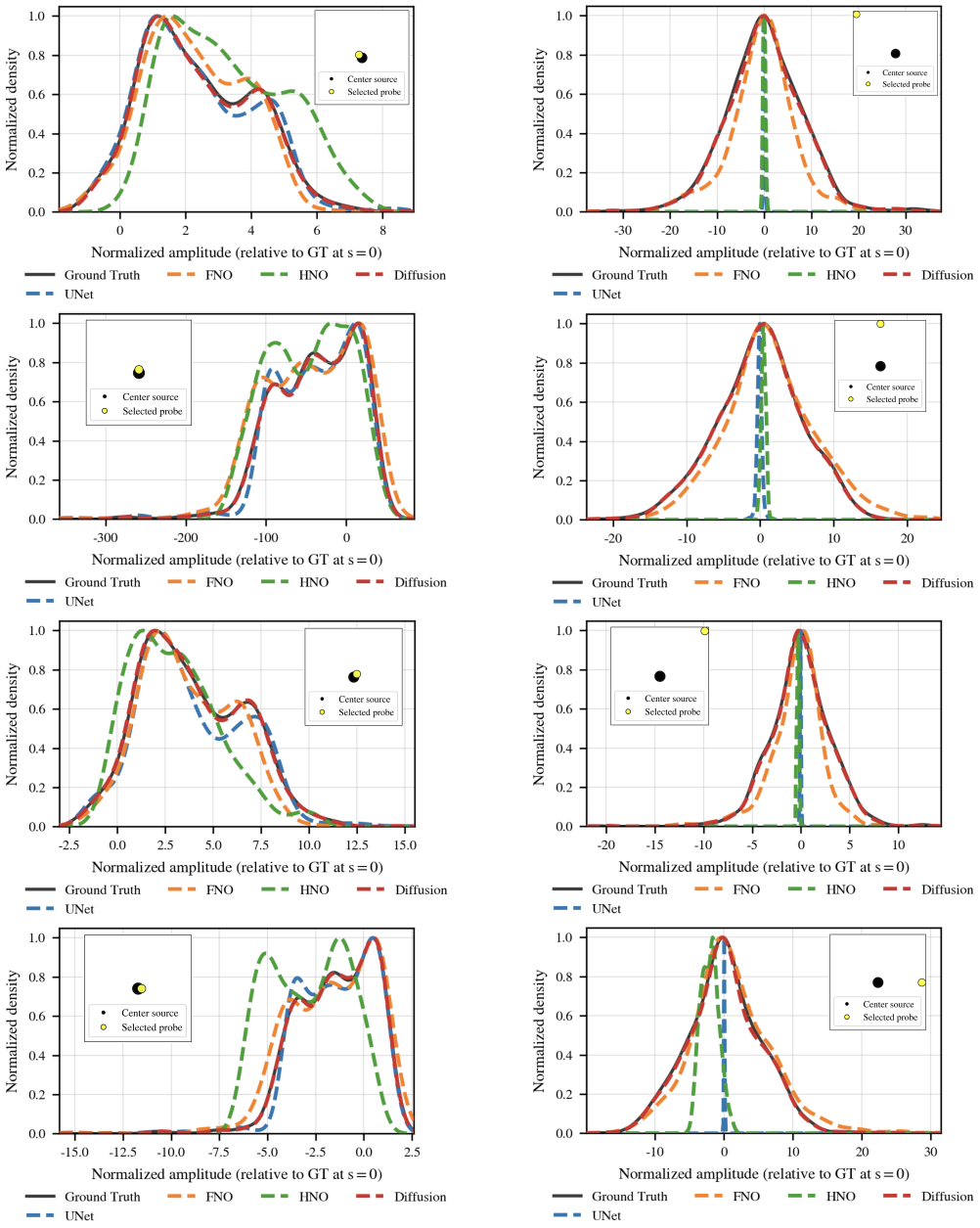
近源　　近边界

图 6： **s=0 各方向的核密度估计（全部 4 个近源与全部 4 个远源）**。左列：靠近源。右列：靠近边界。



近源　　近边界

图 7：**s=0.1 在不同方向上的核密度估计（全部 4 个近点与全部 4 个远点）**。左列：近源。右列：近边界。



近源　　近边界

Figure8: **s=1 各方向上的核密度估计（全部 4 个近源与全部 4 个远源**
）. 左列：靠近源。右列：靠近边界。

5.3. 三维亥姆霍兹问题的初步拓展

我们的框架可以直接拓展到三维问题，本小节将对此进行探讨。三维问题带来的计算挑战要求采用更高效的扩散框架。因此，我们采用视觉变换器作为扩散模型的骨干网络，以展示概率方法的优越性，并通过误差分析加以量化。

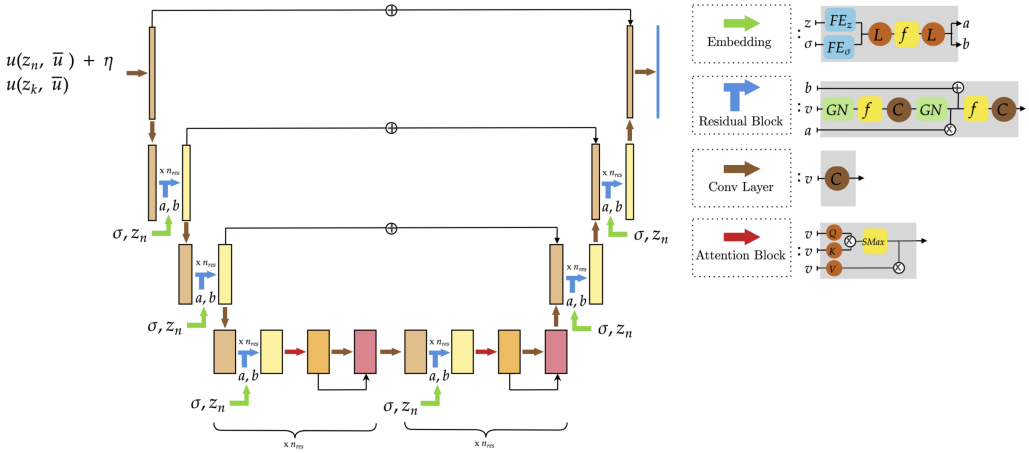


图 9：扩散模型中使用的条件式 UViT 骨干网络架构 1.

5.3.1. 网络骨干——*UViT*

在二维问题中确立主要结果后，我们接下来将框架拓展到三维亥姆霍兹波场。这一过渡中的一项关键方法变化是扩散模型所采用的骨干网络：许多先前的扩散模型替代模型依赖 U-Net 风格的卷积神经网络骨干，而我们采用 U 形视觉变换器（UViT），以更好地捕捉在三维中更为显著的长程空间依赖和全局干涉模式。鉴于三维问题的数据和计算复杂度显著更高，我们将这些实验视为初步研究：本节仅关注误差分析，完整的敏感性研究（如二维问题中的研究）留待未来开展。

我们的 UViT 骨干网络如图 9 所示，是一种受 [50] 启发并在此针对亥姆霍兹波场加以改造的 U 形视觉变换器。该网络在编码器—解码器层级结构中处理多尺度特征图。在每个分辨率层级，它应用残差块堆叠（蓝色），并在选定尺度上可选地与自注意力块（红色）交错。下采样

与上采样路径通过跳跃连接相连，如同标准 U-Net，以保留细尺度信息，同时实现全局上下文聚合。

表2：三**维亥姆霍兹误差（网格** 64^3 **上）**。我们的频率下， $N = 500$ 个测试样本的相对 L^2、 H^1 和能量误差（均值± 标准差，截断至 ≤ 1）。Diffusion–UViT 的表现始终优于 Diffusion–UNet 和原始 U-Net。

频率（赫兹）	**指标**	**Diffusion–UNet**	**Diffusion–UViT**	**仅 U-Net**
5×10^5	L^2	0.030	**0.013**	0.180
	H^1	0.050	**0.019**	0.287
	能量	0.041	**0.019**	0.102
1.0×10^6	L^2	0.032	**0.011**	0.295
	H^1	0.049	**0.016**	0.455
	能量	0.037	**0.012**	0.170
1.5×10^6	L^2	0.063	**0.016**	0.874
	H^1	0.091	**0.024**	1.000
	能量	0.101	**0.014**	0.752
2.5×10^6	L^2	0.159	**0.078**	0.967
	H^1	0.229	**0.112**	1.000
	能量	0.178	**0.049**	0.793

对扩散时间 σ 和潜代码 z_n 的条件化（图9中的绿色箭头）通过逐特征仿射调制实现。具体而言，(z_n, σ)由傅里叶编码器FE_z 和FE_σ嵌入，再经线性层映射为缩放与平移向量(a, b)。在每个残差块内，这些参数通过FiLM风格变换 $a \odot v + b$调制归一化特征，其中 v 表示当前特征图。残差块由组归一化（GN）、逐点非线性函数 f和卷积层 C组成，如图9右侧所示。注意力块采用标准多头自注意力，包含查询–键–值投影(Q, K, V)和softmax算子，并作用于相应分辨率下展平的空间令牌。

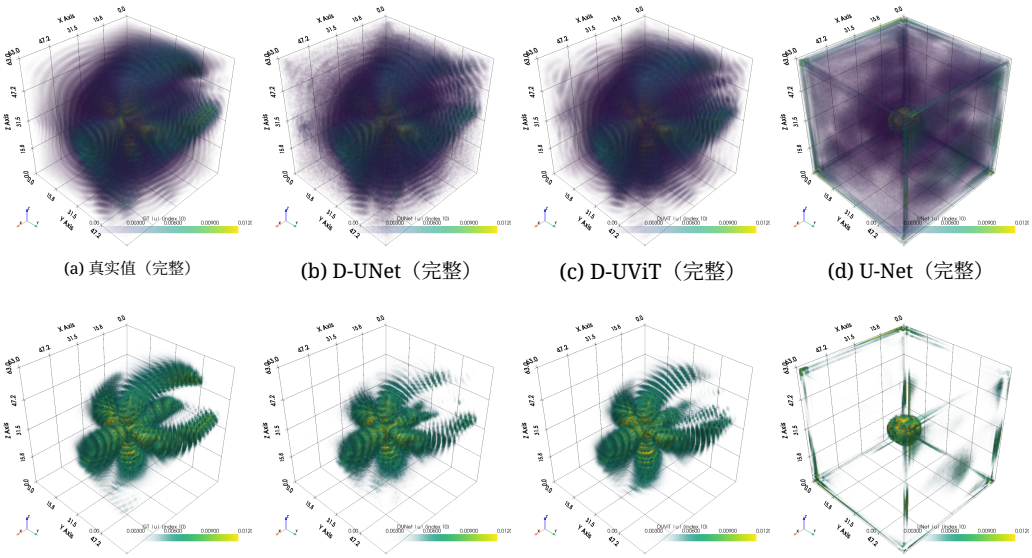
总体而言，该骨干网络将U-Net的局部性与多尺度结构同Transformer的长程交互及灵活条件化相结合，使其成为三维亥姆霍兹波场扩散建模的有力架构选择。

5.3.2. 三维结果

在将 UViT 骨干网络作为基于扩散的算子的主要架构升级方案介绍之后，我们现在评估这些模型在完整三维亥姆霍兹问题上的表现。我们考虑 64^3 网格和四种频率：5×10^5、10_6、 1.5×10^6 和 2.5×10^6 赫兹。我们从 5×10^5 赫兹开始，因为在

二维实验中，所有模型在较低频率（例如 1.5×10^5 和 2.5×10^5 赫兹）下的表现已经相当出色，而只有随着频率升高，性能差距才开始显著。因此，将三维研究聚焦于 5×10^5 赫兹及以上的频率，能够突出更具挑战性的高频区间，此时相位误差和干涉效应会被放大。

在此设定下，我们比较三种模型：采用 U-Net 骨干网络的扩散模型（*Diffusion–UNet*）、采用 UViT 骨干网络的扩散模型（*Diffusion–UViT*），以及一个经过训练、用于直接预测波场的确定性 U-Net。我们保留了两种扩散模型，以隔离骨干网络架构的影响，并在相同的概率（扩散模型）框架下，直接评估从卷积 U-Net 骨干网络转向基于变换器的 UViT 骨干网络所带来的优势。



(a) 真实值（完整） (b) D-UNet（完整） (c) D-UViT（完整） (d) U-Net（完整）

(e) 真实值（阈值处理后） (f) D-UNet（阈值处理后） (g)D-UViT（阈值处理后） (h) U-Net（阈值处理后）

图 10：使用体渲染从固定视点展示的三维亥姆霍兹波场示例：上排展示完整的三维可视化结果；下排通过设置阈值聚焦于中心区域，以进一步呈现差异。

在所有模型中，相对 L^2、 H^1和能量误差均随频率增加，这与二维情形一致。然而，*Diffusion–UViT* 在每个频率下都取得了最低误差，表现显著优于*Diffusion–UNet* 和确定性 U-Net。图10中的三维渲染定性地印证了这些定量趋势：确定性 U-Net 的预测

仍过度集中于区域中心，而两种扩散模型都能更好地恢复边界附近的波动结构。其中，$Diffusion\text{-}UViT$ 生成的边界重建最清晰，整体干涉图样也最为逼真。

6. 结论

本文提出了一种新颖的概率机器学习框架，用于求解高频区间内的确定性亥姆霍兹方程。通过将条件扩散模型用作概率算子，我们表明，与确定性神经算子相比，学习波场的分布能够显著提升准确率和鲁棒性，尤其是在频率升高时。在所有测试频率下，扩散模型均取得了更低的L^2、 H^1和能量误差，并且在最高频率情况下，性能差距明显扩大（表 1）。定性比较进一步表明，扩散模型能够保留干涉图样和远场结构，而确定性替代模型会系统性地将其平滑掉（图2）。

这些结果源于亥姆霍兹方程在高频下的敏感性结构。如第3节所示，声速场中的微小扰动会累积为相位误差，其尺度随 k 以及距源的距离而增大，使得解映射在高 k 频和远场区域呈现剧烈变化。在这一情形下，使用均方误差训练的点估计替代模型实际上会对相位变化进行平均，即使训练数据包含完全解析的解（正如我们的 U-Net、FNO 和 HNO 预测结果所示），也会导致振荡衰减和相位相干性丧失。相比之下，扩散模型表示的是解的条件分布，而不是将输出限定为单一结果。当量在相位变化下仍保持稳定时，这一区别尤为重要。在我们的实验中，即使在确定性替代模型显著退化的频率下，扩散模型仍能持续高准确率地预测能量型泛函。恰恰在逐点复场变得脆弱时，对样本中的能量进行平均能够提供可靠的估计量。

敏感性实验强化了这一解释。沿系数函数空间中受控的扰动路径，扩散模型更忠实地跟踪求解器轨迹，包括由累积相位误差引起的非单调行为，而确定性模型往往会趋于平坦或偏离参考解。当跨扰动方向进行聚合时，扩散模型捕捉到了不断增大的推前变化性，即

求解器响应，而确定性算子则系统性地遗漏了解的变化性的若干分量。尽管亥姆霍兹方程定义了一个确定性映射，这些结果表明，在未解析的变化性与离散化失配条件下，非均匀介质中的高频预测实际上是一对多的，并且对条件分布进行建模能够提供更忠实的代理。

改进该框架的一个重要方向是降低其计算成本。要达到最高准确率，需要许多扩散步数，这会增加推理时间，相较于确定性算子尤为如此——不过成本仍仅为直接求解器的一小部分。基于此处的框架，我们认为，通过流匹配训练 [56]，改进常微分方程/随机微分方程求解器 [57]，或潜空间扩散或分块扩散来加速推理，是未来顺理成章的研究方向。除了提升效率之外，将该框架扩展到更复杂的几何形状、多源配置和完整的三维传播场景，将进一步检验其稳健性。我们的初步三维结果已表明，在这一场景中，将概率算子与能够捕捉长程交互的架构相结合，可以显著提高保真度。

资金支持

本研究的部分经费由杜克大学提供。

CRediT 作者贡献声明

Yicheng Zou：概念构思、方法学、软件、数据整理、形式分析、调查研究、可视化、撰写初稿。Samuel Lanthaler：方法学、形式分析、监督指导、审阅与编辑。Hossein Salahshoor：概念构思、方法学、形式分析、监督指导、经费获取、项目管理、审阅与编辑。

利益冲突声明

作者声明，不存在已知的可能影响本文所报告工作结果的利益冲突或个人关系。

数据可用性

用于复现所有图表和表格的代码与脚本可在以下地址获取：
https://github.com/YichengZou626/Diffusion-Model-for-High-Frequency-Helmholtz。
本研究生成的数据集、模型训练及后处理流程均已在该代码仓库中说明。

附录 A. 方法细节

附录 *A.1.* 高斯随机场

我们通过在仿真网格上采样平稳高斯随机场（GRF），并将其映射为声速，从而合成非均匀声学介质。具体而言，我们在傅里叶域中构造零均值高斯随机场：用指数谱包络对复白噪声进行滤波，再施加逆实快速傅里叶变换（见算法1）。由此得到具有可控光滑性与相关长度的一系列系数场，为正文中的亥姆霍兹算子学习基准提供跨频率的真实值数据集。

算法1 基于谱高斯随机场采样非均匀声速场 要求：网格尺寸 (N_x, N_y)；背景声速 c_{bg}；尺度 σ_c；边界$[c_{\min}, c_{\max}]$1: 采样超参数： $\alpha \sim \mathcal{U}$**(0.5, 2.5),** $\ell \sim \mathcal{U}$**(0.35, 0.7) 2: 构造频率网格** $k_x =$**fftfreq(**N_x**),** $k_y =$**rfftfreq(**N_y**)；形成网格**$K = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$**3: 定义谱包络** $\lambda \leftarrow$ **exp**$\big(-(\ell\, K)^{\alpha}\big)$**4: 重复 5: 抽取复白噪声** $\eta \leftarrow \eta_{\mathrm{r}} + i\,\eta_{\mathrm{i}}$**，其中** η_{r}**、** η_{i} **独立同分布**$\sim \mathcal{N}$**(0, 1) 6: 谱场** $\hat{}$ $u \leftarrow \lambda \odot \eta$**7: 实现** $u \leftarrow$ **irfft2(**$\hat{}u$**;** N_x, N_y**)；均值中心化：** $u \leftarrow u -$ **mean(**u**) 8: 映射为声速：** $c(x) \leftarrow c_{\mathrm{bg}} + \sigma_c\, u(x)$ **9: 直至** $c_{\min} < c(x) < c_{\max}$ **对所有网格点** x**10: 返回** c

附录 *A.2.* 一维亥姆霍兹的数据生成

我们通过一项匹配的一维亥姆霍兹实验补充二维研究，该实验采用相同的数据—模型流程，但将 J-Wave 替换为有限差分频域（FDFD）亥姆霍兹求解器。给定来自与二维研究相同 GRF 族的

波速样本，我们组装 $-u''+k(x)^2u=0$ 的三对角系统，左侧采用狄利克雷源，右侧采用 Sommerfeld（出射）边界，并以带状形式求解（见算法 2）。我们评估 5 个频率 $f\in\{1.5\times10^5,\,2.5\times10^5,\,5\times10^5,\,7.5\times10^5,\,1\times10^6\}$赫兹。

算法2 一维FDFD亥姆霍兹求解器

要求： 波速样本 $c[0{:}\ N-1]$ 在 $[0,L]$上，频率输入（角 $\omega\leftarrow 2\pi f$）

确保： 复场 $u[0{:}\ N-1]$ 求解 $-u''(x)+k(x)^2u(x)=0,\ k(x)=\omega/c(x)$

$\Delta x\leftarrow L/(N-1)$

对于 $j=0$ 至 $N-1$，**执行**

$k[j]\leftarrow\omega/c[j]$

</style>结束循环

分配 ab $\in\mathbb{C}^{3\times N}$ 和 $b\in\mathbb{C}^N$；初始化为 0

内部模板（通过对角线隐式表示）：

设置 $\mathsf{ab}[0,j-1]\leftarrow 1$，$\mathsf{ab}[1,j]\leftarrow -2+(k[j]\Delta x)^2$，$\mathsf{ab}[2,j+1]\leftarrow 1$ 对于 $j=1,\ \ldots\ldots,\ N-2$

左边界条件（狄利克雷） $u(0)=\omega$:

$\mathsf{ab}[1,0]\leftarrow 1$；$\mathsf{ab}[0,1]\leftarrow 0$；$b[0]\leftarrow\omega$

右边界条件（索末菲尔德） $u'(L)+ik(L)u(L)=0$:

$\mathsf{ab}[1,N-1]\leftarrow ik[N-1]\Delta x-1$；$\mathsf{ab}[2,N-1]\leftarrow 1$；$b[N-1]\leftarrow 0$

求解 $\mathsf{ab}\cdot u=b$ with a 三对角 带状 求解器 （例如，求解_带状((1,1), ab, b)）

返回 u

附录 *A.3.* 去噪器架构（条件 *U-Net*）

卷积（一维卷积/二维卷积）。令 $z\in\mathbb{R}^{H\times W\times C}$ 为输入张量，且 $K\in\mathbb{R}^{k\times k\times C\times\widehat{C}}$ 为产生 $\widehat{C}$ 个输出通道的卷积核组。对于步幅 $s\in\mathbb{N}$，$\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$ $\widehat{\ }$离散多通道卷积 $\mathcal{C}$： $\mathbb{R}^{H\times W\times C}\to\mathbb{R}^{H\times W\times C}$ 为

$$\big(\mathcal{C}(z)\big)[i,j,\widehat{\ell}]=\sum_{m=0}^{k-1}\sum_{n=0}^{k-1}\sum_{\ell=1}^{C}K[m,n,\ell,\widehat{\ell}]\;z[i\,s{+}m,\;j\,s{+}n,\;\ell],\quad \begin{array}{l} i=0,\ldots,\widehat{H}{-}1,\\ j=0,\ldots,\widehat{W}{-}1,\\ \widehat{\ell}=1,\ldots,\widehat{C}.\end{array}\tag{A.1}$$

（为处理越界索引，我们使用循环 填充，以减轻类相位亥姆霍兹场中的边界伪影。）编码器通过 $k{=}3$ 进行下采样，

步幅为 $s{=}2$ （第一个尺度不使用步幅），而解码器则通过倍率为 2 的最近邻上采样，再接一个 $k{=}3$ 细化卷积，以此与之对应。

激活函数（*SiLU*）。我们使用 SiLU 非线性函数，并配合 $\beta{=}1$。对于标量 z，

$$\mathrm{SiLU}(z) \;=\; z\,\sigma(z) \;=\; \frac{z}{1+e^{-z}},$$

其中 $\sigma(z)$ 是逻辑 sigmoid 函数。SiLU 是平滑且具有自门控特性的（输入会调节其自身的直通传递），与 ReLU 不同，它能保留较小的负激活值。

归一化。为在偏微分方程场景中以小批量数据进行训练时保持稳定，我们通过组归一化（GN）或层归一化（LN）对激活值进行归一化。

组归一化（*GN*）。给定 $z \in \mathbb{R}^{H\times W\times C}$，将通道轴划分为$G$ 个大小为 C/G 的组。令 $\mathcal{G}_g$ 为组 g 的索引集合，其中 $m = HW\cdot(C/G)$。每组的统计量和归一化如下：

$$\mu_g = \frac{1}{m}\sum_{(h,w,c)\in\mathcal{G}_g} z_{h,w,c}, \qquad \sigma_g^2 = \frac{1}{m}\sum_{(h,w,c)\in\mathcal{G}_g} (z_{h,w,c}-\mu_g)^2, \tag{A.2}$$

$$\widehat{z}_{h,w,c} = \frac{z_{h,w,c}-\mu_g}{\sqrt{\sigma_g^2+\varepsilon}}, \quad (h,w,c)\in\mathcal{G}_g, \qquad \widetilde{z}_{h,w,c} = \gamma_c\,\widehat{z}_{h,w,c} + \beta_c, \tag{A.3}$$

其中包含可学习的逐通道缩放参数 γ_c 和偏移参数 β_c。

层归一化（*LN*）。LN 对一个样本的所有特征进行联合归一化（通道+空间）。令 $\mathcal{I} = \{(h,w,c)\colon\ 1\le h\le H, 1\le w\le W, 1\le c\le C\}$ 和$M = HWC$。那么

$$\mu = \frac{1}{M}\sum_{(h,w,c)\in\mathcal{I}} z_{h,w,c}, \qquad \sigma^2 = \frac{1}{M}\sum_{(h,w,c)\in\mathcal{I}} (z_{h,w,c}-\mu)^2, \tag{A.4}$$

$$\widehat{z}_{h,w,c} = \frac{z_{h,w,c}-\mu}{\sqrt{\sigma^2+\varepsilon}}, \qquad \widetilde{z}_{h,w,c} = \gamma_c\,\widehat{z}_{h,w,c} + \beta_c. \tag{A.5}$$

为简单起见，我们在代码中默认使用层归一化。

扩散时间嵌入。去噪器通过正弦傅里叶特征映射和一个小型多层感知机，以扩散时间 $t \in [0,1]$为条件：

$$\begin{aligned}\phi(t) &= \Big[\cos(\omega_1 t),\dots,\cos(\omega_{64} t),\ \sin(\omega_1 t),\dots,\sin(\omega_{64} t)\Big] \in \mathbb{R}^{128},\\ \omega_r &= \tfrac{\pi}{2}\cdot 10^{3\,\frac{r-1}{63}}.\end{aligned} \tag{A.6}$$

这会生成跨越多个数量级的多尺度时间特征。随后，另一个多层感知机将 $\phi(t)$ 映射到每个残差块的条件宽度：

$$e(t) \;=\; \mathrm{Linear}_{128\to 256}\big(\phi(t)\big) \xrightarrow{\text{SiLU}} \mathrm{Linear}_{256\to d} \;\in\; \mathbb{R}^d, \tag{A.7}$$

随后，每个尺度的线性投影会将 $e(t)$ 广播到整个空间，并在两个 k=3卷积之前，以加法方式将其注入每个上下文残差块 中（采用特征线性调制风格的条件化）。这确保了去噪决策在每个分辨率下都能感知时间信息。

坐标的位置编码。除了时间条件化之外，我们还将正弦空间 编码与输入通道拼接。在二维情况下，

$$\Big\{\sin(2^\ell \pi x),\ \cos(2^\ell \pi x),\ \sin(2^\ell \pi y),\ \cos(2^\ell \pi y)\Big\}_{\ell=0}^{L-1}. \tag{A.8}$$

这些多频率位置线索有助于在整个区域内对齐相位和干涉图样，尤其是在亥姆霍兹波数 k 较高时。

U-Net 布局。此处我们说明论文中仅作了概述的实现选择。骨干网络采用带有跳跃连接的编码器–解码器，并使用上下文残差块在每个深度注入扩散时间嵌入 $e(t)$。在尺度 s 、通道宽度为 C_s时，一个模块采用 FiLM 风格的加性条件化，并使用两个宽度相同、带归一化和 SiLU 激活的卷积：

$$z \leftarrow z \;+\; \underbrace{\Big(\mathrm{Conv}_3\big(\sigma(\mathrm{Norm}(z + \Pi_s e(t)))\big) \to \mathrm{Conv}_3\Big)}_{\text{residual branch}},$$

其中 Π_s：$\mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{C_s}$ 是对 $e(t)$进行线性投影后，再沿空间维度广播反展平；Conv_3 表示采用核大小为 3 的循环填充卷积（根据维度采用 Conv1d/2d），Norm 默认表示层归一化，σ 表示 SiLU。下采样“头部”采用步幅卷积（核大小为 3，除第一个尺度外，步幅均为 2）；上采样“尾部”依次执行 Norm、$\to$ 最近邻上采样和核大小为 3 的卷积，并与对齐的编码器特征相加（跳跃连接）。全程使用循环填充，以减少亥姆霍兹相位场中的边界伪影。

训练。我们将条件 U-Net 作为评分网络，在方差保持随机微分方程（VPSDE）框架下进行训练，使用张量 $X \in \mathbb{R}^{B\times C\times H\times W}$（包含 $H=W=256$）进行小批量去噪分数匹配，批量大小设为 $B=32$；通道堆叠包含一个被加噪的单个解通道，以及三个干净的条件通道（例如声速、源掩膜和位置编码）。每次迭代中，我们从 $t\sim$ Unif(0，1) 采样，利用前向函数中实现的 VPSDE 扰动核得到 u_t，并最小化均方去噪目标，

$$\mathcal{L}_{\mathrm{VPSDE}}(\theta)=\mathbb{E}_{u_0,z,t}\Big[w(t)\,\big\|\,s_\theta\big(u_t,z,t\big)-\tilde{y}(u_t,t)\big\|_2^2\Big], \tag{A.9}$$

其中 s_θ是 U-Net 去噪器，$\tilde{y}(u_t,t)$ 是由前向扩散产生的 VPSDE 目标，且 $w(t)\equiv 1$ 在我们的运行中；在代码中，这表现为 mse $=$ (net(u_t,z,t) $-$ output)^2，先在空间/通道维度上取平均，再对批次执行 mean()。每个 epoch 在所选 GPU 设备上遍历小批量，使用标准学习率调度器更新参数的指数移动平均，以获得更稳定的采样，并在无梯度的留出验证划分上评估同一损失。在推理时，我们使用不同的采样方法（更多细节见附录??）。

附录 *A.4.* 傅里叶神经算子（*FNO*）

我们实现了一个二维张量化傅里叶神经算子，作为强确定性基线。令 $z\in\mathcal{Z}\subset\mathbb{R}^{H\times W\times d_u}$ 表示输入通道堆叠（此处 d_z=3：声速、源掩膜、位置编码），$G_\phi:\mathcal{Z}\to\mathcal{Y}$为产生目标波场的学习算子。FNO 的组成如下

$$G_\phi \;=\; Q\circ L_L\circ\cdots\circ L_1\circ R,$$

通过一个提升 $R:\mathbb{R}^{d_u}\to\mathbb{R}^{d_v}$（逐点 1×1 卷积），将通道宽度增加到 d_v，接着是 L 个傅里叶层 L_ℓ，再通过一个投影 Q: $\mathbb{R}^{d_v}\to\mathbb{R}^{d_y}$（逐点输出头）恢复为输出通道。每个傅里叶层都是

$$v_{\ell+1}(z)\;=\;\sigma\Big(W_\ell v_\ell(z)\;+\;\mathcal{F}^{-1}\big[\,P_\ell(k)\,\cdot\,\mathcal{F}[v_\ell](k)\,\big](z)\Big), \tag{A.10}$$

其中 $v_\ell\in\mathbb{R}^{H\times W\times d_v}$, W_ℓ是一个可学习的局部（线性/跳连）算子，$\mathcal{F}$是二维快速傅里叶变换，$P_\ell(k)\in\mathbb{C}^{d_v\times d_v}$ 是仅应用于截断模态带上的可学习复乘子。这里，我们在每个傅里叶层中保留（n^h_{modes}，n^w_{modes}）=(64，64)，并使用 GeLU非线性（预激活=0）；谱

更新采用因子化/张量化变体，通过低秩因子（秩为=1.0）对 $P_\ell(k)$进行参数化，从而减少内存占用并提升 256×256下的稳定性。每个谱块之后，轻量级通道多层感知机（使用_通道_多层感知机=1，扩展系数=0.5，丢弃率=0）会在空间域中混合特征。我们采用组归一化和线性残差跳连，域填充默认关闭。该架构在谱块内使用 $L = 4$ 个傅里叶层，隐藏宽度为 d_v =32，投影比为 2×；输入为_个数据=3通道，每个分量生成一个输出通道。优化遵循标准的算子学习实践：使用 AdamW 训练 1000 个 epoch（学习率= 5×10^{-3}，权重衰减 $= 10^{-4}$），批量大小为 32，采用 StepLR 调度器（步长=60， $\gamma = 0.5$），并使用 H^1 训练损失以提升梯度保真度。总体而言，这一 FNO 基线提供了一个公平的确定性对照，重点是在受控的内存和计算条件下评估频域精度。

附录 *A.5.* 亥姆霍兹神经算子（*HNO*）

我们的 HNO 基线采用 UNO 风格的谱算子，并针对 256×256 网格设计了 U 形跳跃连接。输入为包含 H=W=256 和 C=3 个通道的张量 $z \in \mathbb{R}^{B\times H\times W\times C}$（声速、源掩膜、位置特征）；输出为 $u \in \mathbb{R}^{B\times H\times W\times 1}$。随后，我们将坐标网格（线性 $[0, 1]$）拼接到输入中，通过两个逐点多层感知机（fc_n1、fc0）进行升维，将维度置换为 (B， C， H， W)，再输入八个算子块，这些算子块采用编码器–解码器拓扑结构和跳跃拼接。每个算子块为

二维算子块：
$$\underbrace{\text{SpectralConv2d_Uno}}_{\text{FFT}\,\to\,\text{low-rank spectral map}\,\to\,\text{iFFT}} + \underbrace{\text{pointwise_op_2D}}_{\text{1X1 conv}\,+\,\text{bicubic resize}} \xrightarrow{\text{GELU}} \text{MLP(1x1)} \xrightarrow{\text{LayerNorm}} \text{residual add} \xrightarrow{\text{GELU}}.$$

谱层通过 $z \mapsto \mathcal{F}^{-1}\big(P(\mathbf{k}) \odot \mathcal{F}z\big)$ 执行卷积，使用两个可学习复权重张量（weights1、weights2），分别作用于保留模态的正、负垂直频带。与此同时，逐点 1x1 卷积通过双三次插值进行上／下采样，以匹配模块的输出分辨率，并与谱路径相加，从而提升局部性并稳定高-k 内容。每个模块最后通过一个多层感知机（两个带 GeLU 的 1x1 卷积）和对 [H,W], 的层归一化，再与逐点分支进行残差相加并应用 GeLU。U 形路径依次采用分辨率 (256,256) → (128,128) → (64,64) → (32,32)，随后再逐级返回；各尺度对应的模态预算为：conv1: (维度 $= 256, 256$；模态 $= 192, 96$)，conv2: (128, 128；128,64)，conv3: (64, 64；64, 32)，conv4: (32,32；32,16)，上行路径则采用对称数值，

解码器之后，将特征与提升后的输入拼接，再通过核多层感知机投影为逐像素标量核，并通过归一化的爱因斯坦求和与特征收缩，得到逐像素归约结果。最后，一个双层输出头通过双曲正切映射生成输出。

训练过程中，我们将 UNO2D 实例化为宽度=16、输入通道数_、输出通道数=3，并使用 Adam（学习率_，权重衰减=1 ）、StepLR（步长 256×256 ，10^{-3}）和批量大小 32 进行训练，最多训练 1000 个 epoch，训练数据为 10^{-5} 个场。损失函数结合了 =30，并在每次遍历时针对实部进行训练。因此，这个 HNO 基线实现了一种频域、多尺度谱算子，将学习得到的傅里叶乘子与局部逐点更新及 U 形跳跃连接相结合，为我们用于亥姆霍兹问题的概率扩散算子提供了强有力的确定性对照。

附录 B. 采样器消融实验

基于第 5.1 节将去噪扩散概率模型作为默认选择的理由，我们现在介绍采样器消融实验中考察的三种采样程序。设 $\{\beta_t\}_{t=1}^{T}$ 为离散噪声调度表（线性或余弦）， $\alpha_t := 1-\beta_t$， 且$\bar{\alpha}_t := \prod_{s=1}^{t}\alpha_s$。 前向过程为 $q(z_t \mid z_0)$ $= \mathcal{N}\big(\sqrt{\bar{\alpha}_t}\, z_0, (1-\bar{\alpha}_t)I\big)$， 网络在给定条件 c时预测噪声 $\varepsilon_\theta(z_t, t, c)$。去噪扩散概率模型（祖先采样）：我们使用标准的高斯反向转移

$$
\begin{aligned}
p_\theta(z_{t-1} \mid z_t, c) &= \mathcal{N}\Big(z_{t-1};\, \mu_\theta(z_t, t, c),\, \tilde{\beta}_t I\Big), \\
\mu_\theta(z_t, t, c) &= \frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(z_t - \frac{\beta_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\,\varepsilon_\theta(z_t, t, c)\right).
\end{aligned}
\tag{B.1}
$$

采用后验方差 $\tilde{\beta}_t = \frac{1-\bar{\alpha}_{t-1}}{1-\bar{\alpha}_t}\,\beta_t$。我们对线性 和余弦 调度表以及步数预算 $T \in \{10, 50, 100, 1000\}$进行消融实验。在 T步中，每一步的更新都会抽取$z \sim \mathcal{N}$ $(0, I)$（$t > 1$），并将 $z_{t-1} = \mu_\theta + \sigma_t z$设为 $\sigma_t = \sqrt{\tilde{\beta}_t}$。去噪扩散隐式模型（隐式）：使用相同的调度表，定义预测的干净样本 $\hat{z}_0(z_t, t, c) = \frac{1}{\sqrt{\bar{\alpha}_t}}\big(z_t - \sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\,\varepsilon_\theta(z_t, t, c)\big)$。对于递减序列$t_1 > t_2 > \cdots > t_S$，去噪扩散隐式模型以确定性方式（$\eta$=0）更新：

$$
z_{t_{i+1}} \;=\; \sqrt{\bar{\alpha}_{t_{i+1}}}\,\hat{z}_0 \;+\; \sqrt{1-\bar{\alpha}_{t_{i+1}}}\,\varepsilon_\theta(z_{t_i}, t_i, c), \tag{B.2}
$$

或以 $\eta \in [0, 1]$ 随机地进行，方法是将第二项分解为一个ηz 分量加上一个$(1-\eta^2)$ $^{1/2}\varepsilon_\theta$ 分量。在我们的消融实验中，我们使用余弦 调度表，并报告 η=0 （确定性）情形。基于分数的随机微分方程

表 B.3：**在 $f = 2.5 \times 10^6$ 赫兹下的采样器-步数消融实验**（相对误差；越低越好）。除非另有说明，均采用余弦调度。数值四舍五入至小数点后三位；每项指标的最佳值以**粗体**标示。

	$\mathcal{E}_{L^2}\downarrow$				$\mathcal{E}_{H^1}\downarrow$				$\mathcal{E}_{\text{energy}}\downarrow$			
采样器	**10**	**50**	**100**	**1000**	**10**	**50**	**100**	**1000**	**10**	**50**	**100**	**1000**
DDPM（线性）	0.999	0.956	0.942	0.918	0.999	0.797	0.720	0.631	0.999	0.949	0.932	0.901
DDPM（余弦）	0.457	0.268	0.234	**0.188**	0.180	0.106	0.095	**0.078**	0.138	0.100	0.093	**0.082**
DDIM（余弦）	0.470	0.333	0.305	0.284	0.189	0.139	0.129	0.122	0.137	0.122	0.124	0.125
SDE（余弦）	0.458	0.373	0.358	0.336	0.190	0.151	0.146	0.138	0.168	0.126	0.124	0.129

（连续时间）：在方差保持形式 $dz = -\frac{1}{2}\beta(t)\ z\,dt + \sqrt{\beta(t)}\,dW_t$中，从 t 到 $t - \Delta t$ 的闭式均值/方差映射可写为 $z_{t-\Delta t} = r(t, \Delta t)\ z_t + \big(\sigma(t-\Delta t) - r(t, \Delta t)\sigma(t)\big)\,\varepsilon_\theta(z_t, t, c)$，其中$r(t, \Delta t) = \mu(t - \Delta t)/\mu(t)$以及$(\mu, \sigma)$是VP–随机微分方程[1]的解析解缩放。这实现了连续时间中的祖先采样器，并且我们通过其离散化对应形式对 $\beta(t)$使用余弦调度表，并采用与上文相同的步数预算。在各方法中，去噪扩散概率模型逐步引入高斯噪声（多样性更高，在较小的 T处方差略高），去噪扩散隐式模型在给定相同 ε_θ 时提供确定性路径（方差更低，且在较小的 T处收敛更快），而随机微分方程采样器遵循由(μ, σ)控制的连续时间祖先更新。我们的消融实验（表 B.3）在相同网络与条件下比较这些选择。

表 B.4：**采样器-步数消融实验，$f = 2.5 \times 10^6$ 赫兹**（每 500 个样本的实际运行时间，单位为秒）。

	时间（秒）			
采样器	**10**	**50**	**100**	**1000**
DDPM（线性）	8.927	46.892	94.534	948.698
DDPM（余弦）	19.541	57.521	95.430	951.771
DDIM（余弦）	10.041	47.731	95.023	948.228
SDE（余弦）	9.752	47.713	94.918	947.771

除了准确率之外，我们还在表B.4中报告了每种采样器在不同步数预算下生成单个样本所需的实际运行时间。尽管目前的采样过程计算开销较大，但近期研究提出了速度快得多的替代方案，例如基于常微分方程的

[1]在代码中，mu() 和 sigma() 实现了这些缩放，我们从$1 \to 0$开始，以步长 $1/T$线性积分 t。

扩散模型采样器和指数积分器（EI）方案（例如 [57]提出的指数积分器方法）。我们计划在未来的工作中探索这些方法。因此，在其余所有实验中，我们采用具有 1000 个步数的余弦调度DDPM采样器作为默认设置，因为它在高频亥姆霍兹区域的准确率最高。

表B.5：**在 $f = 2.5 \times 10^6$ 赫兹下的模型规模、评估成本和准确率**。 参数数量为可学习参数总数；时间为单个样本的实际评估时间；误差为相对误差。直接使用 J-Wave 求解器作为参考，其相对误差为零。

模型	# 参数数量	评估时间（秒）	$\mathcal{E}_{L^2}$	$\mathcal{E}_{H^1}$	$\mathcal{E}_{\text{energy}}$
U-Net	91.9M	0.01	0.767	1.000	0.514
FNO	15.2M	0.07	0.412	0.494	0.141
HNO	73.1M	0.15	0.802	0.996	0.590
扩散（DDPM/1000）	92.6M	**1.83**	**0.095**	**0.135**	**0.036**
直接求解器（J-Wave）	—	23.84	—	—	—

为说明这一选择，表 B.5 比较了各基线模型及我们所选扩散配置的参数数量和每个样本的实际运行时间。即使采用 1000 个去噪步数，扩散模型的运行时间仍处于实用范围内，与确定性神经算子相比依然如此；而且，它的速度仍比数值亥姆霍兹求解器快几个数量级，后者在相同硬件上计算每个样本需要数分钟。

附录 C：补充结果

本节提供了更全面的定性和定量结果，以补充正文内容。

附录 *C.1*：数据示例

图 C.11 展示了不同频率下具有代表性的输入—输出对：随着驱动速率提高，亥姆霍兹解呈现出更密集的干涉条纹和更快的相位振荡。使用角频率 $\omega = 2\pi f$ 和局部声速 $c(x)$，波长为

$$\lambda(x) = \frac{2\pi\, c(x)}{\omega}.$$

平均声速为 $\bar{c}\approx 2000$（模拟单位），最大角频率为 $\omega_{\max} = 2.5 \times 10^6\,\mathrm{rad/s}$ 时，最短波长为

$$\lambda_{\min} = \frac{2\pi\,\bar{c}}{\omega_{\max}} = \frac{2\pi \times 2000}{2.5 \times 10^6} \approx 5 \times 10^{-3}.$$

我们采用间距为 $\Delta x = \Delta y = 10^{-3}$ 的均匀网格，每个最短波长包含 $\lambda_{\min}/\Delta x \approx 5$ 个样本，足以分辨真实波场中的精细振荡结构。

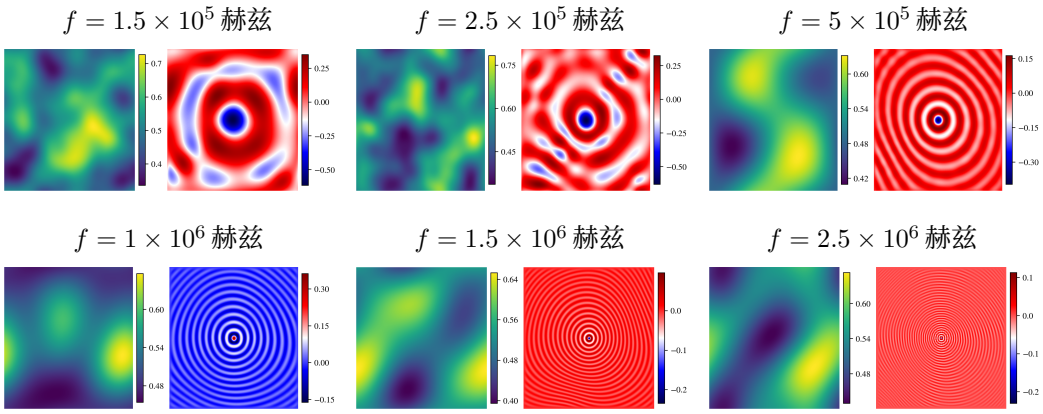
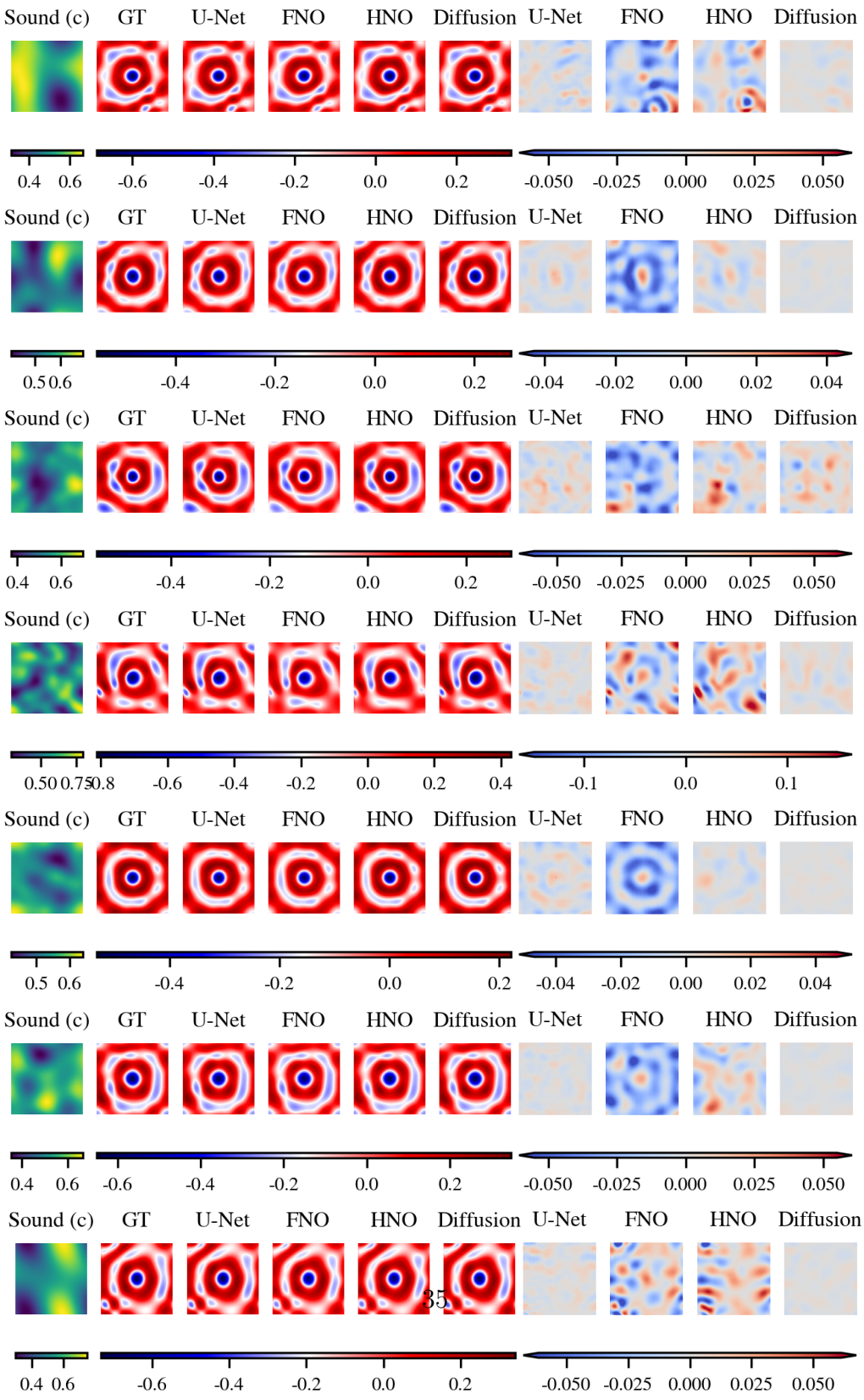


图 C.11：**按频率展示的输入—输出数据对**。每个小图展示一个随机抽取的测试示例：左侧为系数场 c；右侧为解 P。每个面板单独设置色标。

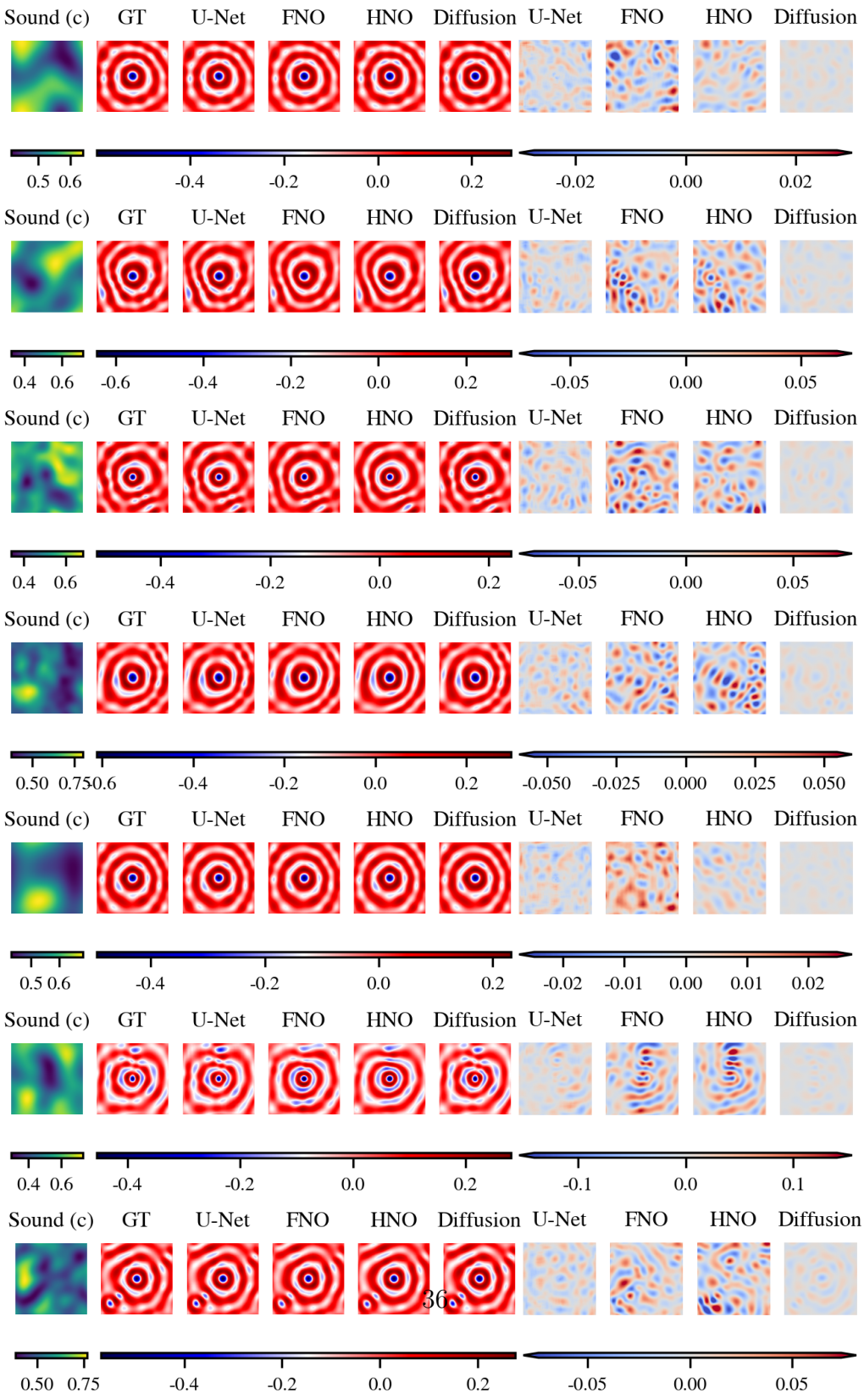
附录 *C.2.* 更多频率结果

此处展示了涵盖所有评估频率及多个随机抽取的声速图的扩展视觉对比（见附录图 C.12–C.17）。对于每种情况，我们并列展示真实值、U-Net、FNO、HNO 和扩散模型的预测结果，以及逐像素误差图。正文中观察到的趋势依然成立：扩散模型能够持续解析干涉图样和高频细节，且伪影更少；而确定性算子则会产生平滑效应和相位错位，尤其是在远场区域和更高的 k。



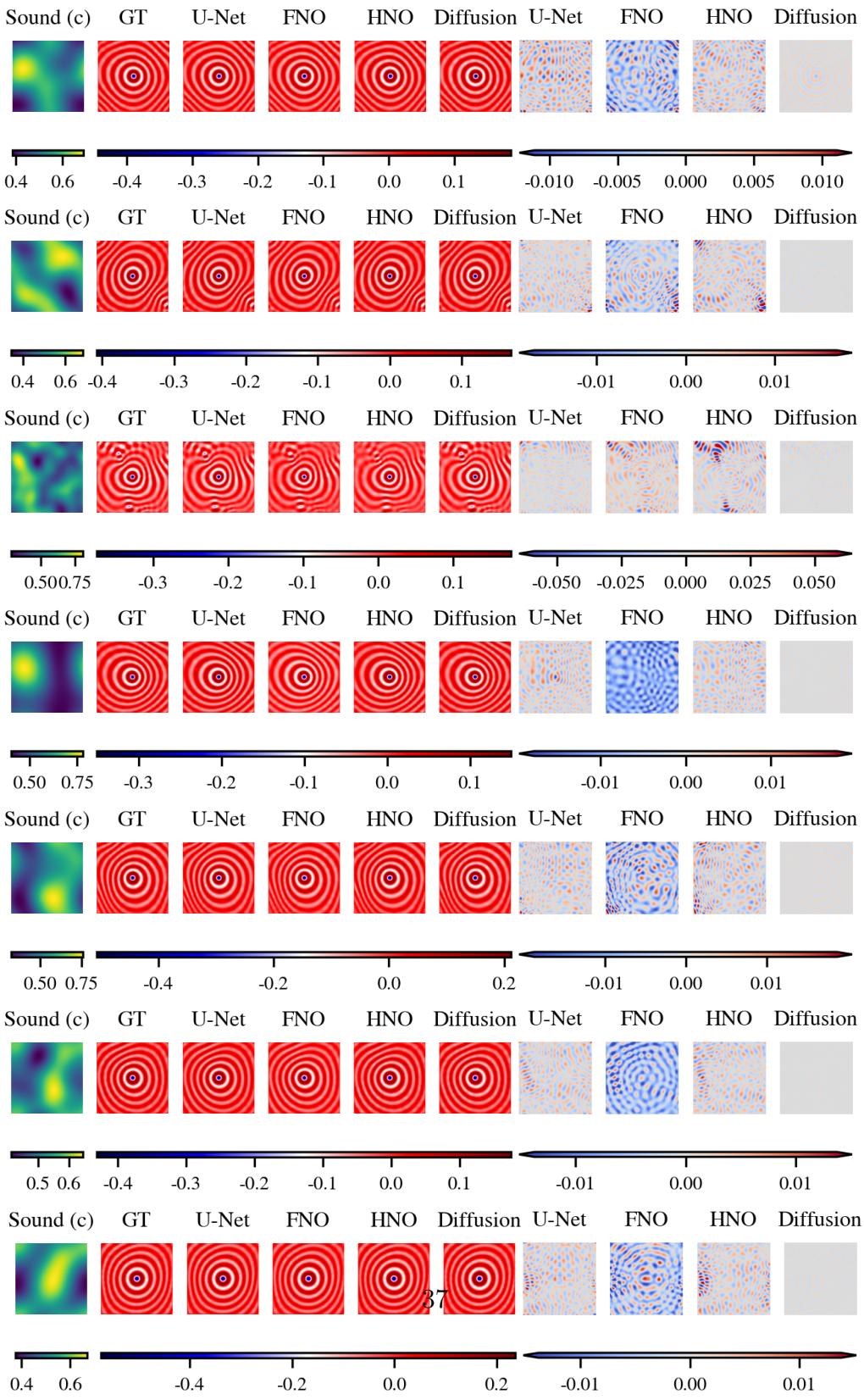
预测与真实值　　残差（预测−真实值）

图 C.12： $f = 1.5 \times 10^5$ **赫兹下的定性比较。**



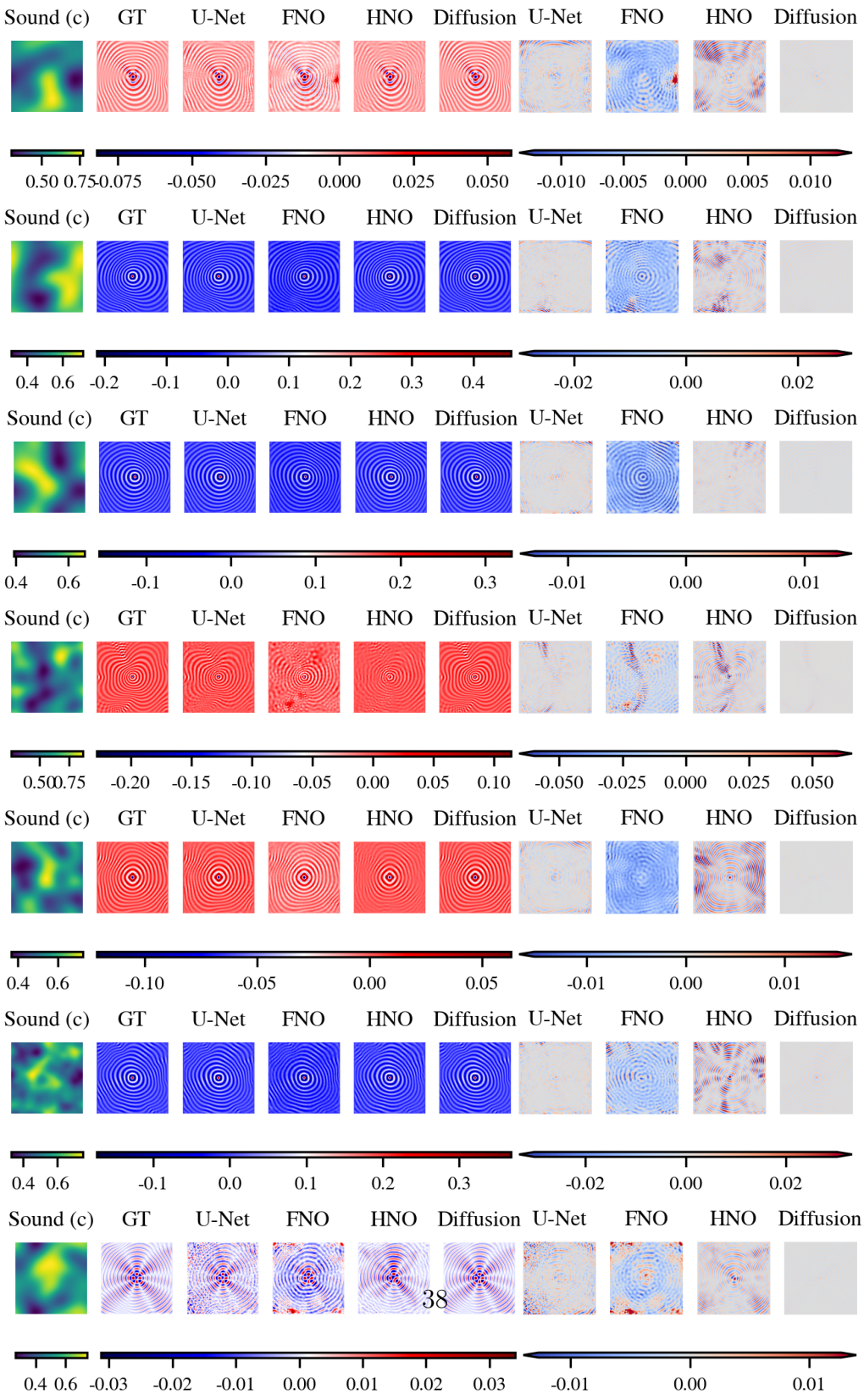
预测与真实值　　残差（预测−真实值）

图 C.13：**在 $f = 2.5 \times 10^5$ 赫兹下的定性比较。**



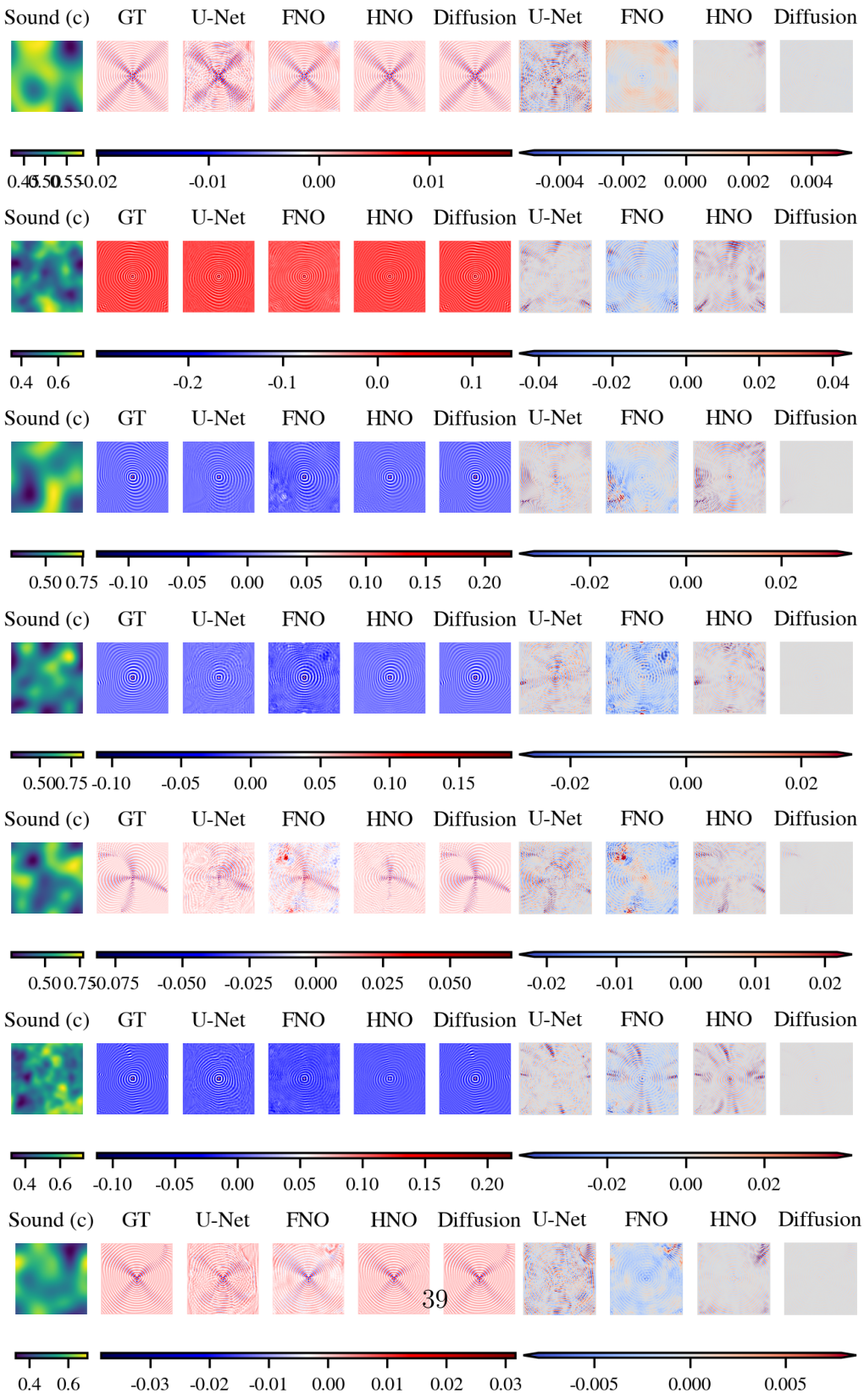
预测与真实值　　残差（预测−真实值）

图 C.14: $f = 5 \times 10^5$ **赫兹下的定性比较。**



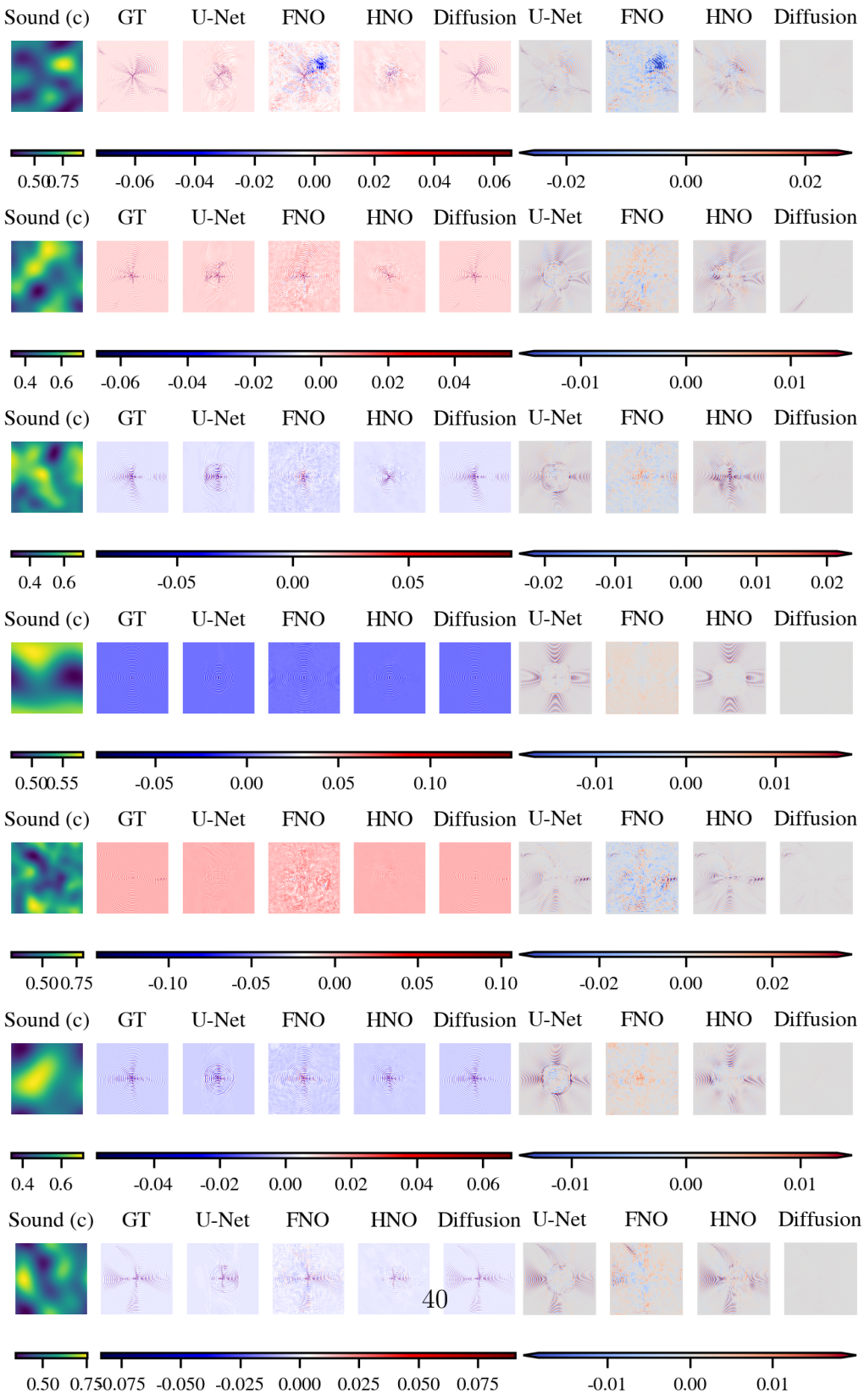
预测与真实值　　残差（预测−真实值）

图 C.15：　$f = 1 \times 10^6$ **赫兹下的定性比较。**



预测与真实值　　残差（预测−真实值）

图 C.16: $f = 1.5 \times 10^6$ **赫兹下的定性比较。**



预测与真实值　　残差（预测−真实值）

图 C.17：　$f = 2.5 \times 10^6$ **赫兹下的定性比较。**

附录 *C.3.* 补充结果

本节提供用以补充正文的附加图。内容包括：**(i)** 与二维设置相对应的一维敏感性诊断，同时展示逐方向轨迹以及各方向之间的分布变异性；**(ii)** 跨频率的域平均方差曲线，用于汇总全局敏感性随插值水平 s的变化；**(iii)** 在最高频率下的定性采样器消融，以说明步数预算效应；以及 **(iv)** 在 $s{=}0$ 处的低频核密度估计比较，以确认相同的定性敏感性趋势在最高频率设置之外仍然存在。

具体而言，图 C.18 展示了沿单条插值路径的代表性一维交叉采样曲线（近距离与远距离探针），而图C.19 汇总了在选定s值处通过核密度估计得到的、跨高斯随机场方向的相应变异性。图 C.20针对多个频率报告了域平均方向方差作为 s 的函数，并提供总体敏感性汇总。图 C.21展示了采样器行为如何随步数预算在 $f = 2.5 \times 10^6$赫兹处发生变化。最后，图 C.22 展示了在 $s{=}0$ 处、若干较低频率下的核密度估计，其中与扩散模型相比，确定性算子仍然过度集中。

表 C.6：**一维相对误差与频率的关系**。扩散模型报告的是 $K{=}10$ 个样本的均值±标准差。

	L^2		H^1		能量	
频率（赫兹）	**扩散模型**	**U-Net**	**扩散模型**	**U-Net**	**扩散模型**	**U-Net**
1.5e5	**0.022**±0.0003	0.065	**0.036**±0.0003	0.108	**0.014**±0.0001	0.032
2。5e5	**0.030**±0.001	0.087	**0.046**±0.001	0.130	**0.010**±0.0002	0.025
5e5	**0.091**±0.002	0.174	**0.114**±0.002	0.242	**0.011**±0.0003	0.044
7。5e5	**0.093**±0.004	0.295	**0.117**±0.004	0.389	**0.018**±0.001	0.096
1e6	**0.215**±0.003	0.395	**0.264**±0.004	0.510	**0.050**±0.002	0.181

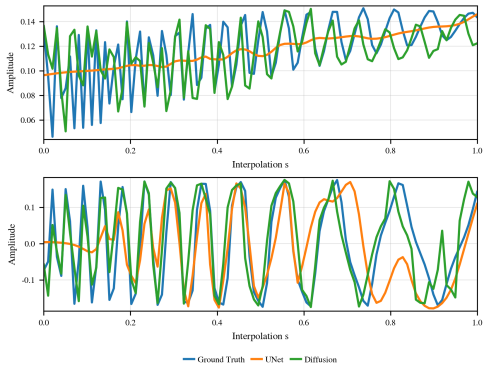


图 C.18：**沿系数空间中的线性路径采样（1D）**。从 c_0到目标声速图、沿方向 d=10 且采用 $s \in [0, 1]$（100 个样本）的示例曲线。上：靠近源。下：远离源。

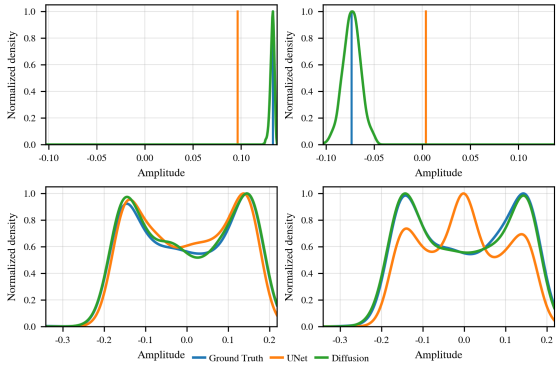
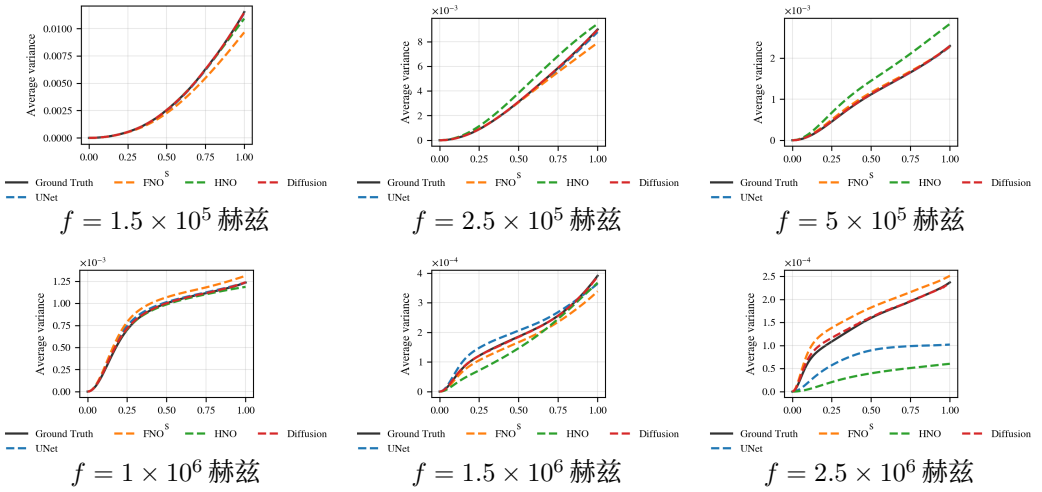


图 C.19：**密度图（1D）**。$\{u_M(s,\ d;\ y,\ x)\}_{d=1}^{100}$在 $s = 0$（上）和 $s = 1$（下）的核密度估计，分别展示靠近点（左）和远处点（右）的情况。当 $s = 0$ 时，所有输入均等于 c_0，因此确定性模型收敛为一个尖峰，而扩散模型表现出校准后的离散度；在 $s \approx 1$时，所有方法的分布都变宽，其中扩散模型能更好地捕捉高方差状态。



图C.20：**不同频率下的平均方向方差与插值** s 。每个面板展示了 100 个方向的域平均方差随 s 的变化。

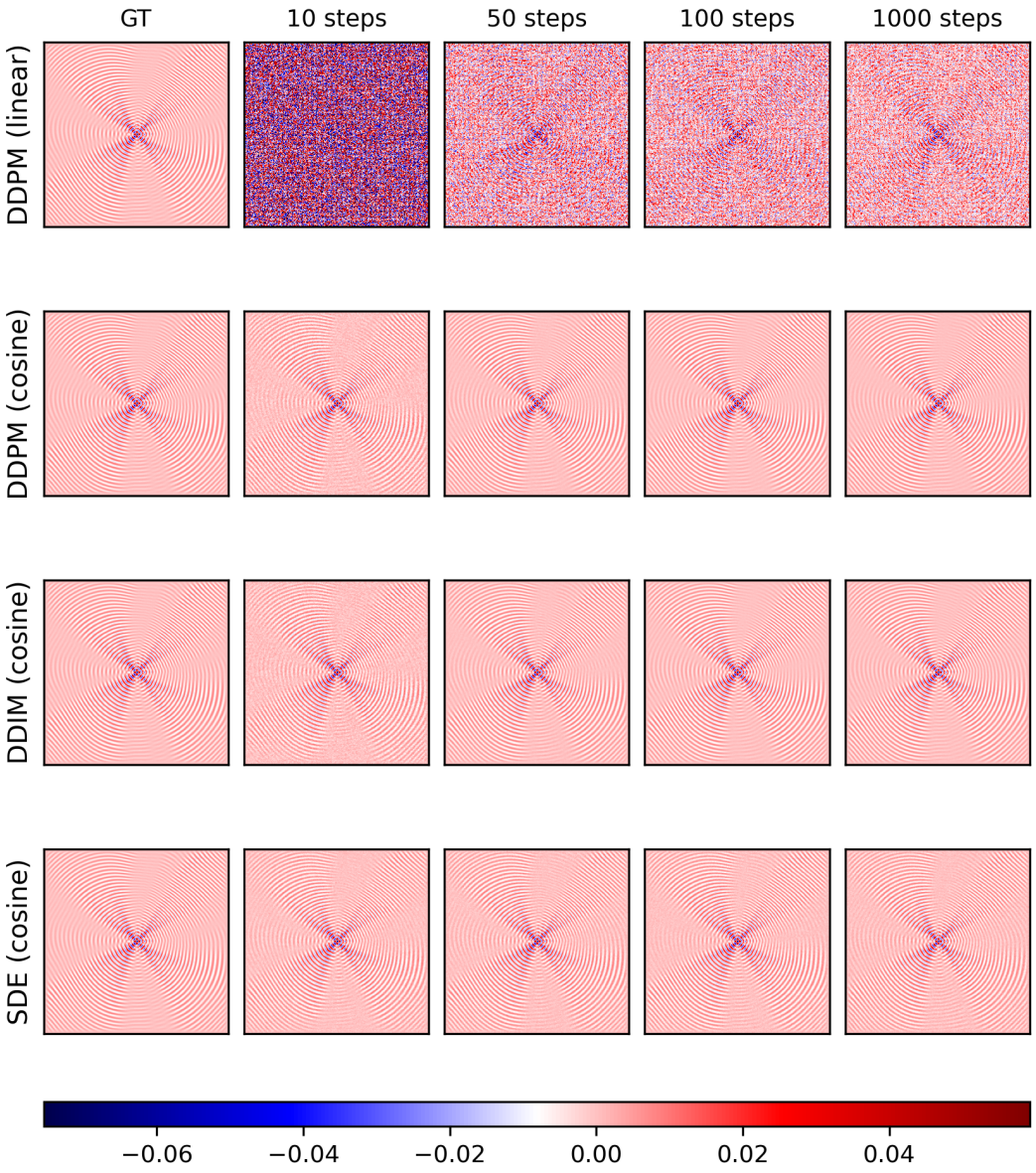
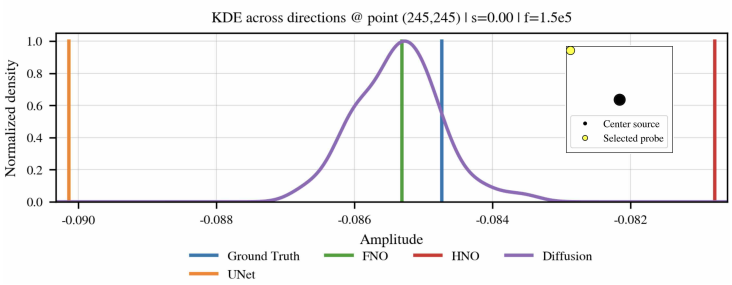
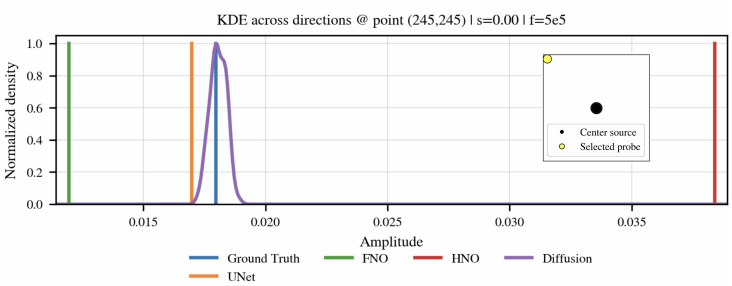


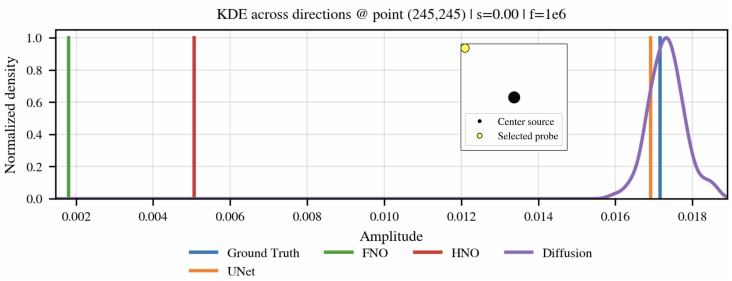
图 C.21：在 $f = 2.5 \times 10^6$ H 下比较不同步数预算的采样器行为 z.



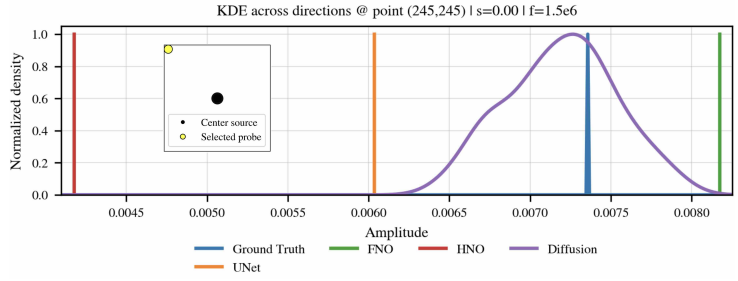
(a) $f = 1.5 \times 10^5$ 赫兹



(b) $f = 5 \times 10^5$ 赫兹



(c) $f = 10^6$赫兹



(d) $f = 1.5 \times 10^6$ 赫兹

图 C.22：四种频率下跨高斯随机场方向的敏感性响应核密度估计。在所有频率下，确定性算子均产生狭窄且集中的密度，而扩散模型则表现出更宽广的多峰响应，表明其保留了对系数场中微小扰动的敏感性。

参考文献

[1]L. Amundsen, B. Ursin, 《非均匀介质速度梯度界面模型中的亥姆霍兹方程黏声格林函数》, 载于: 《国际地球物理学杂志》, 2023年。[2] T. Huttunen, M. Malinen, J. P. Kaipio, P. J. White, K. Hynynen, 《连续波超声传输的全波亥姆霍兹模型》, 载于: IEEE, 2005年。[3] A. P. Sarvazyan, O. V. Rudenko, W. L. Nyborg, 《超声辐射力的生物医学应用: 历史渊源与物理基础》, 载于: 《医学与生物学超声》, 2010年。[4] A. N. Rybyanets, V. A. Khokhlova, A. Sapozhnikov, A. A. Naumenko, M. A. Lugovaya, S. A. Shcherbinin, 《高强度聚焦超声换能器的理论建模与实验研究》, 载于: 《先进材料——研究与应用》, 2015年。[5] H. Salahshoor, M. G. Shapiro, M. Ortiz, 《经颅聚焦超声产生颅骨传导剪切波: 计算模型及其对神经调控的意义》, 载于: 《应用物理快报》, 2020年。[6] D. A. Juraev, P. Agarwal, E. E. Elsayed, N. Targyn, 《亥姆霍兹方程及其在求解物理问题中的应用》, 载于: 《先进工程科学》, 2024。[7] J. Chen, 《亥姆霍兹方程的高性能迭代方法》, 载于: 博士论文, 代尔夫特理工大学, 2025。[8] N. Bootland, V. Dolean, P. Jolivet, P.-H. Tournier, 《高频条件下亥姆霍兹问题粗空间的比较》, 载于: 《计算机与应用数学》, 2021年。[9] G. Bao, G. W. Wei, S. Zhao, 《高波数亥姆霍兹方程的数值解》, 载于: 《国际工程数值方法杂志》, 2004年。[10] C.-W. Cheng, J. Huang, Y. Zhang, G. Yang, C.-B. Schönlieb, A. I. Aviles-Rivero, 《Mamba神经算子: 谁更胜一筹? Transformer 与状态空间模型在偏微分方程中的比较》, 《计算物理学杂志》（2026）。

[11] Z. Hu, Q. Cao, K. Kawaguchi, G. E. Karniadakis, 《Deepomamba：用于时空偏微分方程神经算子学习的状态空间模型》, 《计算物理学杂志》（2025）。[12] N. Cho, J. Ryu, H. J. Hwang, 《Mbno：用于求解偏微分方程的基于 Mamba 的神经算子》, 《计算物理学杂志》（2026）。[13] S. Zhao, Z. Li, B. Fan, Y. Wang, H. Yang, J. Wang, 《Lesnets（大涡模拟网络）：用于大涡模拟湍流的物理信息神经算子》, 《计算物理学杂志》（2025）。[14] L. Lu, P. Jin, G. Pang, Z. Zhang, 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（3）（2021）218–229。[15] Z. Li, N. B. Kovachki, K. Azizzadenesheli, B. Liu, K. Bhattacharya, A. M. Stuart, A. Anandkumar, 《用于参数化偏微分方程的傅里叶神经算子》, 载于：国际学习表征会议，2021年。[16] T. Zhang, D. Trad, K. I nnanen, 《利用傅里叶神经算子学习求解弹性波方程》, 《地球物理学》88（3）（2023）T101–T119。[17] F. Lehmann, F. Gatti, M. Bertin, D. Clouteau, 《利用因式分解傅里叶神经算子（F-FNO）进行三维弹性波传播》, 《计算力学与工程方法》420（2024）116718。[18] C. Zou, K. Azizzadenesheli, Z. E. Ross, R. W. Clayton, 《用于三维弹性波传播与反演的深度神经亥姆霍兹算子》, 《国际地球物理学杂志》239（3）（2024）1469–1484。[19] F. Chen, Z. Liu, G. Lin, J. Chen, Z. Shi, 《Nsno：用于求解非均匀介质中亥姆霍兹方程的纽曼级数神经算子》, 《系统科学与复杂性杂志》37（2024）413–440。[20] L. You, Z. Liu, R. Xu, Q. Li, J. Chen, S. Jiang, 《用于亥姆霍兹方程的多尺度傅里叶神经算子》, arXiv 预印本（2024）。

[21] V. S. Fanaskov、I. V. Oseledets，谱神经算子，《数学学报》108（2023年）S226–S232。[22] S. Khodakarami、V. Oommen、A. Bora、G. E. Karniadakis，通过高频标度缓解物理系统中神经算子的谱偏差（2025）。[23] Z. J. Xu、Y. Zhang、T. Luo，深度学习中频率原理/谱偏差综述，《应用数学与计算通讯》7（2025）827–864。[24] M. Ivanovs、R. Kadikis、K. Ozols，用于解释深度神经网络的基于扰动的方法：综述，《模式识别通讯》150（2021年）228–234。[25] V. Le、M. Dik，神经算子行为的数学分析，预印本，2024年10月28日（2024）。[26] A. Behroozi、C. Shen、D. Kifer，面向参数微分方程正问题与逆问题的敏感性约束傅里叶神经算子，载于：国际学习表征会议（ICLR），2025，海报。[27] A. Stanziola、S. R. Arridge、B. T. Cox、B. E. Treeby，基于无监督学习的亥姆霍兹方程求解器：在经颅超声中的应用，载于：《计算物理学杂志》，2021年。[28] E. Vertes，大脑与机器中的概率学习与计算，载于：博士学位论文，伦敦大学学院，2020。[29] Y. Wu、H. S. Aghamiry、S. Operto、J. Ma，结合二次项与完美匹配层条件的物理信息神经网络求解非光滑介质中的亥姆霍兹方程，载于：《地球物理学》，2022。[30] T. Alkhalifah、C. Song、U. bin Waheed、Q. Hao，由亥姆霍兹方程约束的机器学习函数得到的波场解，载于：《地球科学中的人工智能》，2021年。[31] T. Lobato、R. Sottek、M. Vorländer，利用学习先验正则化亥姆霍兹方程最小二乘法，载于：《美国声学学会杂志》，2024。

[32] A. Shysheya、C. Diaconu、F. Bergamin、P. Perdikaris、J. M. Hernández-Lobato、R. E. Turner、E. Mathieu，面向偏微分方程模拟的条件扩散模型，载于：神经信息处理系统进展，2024。[33] J. Huang、G. Yang、Z. Wang、J. J. Park，DiffusionPDE：部分观测下的生成式偏微分方程求解，载于：神经信息处理系统进展，2024。[34] J.-H. Bastek、W. Sun、D. M. Kochmann，物理信息扩散模型，载于：国际学习表征会议，2025。[35] J. Y. Lim、J. Ryu、K. Ryu、G. Jang、S. Kim，函数空间中的基于分数的扩散模型，arXiv预印本（2023年）。[36] S. Wang、Z. Dou、T.-R. Liu、L. Lu，FunDiff：面向物理信息生成建模的函数空间扩散模型，arXiv预印本（2024）。[37] Z. Yao、J. Lin、X. Liu、G. Kiar、X. Li、J. Zhang、Q. Li、K. Sun，函数空间上的引导式扩散采样，arXiv预印本（2025）。[38] J. A. L. Benítez、T. Furuya、F. Faucher、A. Kratsios、X. Tricoche、M. V. de Hoop，神经算子的分布外风险界及其在亥姆霍兹方程中的应用（2024）。[39] C. Zou、K. Azizzadenesheli、Z. E. Ross、R. W. Clayton，用于三维弹性波传播与反演的深度神经亥姆霍兹算子，《国际地球物理学杂志》239（3）（2024）1469–1484。[40] A. Zhou、Z. Li、M. Schneier、J. R. B. Jr、A. B. Farimani，Text2PDE：面向可及物理模拟的潜扩散模型，载于：国际学习表征会议（ICLR），2025。[41] Y. Zhang、D. Zou，面向偏微分方程约束生成的扩散模型物理信息蒸馏（2025）。[42] K. Haitsiukevich、O. Poyraz、P. Marttinen、A. Ilin，扩散模型作为概率神经算子以恢复动力系统的未观测状态，arXiv预印本（2024）。

[43] P. Hu、X. Qian、W. Deng、R. Wang、H. Feng、R. Feng、T. Zhang、L. Wei、Y. Wang、Z. Ma、T. Wu，从不确定到安全：面向安全偏微分方程控制的扩散模型保形微调，载于：国际机器学习会议（ICML），2025。[44] F. Cao、K. Johnston、T. Laurent、J. Le、S. Motsch，从偏微分方程视角出发的生成式扩散模型（2025）。[45] C. Gao、H. Zhou、W. Gong、Q. Wu、T. Chen、Q. Yu、S. Zhang、J. Li，PDE-扩散：用于求解偏微分方程的物理引导扩散模型，载于：国际学习表征会议（ICLR），2024，ICLR 2024投稿（2024-02-10修订）。[46] H. Gao、S. Kaltenbach、P. Koumoutsakos，利用引导扩散模型与虚拟观测对参数化偏微分方程的解进行生成式学习，《计算力学与工程方法》435（2025）117654。[47] F. Bergamin、C. Diaconu、A. Shysheya、P. Perdikaris、J. M. Hernández-Lobato、R. E. Turner、E. Mathieu，引导自回归扩散模型及其在偏微分方程模拟中的应用，《计算力学与工程方法》435（2025）117654。[48] C. Foias、O. Manley、R. Rosa、R. Temam，纳维-斯托克斯方程与湍流，第83卷，剑桥大学出版社，2001。[49] V. Oommen、A. Bora、Z. Zhang、G. E. Karniadakis，将神经算子与扩散模型相结合可改善湍流建模中的谱表示，arXiv预印本（2025）。[50] R. Molinaro、S. Lanthaler、B. Raonić、T. Rohner、V. Armegioiu、S. Simonis、D. Grund、Y. Ramic、Z. Y. Wan、F. Sha、S. Mishra、L. Zepeda-Núñez，面向快速准确流体统计计算的生成式人工智能（2024）。[51] J. Pidstrigach、Y. Marzouk、S. Reich、S. Wang，无限维扩散模型，arXiv预印本（2023年）。[52] J. Bastek、W. Sun、D. M. Kochmann，物理信息扩散模型，载于：国际学习表征会议（ICLR），2025。

[53] Y. Chen、E. Vanden-Eijnden，面向多尺度科学数据的尺度自适应生成流，arXiv预印本（2025）。[54] O. G. Ernst、M. J. Gander，为何用经典迭代方法求解亥姆霍兹问题十分困难，多尺度问题的数值分析（2011）325–363。[55] A. Stanziola、S. R. Arridge、B. T. Cox、B. E. Treeby，J-Wave：一个开源可微波动模拟器，SoftwareX（2022）。[56] G. Baldan、Q. Liu、A. Guardone、N. Thuerey，流匹配与偏微分方程的结合：物理约束生成的统一框架，arXiv预印本（2025）。[57] Q. Zhang、Y. Chen，基于指数积分器的扩散模型快速采样，arXiv预印本（2022）。