

基于流形上概率学习的爆轰不确定度分析*

梁霄¹⁾[†] 王言金²⁾ 王瑞利²⁾³⁾

1) (山东科技大学数学与系统科学学院, 青岛 266590)

2) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

3) (河南省科学院, 郑州 450052)

(2024年10月26日收到; 2025年4月7日收到修改稿)

爆轰实验由于操作风险高、样品制备和测试成本大等特征, 导致实验样本稀疏, 给标定待测物理量的概率分布和使用机器学习方法带来巨大的挑战。流形上的概率学习 (probability learning on manifold, PLoM) 能生成丰富的、符合实用常识的、遵循实验数据物理机理的样本, 成为处理小样本的有效工具。首先将炸药 PBX9502 的含有多物理属性实验数据做缩比变换, 然后, 使用主成分分析将缩比数据规范化, 并将规范化矩阵的分量作为训练集。进而, 使用改进的多元 Gauss 核密度估计法表征训练集的先验概率。紧接着利用耗散映射提炼基于训练集的非线性流形。具体而言, 通过转移矩阵的第一个特征值和对应的特征向量构造耗散基函数和耗散映射。其次, 将训练集作为 Wiener 过程驱动的 Hamilton 系统的初值, 先验概率作为不变测度构造 Itô-MCMC 随机数生成器, Störmer-Verlet 格式用以求解随机耗散 Hamilton 方程。最后, 采用反演变换, 实现学习集的扩容。结果发现, PLoM 能生成符合工业生产和高精度模拟需求的密度和爆速的随机数。利用学习集导出炸药的密度和爆速服从仿射变换, 密度和爆压服从非线性关系, 密度的微小波动会引起爆速和爆压的剧烈的变化。比较学习集的变异系数, 还发现爆压离散程度最高, 与已有研究结果相符。所用方法具备普适性, 能推广到其他的爆轰系统。

关键词: 流形上的概率学习, 耗散映射, 随机耗散 Hamilton 方程, 小样本, 爆轰, 不确定度量化

PACS: 47.40.Rs, 02.50.-r, 02.70.-c

DOI: [10.7498/aps.74.20241501](https://doi.org/10.7498/aps.74.20241501)

CSTR: [32037.14.aps.74.20241501](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20241501)

1 引言

爆轰是极端高温 $\mathcal{O}(10^3 \text{ K})$ 、高压 $\mathcal{O}(10 \text{ GPa})$ 、高爆速 $\mathcal{O}(10^3 \text{ m/s})$ 物理化学反应过程, 作用时间极短 $\mathcal{O}(10 \mu\text{s})$ 以至于肉眼无法全系统捕捉爆轰演化过程。目前, 理论仍不完备, 利用实验数据倒推关键参数, 导出普适的物理规律是爆轰研究常用的方法。然而, 爆轰的极端特征导致实验数据标定依赖于昂贵的、精密的仪器仪表, 同时超强的威力和

猛度、不易全面准确评估的感度又让操作人员面临高危作业压力, 进而无法获取大量测试数据。此外, 爆轰的非线性、多物理耦合性和强间断性, 导致基于物理守恒定律的高保真模型运算量太大, 因此感兴趣量 (quantity of interest, QoI) 的仿真值也是样本容量有限^[1-5]。实验/仿真样本容量不足时, 就无法保证 QoI 统计信息的收敛性, 只能得到粗略估计值, 会丢失关键信息。此外, 若实验/仿真样本容量过小, 则无法直接使用基于人工神经网络的深度学习等热点机器学习方法。基于稀疏的实验/仿

* 国家自然科学基金(批准号: 12171047)、国家自然科学基金委-中国工程物理研究院 NSAF 联合基金(批准号: U2230208)、山东省自然科学基金(批准号: ZR2021BA056) 和国家留学基金委(批准号: CSC202308370209)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: mathlx@163.com

真数据, 利用机器学习导出 QoI 的一般物理机理, 是爆轰研究的热点, 也是挑战.

实验研究的另一个挑战在于爆轰演化过程中始终蕴含不确定度(uncertainty), 造成数据标定值的随机波动性. 爆轰的非线性复杂性, 导致参数、边界条件、几何区域、操作环境的微小变化都能引起 QoI 的剧烈振荡. 正确表征实验不确定度和评价不确定因素对 QoI 的影响, 能提高爆轰的认知程度. 在核能^[6–9]、航天飞机^[10–12]、量子力学^[13]、汽车^[14]等领域巨大需求的推动下, 以及美国能源部^[15]、美国国防部^[16]、美国空军科研办公室(AFSOR)^[17]、美国海军研究实验室(NRL)^[18,19]和美国机械工程师协会(American Society of Mechanical Engineers, AMSE)^[20,21]等部门的倡议和资助下, 不确定度量化(uncertainty quantification, UQ)技术发展迅猛. 近年来, 国内外学者逐步开展爆轰领域UQ研究^[22–25], 但是结果异常稀少, 且研究仍集中在仿真不确定度, 对实验不确定度的研究极为罕见. 特别是, 如何定量表征高维(多物理属性)小样本爆轰实验数据的不确定度并评估其影响, 未见报道.

针对高维小样本爆轰实验数据, 单纯增加物理实验次数并不现实, 自然的想法是使用机器学习方法扩大样本容量. 但难点在于待标定数据的概率分布函数未知, 甚至有界支集(support set)未知. 另外, 高维样本点带有多个物理属性, 如何保证生成的样本点能保持不同属性之间的物理机理? Soize 和 Ghanem^[26]于2016年提出的流形上的概率学习(probability learning on manifold, PLoM)方法耦合Itô-MCMC(Markov chain Monte Carlo, MCMC)采样和流形嵌入技术, 实现高维小样本实验数据集的有效扩容, 已经在超音速燃烧冲压发动机(scramjet)^[27]、超音速喷嘴^[28]、高铁节能优化^[29]、失协叶盘^[30]等高科技领域证明了该方法的实用性和优越性. PLoM方法的优点在于: 首先, 经典MCMC方法中, Metropolis-Hastings算法难点在于建议分布的构造凭经验, 没有普适的规律可循, 且高维采样计算成本太大^[31,32]. Gibbs算法难点至于计算边际分布^[33]. 相比之下, 基于Itô-MCMC的PLoM方法没有以上问题困扰, 具备高维样本生成可行性. 其次, 经典MCMC方法得到的采样虽然能够导出物理量自身的统计特征, 但是不会集中在特定的流形上, 破坏了数据的局部几何结构, 即破坏了实验样本不同物理属性之间的物理运行

机理. 而PLoM方法通过使用流形嵌入方法, 发掘低维流形结构, 将基于Wiener过程驱动的耗散Hamilton系统的解空间在流形上投影, 从而生成的样本集中在耗散映射定义的非线性流形上. 不仅能导出物理量自身的统计规律, 还能更精确导出物理机理. 再次, 与经典MCMC相比, PLoM方法计算成本较低. 最后, 当高维小样本实验数据受到噪声污染时, PLoM方法表现出较强的鲁棒性.

综上所述, PLoM方法的以上特征, 成为刻画稀疏样本的高维爆轰实验数据潜在有效工具. PLoM生成的丰富的电子实验数据, 易于导出炸药的密度和爆速等物理量的概率密度函数, 还保持了不同物理属性之间的物理运行机理, 为更准确地理解爆轰动力行为打下坚实的基础.

2 PBX9502 实验数据预处理和输入不确定度来源

PBX9502 是一款性能优越的钝感高能炸药, 在常规武器和核武器领域应用广泛. 组分为95%的TATB和5%的Kel F 800, 理论最大密度1942 kg/m³. Los Alamos国家实验室(LANL)标定的PBX9502炸药密度和爆速实验数据如图1所示^[34], 其中操作环境为室温24 °C, 药柱直径范围为8—50 mm, 由于PBX9502制备和实验标定成本较高, 导致样本容量N有限.

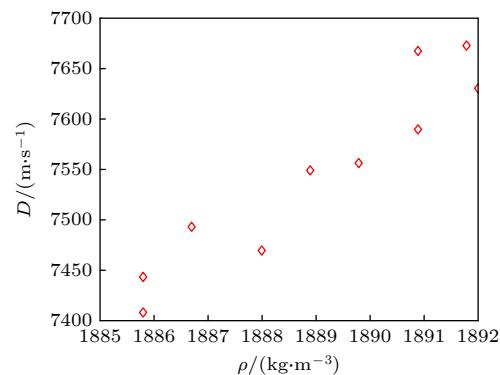


图1 PBX9502 炸药密度和爆速图
Fig. 1. Scatter plot of density and detonation velocity of explosive PBX 9502.

将图1中 n_d 个属性的N个样本点表征为矩阵 $\mathbf{X}_d \in \mathbb{R}^{n_d \times N}$. $n_d = 2$ 为样本点的物理属性的个数, 第1行为PBX9502的密度, 第2行为爆速, 矩阵列数 $N = 10$ 为有效样本点数量.

必须指出, 爆轰实验数据时刻受到到噪声污染, 因此取值并非一成不变. 如图 2 所示^[35], 压制成型过程中产生的孔隙、空腔、扭结、裂纹、结晶使得 PBX9502 的密度标定值中含有不确定度^[36,37]. 爆速 D 的不确定度归因于操作条件限制和测量技术. 非参数统计由于理论的完备性, 成为辨识和刻画物理量的不确定度的有力工具.

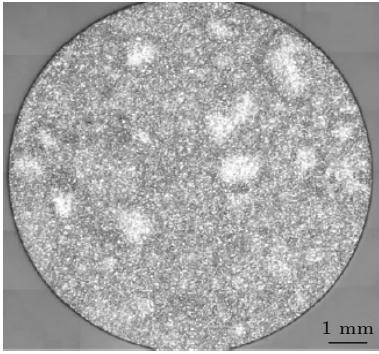


图 2 PBX 9502 的偏光显微镜图^[35]

Fig. 2. Polarizing light microscope images of PBX-9502^[35].

在概率统计的范畴内, 实验数据被认为是满足某种机理的高维随机向量的抽样. 但是实验数据服从的 PDF 未知. 同时, PBX9502 的密度和爆速满足某种物理机理, 即随机向量的支集属于 \mathbb{R}^{n_d} 空间的有界子集, 有效抽样必须落在某种流形上. 遗憾的是, 此流形的结构未知. 接下来将利用实验数据提供的有限信息, 寻找随机向量的概率密度函数 (probability density function, PDF).

3 流形上的概率学习

3.1 实验数据矩阵的缩比处理

为了后续更好地应用概率方法, 首先将第 2 节实验数据矩阵 \mathbf{X}_d 进行伸缩变换, 得到缩比 (scaling) 矩阵 $\tilde{\mathbf{X}} = [\tilde{x}_{ij}]_{n_d \times N}$, 具体步骤为

$$\tilde{x}_{ij} = \frac{x_{ij}^d - x_{i1}^d \wedge x_{i2}^d \wedge \cdots \wedge x_{iN}^d}{x_{i1}^d \vee x_{i2}^d \vee \cdots \vee x_{iN}^d - x_{i1}^d \wedge x_{i2}^d \wedge \cdots \wedge x_{iN}^d},$$

$$x_{ij}^d \in \mathbf{X}_d,$$
(1)

式中, 算子 \vee, \wedge 定义为 $a \vee b = \max\{a, b\}$, $a \wedge b = \min\{a, b\}$.

将矩阵 $\tilde{\mathbf{X}}$ 按列分块得 $\tilde{\mathbf{X}} = [\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_N]$, $\tilde{\mathbf{x}}_i \in \mathbb{R}^{n_d}$, $i = 1, 2, \dots, N$, 则 $\tilde{\mathbf{X}}$ 的平均值向量和协方差矩阵定义为

$$\mathbf{m} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \tilde{\mathbf{x}}_j, \quad \mathbf{C} = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^N (\tilde{\mathbf{x}}_j - \mathbf{m})(\tilde{\mathbf{x}}_j - \mathbf{m})^T,$$
(2)

式中 \mathbf{C} 的特征值和标准化特征向量 $\mathbf{C}\xi_k = \mu_k \xi_k$, $k = 1, 2, \dots, n_d$, 其中矩阵 \mathbf{C} 的秩 $\text{rank}(\mathbf{C}) = v \leq n_d$, 且 $0 < \mu_1 \leq \mu_2 \leq \cdots \leq \mu_v$, $\xi^T \xi = \mathbf{I}_v \in \mathbb{R}^{v \times v}$, $\xi = [\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_v] \in \mathbb{R}^{n_d \times v}$. 将图 1 中实验数据信息代入 (1) 式和 (2) 式, 计算特征值和特征向量, 得到秩 $v = 2$, 特征值的具体取值见图 3.

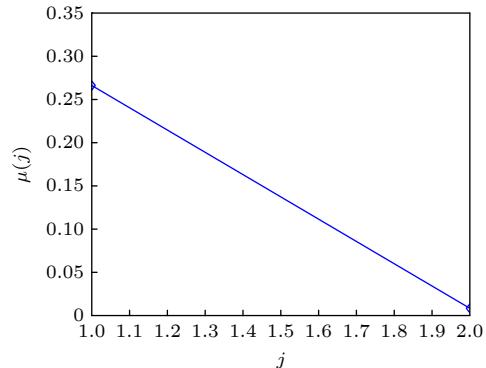


图 3 缩比矩阵 \mathbf{C} 特征值

Fig. 3. Eigenvalues of scaling matrix \mathbf{C} .

3.2 主成分分析及矩阵的规范化

按照主成分分析 (principle component analysis, PCA) 原理, 利用 3.1 节所得特征向量矩阵 ξ , 构造随机矩阵 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n_d \times N}$ 的分解式为

$$\mathbf{X} = \bar{\mathbf{X}} + \xi \mu^{1/2} \mathbf{H}, \quad \mathbf{H} \in \mathbb{R}^{n_d \times N},$$
(3)

式中, $\bar{\mathbf{X}} = [\mathbf{m}, \mathbf{m}, \dots, \mathbf{m}] \in \mathbb{R}^{n_d \times N}$, $\mu = \text{diag}\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_v\}$. 将 \mathbf{X} 的采样点 $\tilde{\mathbf{X}}$ 代入 (3) 式, 得到 \mathbf{H} 的采样点:

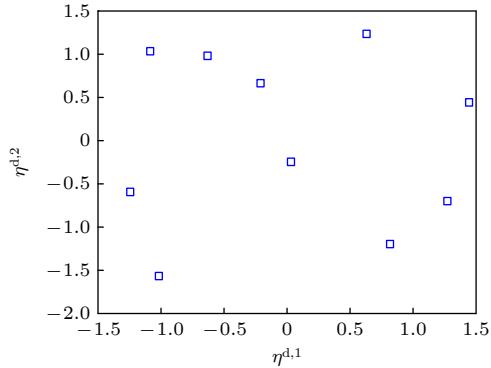
$$\eta_d = \mu^{-1/2} \xi^T (\tilde{\mathbf{X}} - \bar{\mathbf{X}}).$$
(4)

将矩阵 η_d 按列分块 $\eta_d = [\eta_1^d, \eta_2^d, \dots, \eta_N^d]$, $\eta_i^d \in \mathbb{R}^v$, $i = 1, 2, \dots, N$, 经计算可得

$$\mathbf{m}' = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \eta_j^d = 0, \quad \mathbf{C}' = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^N \eta_j^d (\eta_j^d)^T = \mathbf{I}_v.$$

即 (4) 式生成的 N 个中心化、不相关样本点集 $\{\eta_1^d, \eta_2^d, \dots, \eta_N^d\}$.

将 \mathbb{R}^v 值样本点 $\{\eta_1^d, \eta_2^d, \dots, \eta_N^d\}$ 作为训练集, 记做 $\mathcal{D}_{\text{train}} = \{\eta_1^d, \eta_2^d, \dots, \eta_N^d\}$. $\mathcal{D}_{\text{train}}$ 具体信息如图 4 所示, 其中 $\eta^{d,1}$ 表示 η_d 的第 1 个分量, $\eta^{d,2}$ 表示 η_d 的第 2 个分量.

图 4 实验数据导出的训练集 η_d Fig. 4. Training set η_d deduced from experimental data.

注 1 PCA 的主要目的是规范化, 而不是降维. 即将原始输入数据转化为期望为 0, 协方差矩阵为单位矩阵的随机向量, 预处理后的矩阵有利于使用 Gauss 核密度估计.

3.3 基于 Gauss 核密度估计的先验估计

Gauss 核密度估计法结合训练集 $\eta_d = \{\eta_1^d, \eta_2^d, \dots, \eta_N^d\}$, 首先构造随机向量的概率模型如下:

$$\rho_Y(\mathbf{y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\hat{s})^v} \exp\left(-\frac{1}{2\hat{s}^2} \left\| \frac{\hat{s}}{s_{SB}} \eta_i^d - \mathbf{y} \right\|^2\right), \quad (5)$$

其中 $\hat{s} = s_{SB} \left(s_{SB}^2 + \frac{N-1}{N} \right)^{-1/2}$; $\|\cdot\|$ 是 \mathbb{R}^v 空间中的 Euclid 范数; s_{SB} 为 Silverman 带宽 (bandwidth), 定义为 $s_{SB} = \left[\frac{4}{N(2+v)} \right]^{1/(v+4)}$. 由 3.2 节可知, 训练集 η_d 是中心化、不相关的矩阵, 且假设 η_d 的列向量相互独立, 因此 (5) 式构成随机向量 \mathbf{Y} 的 PDF. 我们假设训练集 $\mathcal{D}_{\text{train}}$ 是随机矩阵 \mathbf{H} 的样本点, 进一步假设, 随机矩阵 \mathbf{H} 的列向量相互独立, 则

$$\rho_{\mathbf{H}}(\boldsymbol{\eta}) = \prod_{i=1}^N \rho_Y(\eta_i)$$

构成随机矩阵 \mathbf{H} 的 PDF. 由 (5) 式导出 $\mathbb{E}\mathbf{H} = \mathbf{0}$, $\text{cov}(\mathbf{H}, \mathbf{H}) = \mathbf{I}_v$, \mathbb{E} 和 cov 分别代表期望和协方差算子.

3.4 基于耗散映射的降阶基函数

定义耗散映射 (diffusion map) 矩阵 \mathbf{K} 和 \mathbf{B} 如下:

$$\mathbf{K} = [k_{ij}]_{n_d \times n_d}, \quad \mathbf{B} = [b_{ij}]_{n_d \times n_d},$$

$$k_{ij} = \exp\{-(4\varepsilon_{\text{DM}})^{-1} \|\eta_i - \eta_j\|^2\}, \quad b_{ij} = b_i \delta_{ij}, \quad (6)$$

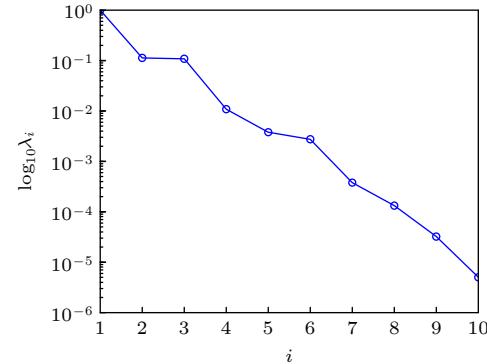
式中, $b_i = \sum_{j=1}^n k_{ij}$, δ_{ij} 为 Kronecker 算子, ε_{DM}

为光滑参数. 将 $\mathbf{P} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{K}$ 定义为训练集 $\mathcal{D}_{\text{train}}$ 赋予的图 (graph) 上的对应随机游走 (random walk) 的转移矩阵, 用以产生单步转移概率.

计算如下广义特征值问题

$$\mathbf{K}\psi_i = \lambda_i \mathbf{B}\psi_i, \quad i = 1, 2, \dots, n_d, \quad (7)$$

式中 λ_i, ψ_i 分别为满足正交化条件 $(\lambda_i \mathbf{B}\psi_i, \psi_j) = \delta_{ij}$, $i, j = 1, 2, \dots, n_d$ 的特征值和相应的特征向量. 利用图 4 结果和 (7) 式, 计算在 \log_{10} 尺度下转移矩阵 \mathbf{K} 的递减特征值, 结果如图 5 所示.

图 5 \log_{10} 尺度下的转移矩阵的特征值递减分布图Fig. 5. Descending plot of eigenvalues of transition matrix under \log_{10} scale.

构造 \mathbb{R}^{n_d} 空间中的耗散映射基函数 $\{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_{n_d}\}$ 如下:

$$\mathbf{g}_i = \lambda_i^k \psi_i, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (8)$$

降阶耗散基矩阵定义为 $\mathbf{G} = [\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_m]$, $m \leq n_d$, k 代表转移概率的步数.

注 2 基矩阵依赖于 $\varepsilon_{\text{DM}}, m$, 而不是 k , 本文选取 $k = 2$, 即使用两步转移概率.

$\varepsilon_{\text{DM}}, m$ 选取的标准是^[38]:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &> \lambda_2(\varepsilon_{\text{opt}}) \simeq \lambda_3(\varepsilon_{\text{opt}}) \simeq \dots \simeq \lambda_{m_{\text{opt}}}(\varepsilon_{\text{opt}}) \\ &\gg \lambda_{m_{\text{opt}}+1}(\varepsilon_{\text{opt}}) \geq \dots \geq \lambda_{n_d}(\varepsilon_{\text{opt}}) > 0, \end{aligned}$$

$$m = \arg \min_i \frac{\lambda_i}{\lambda_2} < 0.1.$$

利用图 5 结果以及 (7) 式和 (8) 式, 经计算本文中 $\varepsilon_{\text{DM}} = 4, m = 3$.

3.5 随机矩阵 \mathbf{H} 的降阶表征

耗散映射向量生成 \mathbb{R}^N 中的一个子空间 $\mathcal{L}\{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_m\}$, 通过使用投影法描述训练集 $\mathcal{D}_{\text{train}}$ 的局部结构. 具体而言, 给出训练矩阵的降阶表征如下:

$$\mathbf{H} = \mathbf{Z}\mathbf{G}^T, \quad (9)$$

其中 $Z \in \mathbb{R}^{v \times m}$, 用来生成学习集. 紧接着, 构造子空间 $\mathcal{L}\{g_1, g_2, \dots, g_m\}$ 上的投影矩阵 $A = G(G^T G)^{-1} \in \mathbb{R}^{N \times m}$, 进而得

$$Z = HA. \quad (10)$$

3.6 流形上的采样生成学习集

PLoM-MCMC 随机数生成器原理是将 Itô 随机微分方程投影到耗散映射基函数上, 即在 3.4 节定义的流形上采样. 设 $Z(t), Y(t) \in \mathbb{R}^{v \times N}$ 是稳态耗散 Markov 过程, 表征如下:

$$dZ = Y(t)dt,$$

$$dY = \mathcal{L}(Z(t))dt - \frac{1}{2}f_0 Y(t)dt + \sqrt{f_0}dW, \quad (11)$$

式中, $Z(0) = H_d A$, $Y(0) = KA$, $K \in \mathbb{R}^{v \times N}$ 的分量相互独立, 且服从标准正态分布, 即 (11) 式的初值来自于 (12) 式的采样. $W \in \mathbb{R}^{v \times N}$ 的列向量是相互独立的 v 维标准 Wiener 过程, 并且 $\mathcal{L}(Z(t)) = L(Z(t)G^T)A \in \mathbb{R}^{v \times m}$, 泛函 $L(u)$ 定义为

$$[L(u)]_{ij} = \frac{1}{p(u_j)} \{\nabla_{u_j} p(u_j)\}_i,$$

$$\rho(u_j) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \exp \left(-\frac{1}{2\hat{s}^2} \left\| \frac{\hat{s}}{s_{SB}} u_i - u_j \right\|^2 \right),$$

$$\begin{aligned} & \nabla_{u_j} \rho(u_j) \\ &= \frac{1}{\tau N} \sum_{i=1}^N (\tau u_i - u_j) \exp \left(-\frac{1}{2\hat{s}^2} \|\tau u_i - u_j\|^2 \right), \\ & \tau = \hat{s}/s_{SB}, \quad \tau = \hat{s}^2. \end{aligned}$$

注 3 随机耗散 Hamilton 系统 (1) 的解在概率意义下存在且唯一, 属于稳态、遍历的 Markov 过程, 不变测度为 (5) 式. 阻尼参数 f_0 以控制扩散项, 进而快速消除初值造成的瞬态振荡, 尽快到达稳态时刻, 本文选取 $f_0 = 4$.

等步长的 Störmer-Verlet 格式能有效求解 Wiener 过程驱动的耗散 Hamilton 系统 (11), 此方法经 Hairer 等^[39] 改进后满足能量守恒, 格式如下:

$$\begin{aligned} Z_{i+1/2} &= Z_i + \frac{\Delta t}{2} Y_i, \\ Y_{i+1} &= \frac{1-b}{1+b} Y_i + \frac{\Delta t}{1+b} \mathcal{L}_{i+1/2} + \frac{\sqrt{f_0}}{1+b} \Delta W_{i+1}, \\ Z_{i+1} &= Z_{i+1/2} + \frac{\Delta t}{2} Y_i, \quad i = 1, 2, \dots, M, \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $\mathcal{L}_{i+1/2} = \mathcal{L}(Z_{i+1/2})$, $b = f_0 \Delta t / 4$, $M = 30$, $\Delta t =$

0.238 是系统 (11) 的离散步长.

由 (9) 式—(12) 式得

$$H = Z(l\nu) G^T, \quad \nu = M_0 \Delta t, \quad l = 1, 2, \dots, n_{MC}, \quad (13)$$

式中, $M_0 = 18$.

经计算得 PLoM 生成的 4000 个样本的学习集, 并给出 H 的前两个分量 H_1 和 H_2 的 PDF, 具体结果见图 6 和图 7.

注 4 H 是一个唯象中间变量, 是通过主成分分析导出的期望为 0, 协方差矩阵为单位矩阵的随机向量, 即规范化随机变量. H 没有物理意义, 仅为处理数据引入的唯象参数.

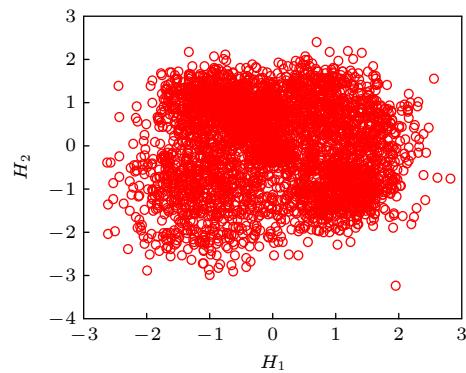


图 6 PLoM 生成的 4000 个样本的学习集

Fig. 6. The 4000 additional samples of learning set generated from PLoM.

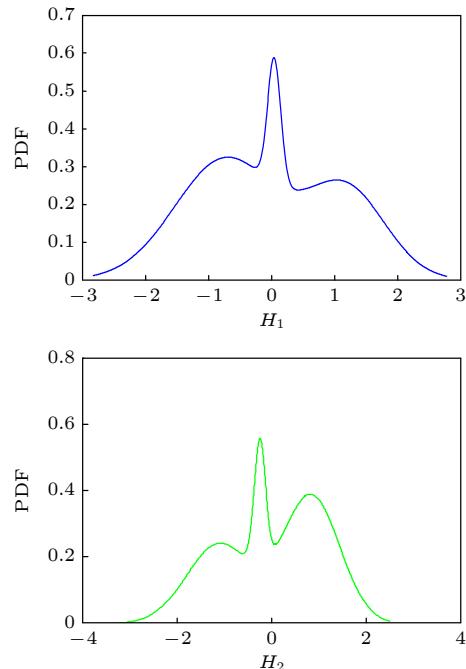


图 7 PLoM 生成的 4000 个样本

Fig. 7. The 4000 additional samples generated from PLoM.

3.7 流形上的采样

将图 6 中的样本点代入仿射变换(3), 最终生成 QoI 的采样点, 具体结果见图 8. PLoM 生成的电子实验数据样本足够丰富, 克服了实验数据的稀疏性, 是物理实验的有效替代方案. 将密度和爆速的所有采样点, 记作学习集 $\mathcal{D}_{\text{learn}} = \{(\rho^i, D^i), i = 1, 2, \dots, N_{\text{learn}}\}$, 其中 $N_{\text{learn}} = 4000$. 从图 8 可以大致看出密度和爆速满足线性关系.

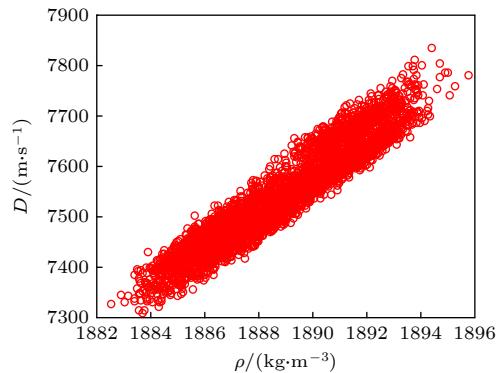


图 8 PLoM 生成的 4000 个电子实验数据

Fig. 8. The 4000 samples of digital experimental data generated from PLoM.

4 结果分析

4.1 PLoM 方法流程图和方法验证

依据第 3 节, 流形上的概率学习方法的流程图如图 9 所示.

假设 N 个数据沿圆柱螺旋曲线施加 Gauss 振荡, 样本容量 $N = 150$, 具体结果见图 10(a). 必须指出, 我们事先并不知道数据的采样方法. 使用 PLoM 方法生成 750000 个样本, 具体结果见图 10(b). 由图 10 可知, 生成的样本仍然集中在 \mathbb{R}^3 中的有界

流形, 即螺旋曲线上, 而不是弥漫在整个 \mathbb{R}^3 空间. 这说明 PLoM 方法能够保持和再现数据的几何结构, 验证了 PLoM 方法在数据扩容方面的有效性.

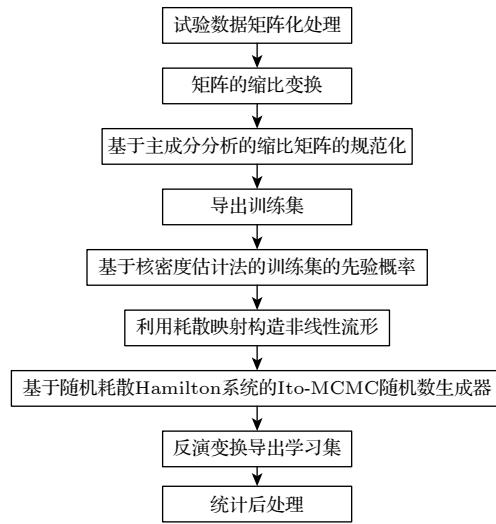


图 9 流形上概率学习方法的流程图

Fig. 9. Flow chart of PLoM.

为进一步验证 PLoM 方法的有效性, 对圆锥螺旋曲线施加 Gauss 噪声扰动, 得到 100 个数据, 具体结果见图 11(a). 然后, 使用 PLoM 方法生成 100000 个样本, 具体结果见图 11(b). 由图 11 可知, 生成的样本仍然集中在 \mathbb{R}^3 中对数螺旋曲线上. 这进一步说明了 PLoM 方法能够保持和再现数据的几何结构的能力.

4.2 QoI 的统计信息

4.2.1 基于最大信息熵理论的概率密度函数

根据图 8 导出 PBX-9502 初始密度和爆速的统计直方图, 如图 12 所示. 当物理量样本足够丰富时, 可以使用非参数统计方法, 导出物理量的随

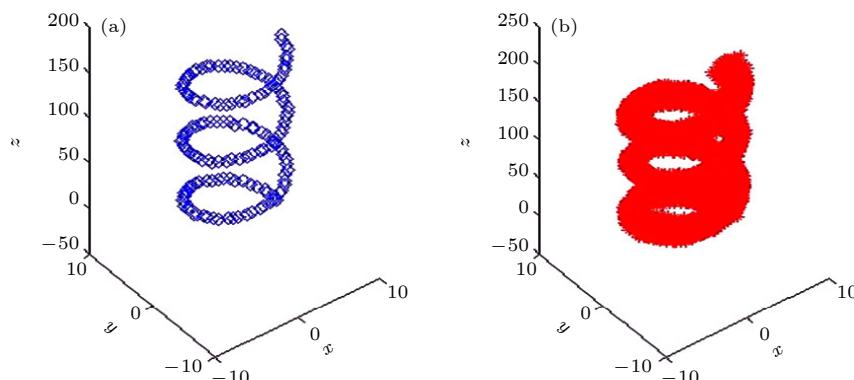


图 10 基于圆柱螺旋曲线的 PLoM 方法验证图 (a) 原始数据; (b) 生成数据

Fig. 10. Verification of PLoM methodology based on cylindrical helix curve: (a) Original samples; (b) generating data.

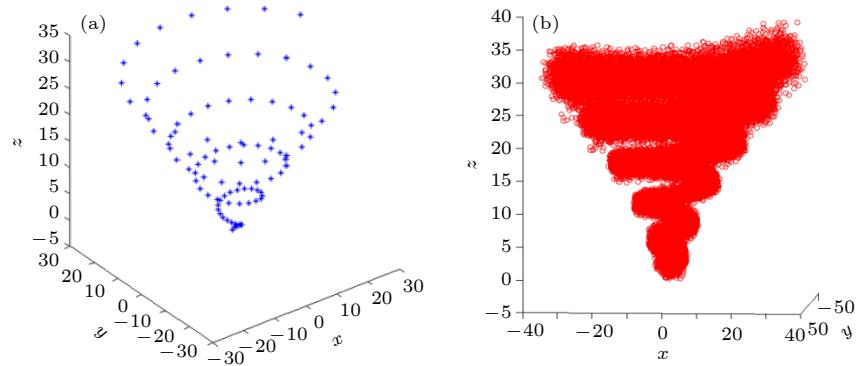


图 11 基于圆锥螺旋曲线的 PLoM 方法验证图 (a) 原始数据; (b) 生成数据

Fig. 11. Verification of PLoM methodology based on cone helix curve: (a) Original samples; (b) generating data.

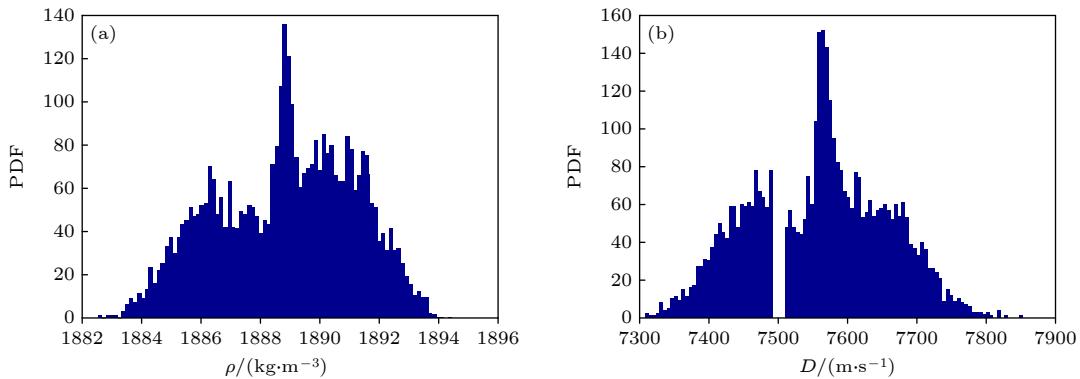


图 12 PBX-9502 密度和爆速的概率密度函数 (a) 密度; (b) 爆速

Fig. 12. PDF of detonation velocity of PBX-9502: (a) Density; (b) detonation velocity.

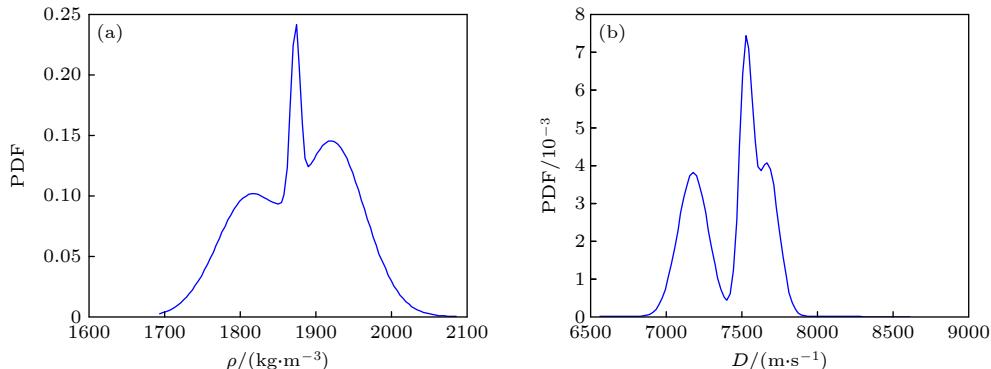


图 13 QoI 的概率密度函数 (a) 密度; (b) 爆速

Fig. 13. Probability density function of QoI: (a) Density; (b) detonation velocity.

机模型。本文使用最大熵信息方法 MaxEnt (maximum entropy information)^[40,41], 导出密度和爆速的 PDF, 具体结果见图 13。由图 13 可以看出, 密度和爆速的 PDF 属于一种非 Gauss 分布, 具有多峰态特征。实验数据, 特别是爆速, 没有集中在某个特殊值附近。这与实验操作时, 药柱直径取值范围较大有关。

进一步导出 PBX9502 的密度的期望值为

1889 kg/m^3 和标准差为 2.4 kg/m^3 , 变异系数为 $\frac{2.4 \text{ kg/m}^3}{1889 \text{ kg/m}^3} \times 100\% = 0.13\%$, 95% 置信区间为 $[1885, 1893] \text{ kg/m}^3$ 。洛斯阿拉莫斯国家实验室 (Los Alamos National Laboratory, LANL) 国家实验室 Campbell^[34] 标定的 PBX9502 的密度取值范围为 $(1890 \pm 5) \text{ kg/m}^3$ 。比较发现, $[1885, 1893] \text{ kg/m}^3 \subset [1885, 1895] \text{ kg/m}^3$ 。因此, PLoM 给出了一种密度标定方法, 且结果是可信的, PLoM 生成的密度随机样本

能满足工业生产和高精度仿真的要求。与 LANL 的结果相比, PLoM 生成的置信区间收窄了密度的标定范围, 进一步确认了 PLoM 生成的样本的实用性和有效性。

利用矩估计法还导出爆速的期望值为 7547 m/s 和标准差为 91 m/s, 95% 置信区间为 [7379, 7717] m/s, 包含孙承纬院士的标定结果 7710 m/s^[1], 这说明爆速的随机生成数也可应用于工业生产和高精度数值模拟。同时计算得爆速的变异系数 $\frac{91 \text{ m/s}}{7547 \text{ m/s}} \times 100\% = 1.21\% > 0.13\%$, 爆速的变异系数比密度的变异系数高一个量级, 即爆速比密度的离散程度更大。

4.2.2 密度和爆速的线性关系

利用图 8 结果, 根据最小二乘法, 导出密度和爆速服从仿射关系:

$$D = \varpi_0 \rho_0 - \varpi_1, \quad (14)$$

其中 $\varpi_0 = 36.34$, $\varpi_1 = 61119$, 拟合曲线见图 14。从图 14 可以看出, PLoM 生成的随机数集中在 \mathbb{R}^2 线性有界区域。也就是说, 在一定范围内, 爆速和密度满足线性关系, 爆速伴随着密度的增加而增加, 进一步确认了孙承纬院士的论断——“爆速和密度服从线性关系, 装药密度对爆速有极大影响”^[1]。

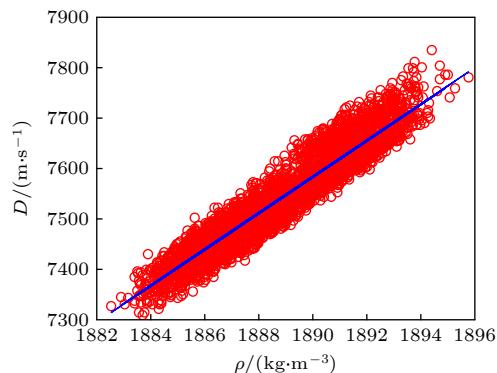


图 14 密度和爆速的曲线拟合图

Fig. 14. Curve fitting between density and detonation velocity.

进而根据 (14) 式导出变化率:

$$\frac{dD}{d\rho_0} = 36.46 \frac{\text{m/s}}{\text{kg/m}^3}. \quad (15)$$

这意味着密度的微小变化, 能引发爆速一个量级以上的变化, 即爆速的不确定度更大。这与事实相符, 因为测试爆速的设备更加精密, 实验流程更加复杂^[1]。这说明了实验设计时, 保证 PBX9502 压制密度的

精度的重要性。压制流程不合格的 PBX9502 会产生灾难性的、无法预测的后果。

4.3 爆压的不确定度传播

按照 Chapman-Jouguet 理论, 激波两侧物理量满足动量守恒定律, 即:

$$P - P_0 = \rho_0(D - u_0)(u_p - u_0). \quad (16)$$

假设波前速度 $u_0 = 0$ 。另一方面, 爆轰过程中 $P_0 \ll P$, 从而假设 $P_0 = 0$, (16) 式简化为

$$P = \rho_0 D u_p. \quad (17)$$

另一方面, 根据 Hugoniot 关系, 波后粒子速度 u_p 和爆速 D 存在线性关系:

$$D = c_0 + \lambda u_p, \quad (18)$$

将 (18) 式代入 (17) 式得

$$P = \frac{\rho_0 D (D - c_0)}{\lambda}. \quad (19)$$

本文利用 LANL 实验室 Gustavsen 团队标定的参数^[42], Hugoniot 斜率 $\lambda = 1.81$, 体积声速 $c_0 = 2970 \text{ m/s}$ 。利用 4.2.1 节标定的、图 13 中的爆速和密度的 PDF, 结合图 8 结果, 利用核密度估计方法得到爆压 P 的 PDF 如图 15 所示。经计算得到爆压期望值为 36.07 GPa, 标准差为 1.61 GPa。

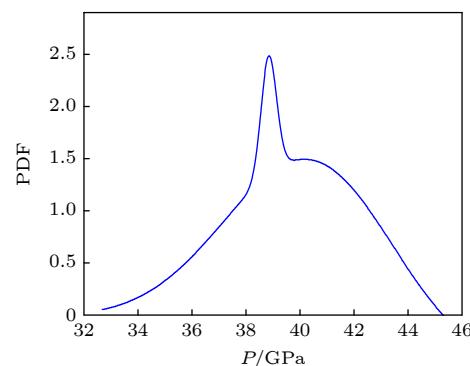


图 15 爆压的概率密度函数

Fig. 15. PDF of detonation pressure.

利用图 15 结果, 计算得爆压的变异系数 $\frac{1.61 \text{ GPa}}{36.07 \text{ GPa}} \times 100\% = 4.46\%$, 远大于 4.2.1 节爆速和密度的变异系数。比较密度、爆速、爆压的变异系数, 研究发现密度的变异系数最小, 爆压最大, 且比密度的变异系数高一个量级。研究结果支持孙承纬院士“爆压的离散程度较高”的论断^[1]。

由 (14) 式和 (19) 式导出:

$$P = a_3\rho_0^3 + a_2\rho_0^2 + a_1\rho_0, \quad (20)$$

此时, $a_3 = \varpi_0^2/\lambda$, $a_2 = -2\frac{\varpi_1\varpi_0}{\lambda} - \frac{c_0\varpi_0}{\lambda}$, $a_1 = \frac{\varpi_1\varpi_0 + \varpi_1^2}{\lambda}$. (20) 式表明, 爆压和密度服从非线性函数关系. 众所周知, 爆压测量的实验流程复杂, 成本较大, (20) 式恰好为爆压代理模型, 为爆压标定提供了一种新的经济快捷的途径.

由 (20) 式计算得: $\frac{dP}{d\rho_0} = 3a_3\rho_0^2 + 2a_2\rho_0 + a_1$, 这说明 PBX9502 初始密度的微小变化, 能引起爆压的较大振荡, 且密度的变化对爆压的影响比爆速更大. 确认了爆压标定实验流程中, 保证炸药密度压制精度的重要性.

5 结 论

PLoM 方法本质上属于机器学习, 该方法将基于几何耗散的流形嵌入和 Itô-MCMC 结合, 实现了实验数据集的有效扩容, 丰富了样本信息. 首先将具有 n_d 个物理属性的 N 个样本点当作某个随机矩阵的抽样, 用 X_d 表征. 再将高维小样本实验数据做缩比处理. 接着利用 PCA 将缩比矩阵进一步规范化, 得到训练集 η_d . 然后, 利用容量有限的训练集和 Gauss 核密度估计法构造随机向量的先验 PDF, 接着利用训练集 η_d 构造基于耗散映射和相应的流形以及投影矩阵. 另一方面, MCMC 随机数生成器是基于 Wiener 过程驱动的耗散 Hamilton 系统, 其初值为规范化样本点构成的数据矩阵. 将 Itô-MCMC 抽样限制在耗散映射定义的流形上, 得到学习集. 最后使用反演变换生成密度和爆速的电子实验数据.

使用的关键技术还包括: 第一, 基于训练集和几何耗散方法, 构造耗散基函数. 耗散基函数能发掘和刻画数据结构的几何特征, 探索样本聚集的流形. 第二, Itô-MCMC 的不变测度与训练集的 Gauss 核密度估计密切相关, 结合流形嵌入方法, 将采样限制在流形上. 生成的样本, 不仅自身的概率分布符合实际, 而且保留了相关物理量的物理信息和几何结构. 第三, 使用 Störmer-Verlet 格式计算 Wiener 过程驱动的耗散 Hamilton 系统, 该算法易于实现并行计算, 进而急剧减少了多核计算机上的程序运行时间. 还能快速摆脱瞬态振荡, 快速到达指定不变测度的稳态响应. 最后, 通过验证算例还发

现, PLoM 方法受到噪声影响时, 具有抗干扰强的特点.

将 PLoM 生成的随机数进行统计后处理, 能得到密度和爆速的统计信息, 密度的 95% 置信区间包含于 LANL 实验室标定的取值范围. 爆速的 95% 置信区间包含孙承纬院士标定的数据. 说明 PLoM 生成的密度和爆速的随机数符合工业生产和高精度仿真的要求, 实现了稀疏实验数据的有效扩容. 增加电子实验数据后, 还导出更丰富物理信息. 与增加物理实验次数的策略相比较, 安全性高, 标定成本可以忽略不计. 研究发现, 生成的电子实验数据保持了 PBX9502 的密度和爆速的仿射关系. 进一步导出, 密度和爆压之间具有非线性函数关系. 结果表明, 初始密度的微小的变化, 能引起爆速和爆压的巨大振荡. 确认了爆速和爆压标定实验流程中, 保证炸药密度压制精度的重要性.

PLoM 理论实际上也是一种很好的降维工具, 期间经过了两次降维, 第 1 次是 PCA 降维, 第 2 次是耗散映射降维. 更复杂系统的降维是我们下一步的研究目标.

参 考 文 献

- [1] Sun C W, Wei Y Z, Zhou Z K 2000 *Applied Detonation Physics* (Beijing: National Defense Industry Press) (in Chinese) [孙承纬, 卫玉章, 周之奎 2000 应用爆轰物理 (北京: 国防工业出版社)]
- [2] Mader C 1979 *Numerical Modeling of Detonations* (Berkeley: University of California)
- [3] Liang X, Wang R L, Hu Z X, Chen J T 2023 *Explos. Shock. Waves.* **43** 71 (in Chinese) [梁霄, 王瑞利, 胡星志, 陈江涛 2023 爆炸与冲击 **43** 71]
- [4] Liang X, Wang R L 2024 *Acta. Arma.* **45** 1673 (in Chinese) [梁霄, 王瑞利 2024 兵工学报 **45** 1673]
- [5] Liang X, Wang R L 2020 *Int. J. Uncertainty. Quantif.* **10** 83
- [6] Bratton R N, Avramova M, Ivanov K 2014 *Nucl. Eng. Technol.* **46** 313
- [7] Cartwright K, Pointon T, Oliver B V, Swanelkamp S B, Hinshelwood D, Angus J R, Richardson A S, Mosher D 2016 *Direct Electron-beam-injection Experiments for Validation of Air-chemistry Models* (New Mexico: Sandia National Laboratories) SAND2016-2437C
- [8] Los Alamos National Laboratory 2022 *Advanced Simulation and Computing Simulation Strategy Report* LA-UR-22-25074
- [9] Hu Z H, Ye T, Liu X G, Wang J 2017 *Acta. Phys. Sin.* **66** 012801 (in Chinese) [胡泽华, 叶涛, 刘雄国, 王佳 2017 物理学报 **66** 012801]
- [10] AIAA 1998 *Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations* (AIAA G-077-1998)
- [11] Clark M A, Kearns K, Overholt J L, Gross K H, Barthelemy B, Reed C 2014 *Air Force Research Laboratory Test and Evaluation, Verification and Validation of Autonomous*

- Systems Challenge Exploration Final Report Case Number 88ABW-2014-4063*
- [12] Hu X Z, Duan Y H, Wang R L, Liang X, Chen J T 2019 *J. Verif. Valid. Uncert.* **4** 021006
- [13] Zhang S Q, Yang H T 2023 *Acta. Phys. Sin.* **72** 110303 (in Chinese) [张诗琪, 杨化通 2023 物理学报 **72** 110303]
- [14] Wishart J, Como S, Forgione U, Weast J, Weston L, Smart A, Nicols G, Ramesh S 2020 *SAE Int. J. CAV* **3** 267
- [15] Department of Energy's NNSA 2005 Holistic, Hierarchical VVUQ as the Scientific Method for PSAAP Report LA-UR-23-32192
- [16] Department of Defense 2019 Modeling and Simulation (M&S) Verification, Validation, and Accreditation (VV&A) Recommended Practices Guide (RPG) Core Document: Introduction
- [17] Dahm W 2010 *Technology Horizons a Vision for Air Force Science & Technology During 2010-2030* Report AF/ST-TR-10-01-PR
- [18] Balci O 1994 *Ann. Oper. Res.* **53** 121
- [19] Metzger E J, Barton N P, Smedstad O M, Ruston B C, Wallcraft A J, Whitcomb T R, Ridout J A, Franklin D S, Zamudio L, Posey P G, Reynolds C A, Phelps M 2016 *Verification and Validation of a Navy ESPC Hindcast with Loosely Coupled data Assimilation* American Geophysical Union A41G-0130
- [20] American Society of Mechanical Engineers 2022 *Verification, Validation, and Uncertainty Quantification Terminology in Computational Modeling and Simulation* ASME VVUQ 1-2022
- [21] Oberkampf W, Roy C 2010 *Verification and Validation in Scientific Computing* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [22] Liang X, Wang R L 2019 *Def. Technol.* **15** 398
- [23] Wang Y J, Zhang S D, Li H, Zhou H B 2016 *Acta. Phys. Sin.* **65** 106401 (in Chinese) [王言金, 张树道, 李华, 周海兵 2016 物理学报 **65** 106401]
- [24] Park C, Nili S, Mathew J T, Ouellet F, Koneru R, Kim N, Balachandar S, Haftka R 2021 *J. Verif. Valid. Uncert.* **6** 119007
- [25] Liang X, Wang R L 2017 *Acta. Phys. Sin.* **66** 116401 (in Chinese) [梁霄, 王瑞利 2017 物理学报 **66** 116401]
- [26] Soize C, Ghanem R 2016 *J. Comput. Phys.* **321** 242
- [27] Ghanem R, Soize C, Safta C, Huan X, Lacaze G, Oefelein J C, Najm H N 2019 *J. Comput. Phys.* **399** 108930
- [28] Capiez-Lernout E, Ezvan O, Soize C 2024 *J. Comput. Inf. Sci. Eng.* **24** 061006
- [29] Nespolous J, Perrin G, Funfschilling C, Soize C 2024 *Physics D* **457** 133977
- [30] Capiez-Lernout E, Soize C 2022 *Int. J. Non. Linear. Mech.* **143** 104023
- [31] Metropolis N, Ulam S 1949 *J. Am. Stat. Assoc.* **44** 335
- [32] Hastings W 1970 *Biometrika* **109** 57
- [33] Geman S, Geman D 1984 *IEEE Trans. Pattern. Anal. Mach. Intell.* **6** 721
- [34] Campbell A 1984 *Pyrotechnics* **9** 183
- [35] Peterson P, Idar D 2005 *Propell. Explos. Pyrot.* **30** 88
- [36] Davis W C, Hill L G 2002 *12th International Symposium Detonation* San Diego, USA, August 11–16, 2002 p220
- [37] Handley C, Lambourn B, Whitworth N, James H, Belfield W 2018 *Appl. Phys. Rev.* **5** 011303
- [38] Coifman R, Lafon S, Lee A, Maggioni M, Nadler B, Warner F 2005 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102** 7426
- [39] Hairer E, Lubich C, Wanner G 2002 *Geometric Numerical Integration Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations* (Heidelberg: Springer-Verlag)
- [40] Soize C 2008 *Int. J. Numer. Methods Eng.* **76** 1583
- [41] Shannon C 1948 *Bell. Syst. Tech. J.* **27** 623
- [42] Gustavsen R, Sheffield S, Alcon R 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 114907

Uncertainty analysis of detonation based on probability learning on manifold^{*}

LIANG Xiao^{1)†} WANG Yanjin²⁾ WANG Ruili²⁾³⁾

1) (*School of Mathematics and System Science, Shandong University of Science and Technology, Qingdao 266590, China*)

2) (*Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China*)

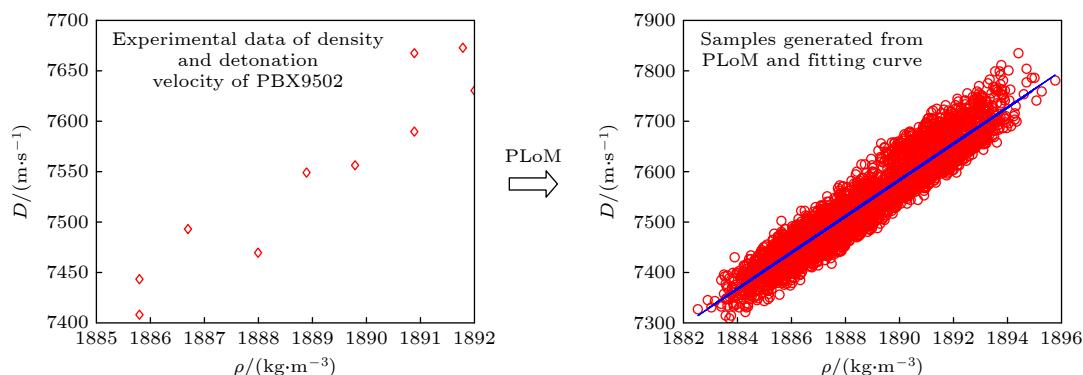
3) (*Henan Academy of Sciences, Zhengzhou 450052, China*)

(Received 26 October 2024; revised manuscript received 7 April 2025)

Abstract

Detonation test is affected by small experimental datasets due to high risk of implementation and the huge cost of sample production and measurement. The major challenges of limited data consist in constructing the probability distribution of physical quantities and application of machine learning. Probability learning on manifold (PLoM) can generate a large number of implementations that are consistent with practical common knowledge, while preserving potential physical mechanism these generated samples. So PLoM is viewed as an efficient tool of tackling small samples. To begin with, experimental data are assumed to be concentrated on an

unknown subset of Euclidean space and can be treated as the sampling of random vector to be determined. Meanwhile, experimental problem is solved in the framework of matrix and the scaling transformation is conducted on the datasets of PBX9502 with multi-physics attributes. Then the principal component analysis is utilized to normalize the scaling matrix, and the normalization matrix is labeled as training sets. Moreover, the altered multi-dimensional Gaussian kernel density estimation is utilized for estimating the probability distribution of training set. Furthermore, diffusion map is used to discover and characterize the geometry and structure of dataset. In other words, nonlinear manifold based on the training set is constructed through diffusion map. Specifically, the first eigenvalue and corresponding eigenvector is related to the construction of diffusion basis and diffusion maps. Further, Itô-MCMC sampler is associated with dissipative Hamilton system driven by Wiener process, for which the initial condition is set to be training set, and prior probability is conceived as invariant measure. Störmer-Verlet scheme is used for solving the stochastic dissipative Hamilton equations. Finally, additional realizations of learning dataset are fulfilled through the inversion transformation. The result shows that random number generated from PLoM satisfies the requirements of industrial and high fidelity simulation. The 95% confidence interval of density is included in the range calibrated by Los Alamos National Laboratory. And the value of detonation velocity calibrated by Prof. Chengwei Sun [Sun C W, Wei Y Z, Zhou Z K 2000 *Applied Detonation Physics* (Beijing: National Defense Industry Press) p224] also falls into 95% confidence interval of detonation velocity generated by PLoM. It is also deduced from the learning set that density and detonation velocity satisfies the affine transformation. Furthermore, detonation pressure has nonlinear relationship with density. Tiny variation of density can lead to magnificent fluctuation of detonation pressure and detonation velocity. Detonation pressure has the largest discreetness in all the physical quantities through the comparison of variation coefficients of learning set, which coincides with the existing research results. The method used is universal enough and can be extended to other detonation systems.



Keywords: probabilistic learning on manifold, diffusion map, stochastic dissipative Hamilton equations, small datasets, detonation, uncertainty quantification

PACS: 47.40.Rs, 02.50.-r, 02.70.-c

DOI: [10.7498/aps.74.20241501](https://doi.org/10.7498/aps.74.20241501)

CSTR: [32037.14.aps.74.20241501](https://doi.org/10.7498/aps.74.20241501)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12171047), the National Natural Science Foundation of China - China Academy of Engineering Physics Joint Fund for NSAF (Grant No. U2230208), the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant No. ZR2021BA056), and China Scholarship Council (Grant No. CSC202308370209).

† Corresponding author. E-mail: mathlx@163.com



基于流形上概率学习的爆轰不确定度分析

梁霄 王言金 王瑞利

Uncertainty analysis of detonation based on probability learning on manifold

LIANG Xiao WANG Yanjin WANG Ruili

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 74, 120501 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20241501

CSTR: 32037.14.aps.74.20241501

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241501>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

机器学习回归不确定性揭示自驱动活性粒子的群集相变

Reveal flocking phase transition of self-propelled active particles by machine learning regression uncertainty

物理学报. 2023, 72(20): 200701 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230896>

K-M花样分析法测定薄晶体厚度和消光距离的不确定度评定

Evaluation of uncertainty in measuring thin crystal thickness and extinction distance by Kossel–Mllenstedt pattern analysis

物理学报. 2022, 71(14): 146803 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212271>

熵不确定度关系综述

Review on entropic uncertainty relations

物理学报. 2022, 71(7): 070302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212197>

不确定性的定量描述和熵不确定关系

Quantitative description of uncertainty and entropic uncertainty relation

物理学报. 2023, 72(11): 110303 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222443>

可搬运锶光晶格钟系统不确定度的评估

Evaluation of systematic uncertainty for transportable ^{87}Sr optical lattice clock

物理学报. 2021, 70(3): 030601 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201204>

基于波动与扩散物理系统的机器学习

Machine learning based on wave and diffusion physical systems

物理学报. 2021, 70(14): 144204 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210879>