

DOI: 10.11883/bzycj-2024-0099

端到端机器学习代理模型构建及其 在爆轰驱动问题中的应用*

柏劲松, 刘 洋, 陈 翰, 钟 敏

(中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理全国重点实验室, 四川 绵阳 621999)

摘要: 人工智能/机器学习方法能够发现数据中隐藏的物理规律, 构建状态参数与动态结果之间端到端的代理模型, 可高效解决强耦合、非线性、多物理等复杂工程问题。在高度非线性的爆炸与冲击动力学领域, 选择了一个经典的爆轰驱动问题作为研究对象, 以数值模拟结果作为机器学习代理模型的训练数据, 将正向模拟与逆向设计有机结合起来, 基于深度神经网络技术, 构建了特征位置速度剖面、材料动态变形与工程因素之间端到端的代理模型, 给出了代理模型的计算精确度, 验证了代理模型从速度剖面反演工程因素的能力。结果表明: 端到端代理模型具有较高的预测能力, 其预测的速度剖面与工程因素估计的相对误差均小于 1%, 可用于高度非线性的爆炸与冲击动力学问题的快速设计、高精度预测和敏捷迭代。

关键词: 计算爆炸力学; 爆轰驱动; 人工智能; 机器学习; 端到端代理模型; 深度神经网络

中图分类号: O389

国标学科代码: 13035

文献标志码: A

Construction of end-to-end machine learning surrogate model and its application in detonation driving problem

BAI Jingsong, LIU Yang, CHEN Han, ZHONG Min

(National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics,
China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, Sichuan, China)

Abstract: Artificial intelligence/machine learning methods can discover hidden physical patterns in data. By constructing an end-to-end surrogate model between state parameters and dynamic results, many complex engineering problems such as strong coupling, nonlinearity, and multiphysics can be efficiently solved. In the field of highly nonlinear explosion and shock dynamics, a classic detonation driving problem was chosen as the research object. Using numerical simulation results as training data for machine learning surrogate models, and combining forward simulation and reverse design organically. Based on deep neural network technology, an end-to-end surrogate model was constructed between feature position velocity profiles, material dynamic deformation, and engineering factors. And the calculation accuracy of the surrogate model was provided, verifying the ability to invert engineering factors from velocity profiles. The research results indicate that the end-to-end surrogate model has high predictive ability, with relative errors of less than 1% in both velocity profile prediction and engineering factor estimation. It can be applied to the rapid design, high-precision prediction, and agile iteration of highly nonlinear explosion and impact dynamics problems.

Keywords: computational explosion mechanics; detonation drive; artificial intelligence; machine learning; end-to-end surrogate model; deep neural network

人工智能(artificial intelligence, AI)是能够和人一样进行感知、认知、决策和执行的人工程序或系统, 是新一轮科技革命和产业变革的重要驱动力量。我国在人工智能方面取得了长足进步, 集群作战、

* 收稿日期: 2024-04-10; 修回日期: 2024-08-15

第一作者: 柏劲松(1968—), 男, 博士, 研究员, bjong@foxmail.com

通信作者: 刘 洋(1987—), 男, 博士, 助理研究员, blonster@163.com

有人/无人协同作战、智能自主作战等新型作战方式不断涌现, 各类新装备层出不穷, 作战领域正在发生前所未有的深刻变革^[1]; 国外的人工智能也在高速地发展, 如美国国防高级研究计划局(Defense Advanced Research Projects Agency, DARPA)研制的无人水面艇^[2], 能够自动航行数月、自己设定目标, 并且无需指定航线就能理解周围舰船的行为; 2022 年, 美国洛斯阿拉莫斯国家实验室发布了系列报告^[3], 介绍了实验室未来材料战略的 7 大领航领域, 其中在材料设计和模型开发领域力求使用机器学习人工智能方法实现材料设计和相关驱动预测, 并给出了未来 6~10 年的研究目标。

机器学习技术是现代人工智能系统的基础和核心, 它使计算机系统能够通过识别和利用现有知识来获取新知识和新技能, 赋予了机器从数据中学习潜在规律的能力。在过去几十年里, 机器学习影响了许多领域, 如自动驾驶^[4]、医疗保健^[5]、金融^[6]、智能制造^[7]、能源^[8]等。在自然科学领域, 机器学习被广泛应用于物理学的多个分支, 包括统计物理学^[9]、凝聚态物理学^[10]、生物物理学^[11]、天体物理学^[12]等。在材料科学领域, 机器学习快速发展, 已被应用于加速高应变的连续尺度脆性断裂模拟^[13]、多晶金属延性损伤模型参数预测方法^[14]、平衡相变^[15]等的研究中; 而在计算流体力学领域, 机器学习也有了大量应用, 例如刘洋宏^[16]研究了训练集和测试集数据来自不同几何模型时机器学习模型对湍流演化的预测能力, 刘永泽^[17]实现了舰船毁伤特性的快速准确预测, 张筱迪^[18]对不同温度和跌落工况下混凝土楼板的动态响应做出了深入分析等。

爆轰驱动问题是材料、结构或产品在炸药爆炸作用下的复杂流动变形问题, 是高度非线性的瞬态动力学问题。其典型时刻和典型位置的热力学状态受初始状态或工程因素的影响, 可通过动态诊断测试设备或数值模拟获取。本文中, 利用机器学习技术, 建立物理模型输入参数与输出参数之间的黑箱式映射关系, 即端到端代理模型, 从而实现实验状态参数的高效预测: 在离线阶段, 使用比较昂贵的大规模数据(来自数值模拟或实验)和计算资源训练物理模型的代理模型; 在在线阶段, 使用相对轻量的代理模型替换数值模拟过程, 实现敏捷迭代和快速预测。针对爆轰驱动问题, 以数值模拟结果为机器学习的训练数据源, 基于神经网络建立端到端代理模型, 以期对爆轰驱动问题的实验设计与快速预测提供技术支撑。

1 基于深度神经网络的机器学习方法

常规拟合函数, 如多项式函数、线性函数、指数函数、对数函数等, 可以解析求导, 其描述的行为偏线性, 对特定问题有较强的拟合能力, 但总体上常规拟合函数的表达能力十分有限。与常规拟合函数相比, 深度神经网络拟合函数的特点是表达能力强, 描述的行为非线性, 参数集非常大, 可半解析求导, 对于通用问题具备较强的拟合能力, 其表现形式为:

$$\begin{cases} \mathbf{y} = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{a}^{(N)} \cdot \mathbf{W}^{(N)} + \mathbf{b}^{(N+1)} \\ \boldsymbol{\theta} = (\mathbf{W}^{(0)}, \mathbf{b}^{(1)}, \mathbf{W}^{(1)}, \mathbf{b}^{(2)}, \mathbf{W}^{(2)}, \mathbf{b}^{(3)}, \mathbf{W}^{(3)}, \mathbf{b}^{(4)}, \dots, \mathbf{W}^{(N)}, \mathbf{b}^{(N+1)}) \\ \mathbf{a}^{(0)} = \mathbf{x} \\ \mathbf{a}^{(1)} = \tanh(\mathbf{a}^{(0)} \cdot \mathbf{W}^{(0)} + \mathbf{b}^{(1)}) \\ \mathbf{a}^{(2)} = \tanh(\mathbf{a}^{(1)} \cdot \mathbf{W}^{(1)} + \mathbf{b}^{(2)}) \\ \mathbf{a}^{(3)} = \tanh(\mathbf{a}^{(2)} \cdot \mathbf{W}^{(2)} + \mathbf{b}^{(3)}) \\ \mathbf{a}^{(4)} = \tanh(\mathbf{a}^{(3)} \cdot \mathbf{W}^{(3)} + \mathbf{b}^{(4)}) \\ \vdots \\ \mathbf{a}^{(N)} = \tanh(\mathbf{a}^{(N-1)} \cdot \mathbf{W}^{(N-1)} + \mathbf{b}^{(N)}) \end{cases} \quad (1)$$

式中: \mathbf{y} 为神经网络的输出结果; \mathbf{x} 为输入变量; $\mathbf{a}^{(k)}$ 为迭代函数, 上标 $k=0, 1, \dots, N$, N 为迭代层数; $\boldsymbol{\theta}$ 为输入序参量, 包含一次拟合线性项 $\mathbf{W}^{(k)}$ 和线性拟合常数项 $\mathbf{b}^{(k+1)}$ 。

神经网络的体系结构是一个多层前馈网络, 由数个隐示层(hidden layer)连续堆叠而成, 这种多层结构使神经网络能够学习做出准确预测所需的关键特征。深度神经网络本质上是一组带有权值的边和节点组成的相互连接的层, 称为神经元, 如图 1 所示, 其中: $x_1 \sim x_3$ 为神经网络的输入值, y 为输出值。训练过程开始前, 每组神经元会被赋予一个随机权重, 以保证同层不同神经元的行为不会趋同; 训练过程中, 如果网络不能准确实现输入到输出的映射时, 系统将按照选定的最优化算法调整神经元权重; 经过充分

的训练后,由神经元权重表达的输出模式(如图 2 所示)就能较好地近似训练数据集中输入和输出的映射关系。图 2 中箭头上的数字为权重,红色箭头和节点表示对输出的影响可以忽略的网络结构。图 2 同时展现了神经网络结构的自组织性。神经网络持续将低维向量非线性映射到高维空间,不断寻找特征、压缩数据,将模型参数放入高维空间中,它能在不同参数下生成模型,即神经网络本身可作为代理模型使用。神经网络一般包括 3 部分,即显示层(输入变量)、隐层和显示层(输出变量),隐层的描述通常包含隐层的深度和宽度,如图 3 所示。

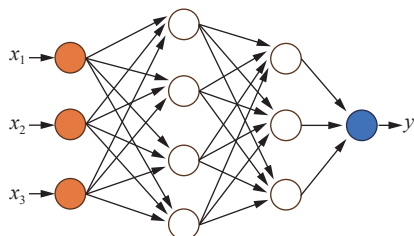


图 1 神经元

Fig. 1 Neurons

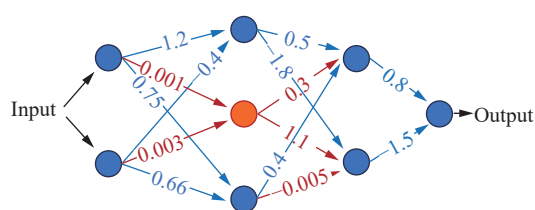


图 2 由神经元权重表达的输出模式

Fig. 2 Output pattern represented by neuron weights

影响机器学习代理模型精度的因素很多,包括数据、优化算法、网络结构等。机器学习所需的数据分为 2 个子集:第 1 个子集被称为训练数据集,用于拟合代理模型;第 2 个子集称为测试数据,不在模型训练过程中使用,而是作为代理模型行为的期望,用于测试训练完成的模型的预测能力。机器学习方法中不同的优化算法也会对代理模型的计算结果产生影响,为了进一步说明,对比分析了 BFGS(Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)和 ADAM(adaptive moment estimation)2 种算法。其中 BFGS 算法由 Broyden^[19]、Fletcher^[20]、Goldfarb^[21] 和 Shanno^[22] 在 20 世纪 70 年代初提出,主要针对无约束优化问题,通过目标函数和一阶导数构造出目标函数的曲线近似,具有收敛速度快的优点,是一种比较常用的牛顿算法。ADAM 算法是一种基于低阶自适应矩估计的随机目标函数的一阶梯度优化算法^[23],通过对梯度指数的加权平均实现对网络的平滑处理、降低梯度的摆动幅度,适用于含大规模数据和参数的优化问题,相比于传统梯度下降法,收敛速度更快、效果更好,能提高算法的整体性能。图 4 比较了爆炸加载波形的数值模拟结果与 2 种优化算法的结果,其中:实线为模拟结果,虚线为算法优化结果。可以看出,相较于 BFGS 算法,ADAM 算法的结果更接近数值模拟结果,因此,本文的机器学习均采用 ADAM 算法。深度神经网络的超参数选择,特别是神经网络隐层深度(d_h)和隐层宽度(w_h)的取值,也会对代理模型的计算结果产生影响。这里以一个算例来进行说明。机器学习的数据来源于双变量函数 $y_1 = \sin\theta_1 \cos\varphi$, 其中: y_1 为函数; θ_1 为第 1 个变量, $\theta_1 \in [-\pi/2, \pi/2]$; φ 为第 2 个变量, $\varphi \in [-\pi/2, \pi/2]$ 。输出数据维度为 200×200 , 使用 ADAM 优化算法获得基于神经网络的机器学习代理模型。选取 6 种不同 (d_h, w_h) 组合,比较代理模型与解析解之间的差异,结果如图 5 所示,其中:实线表示解析结果,虚线表示代理模型的输出。表 1 给出了代理模型与解析解之间的标准误差,可以看出,不同的超参数可能使代理模型的预测标准误差相差数倍。

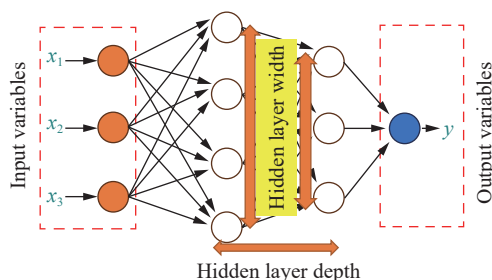


图 3 神经网络的几个概念

Fig. 3 Several concepts of neural network

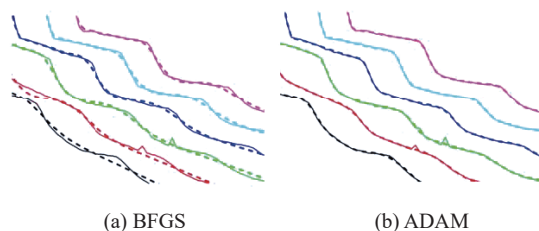


图 4 BFGS 和 ADAM 算法优化结果与模拟结果的比较

Fig. 4 Comparison of optimization results of BFGS and ADAM algorithm with simulation results

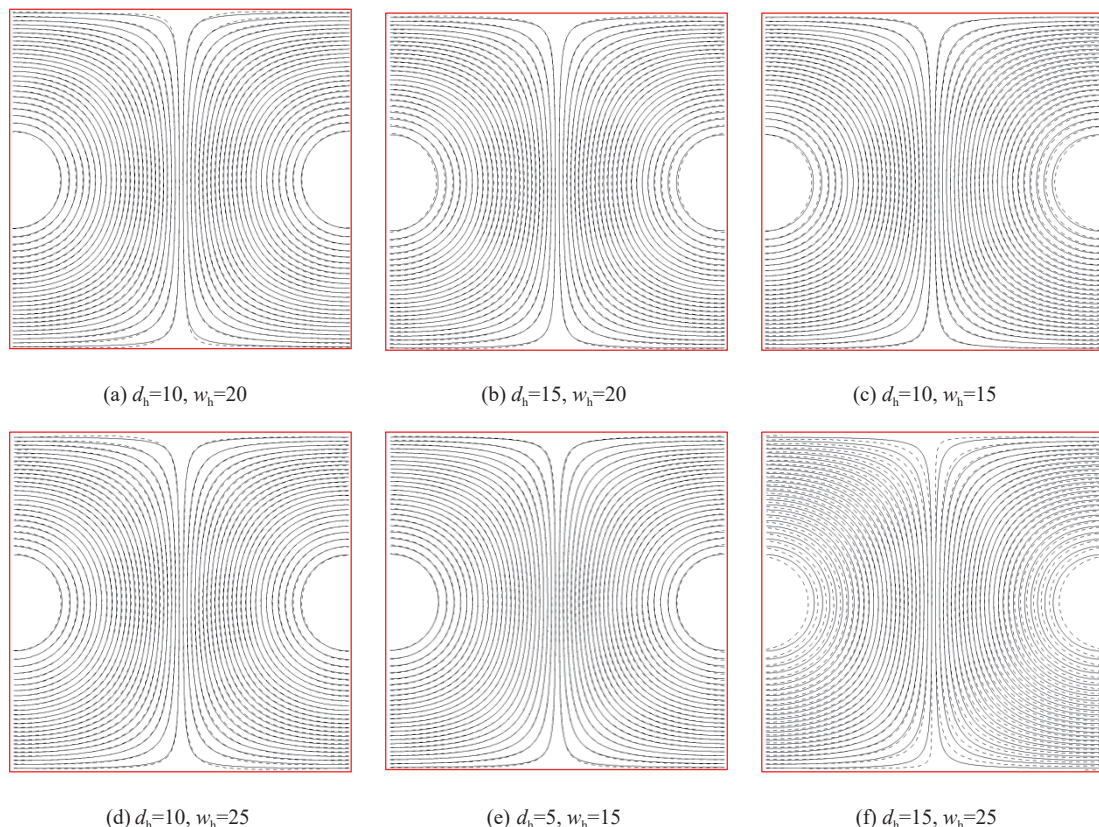


图 5 不同神经网络结构的代理模型计算结果与解析解的比较

Fig. 5 Comparison of calculation results and analytical solutions of surrogate models with different neural network structures

表 1 不同神经网络结构对代理模型的计算效果分析

Table 1 Analysis of calculation effect of surrogate model with different neural network structures

组合序号	d_h	w_h	标准误差
0	10	20	3.8845×10^{-3}
1	15	20	3.4626×10^{-3}
2	10	15	4.4272×10^{-3}
3	10	25	3.3092×10^{-3}
4	5	15	2.3908×10^{-3}
5	15	25	1.0031×10^{-2}

2 爆轰驱动问题中的机器学习代理模型及其验证

2.1 数值模拟模型及代理模型构建

数据是代理模型的基础,其来源主要有实验采集、理论计算和数值模拟。针对爆轰驱动问题,只考虑单因素(炸药与内壳之间的间隙厚度)影响,采用爆炸与冲击动力学方法^[24-25]进行数值模拟,模拟结果用于代理模型的训练数据源。

单因素影响爆轰驱动模型(图 6)是轴对称模型,其中外壳和内壳的材料为铜,炸药的初始起爆点为底部壳体的内侧中心位置,炸药与内壳之间的间隙厚度为 h ,取值范围为 $0 \sim 5$ mm,测点 P_1 和 P_2 分别位于外壳底部外界面的中心位置 and 外壳右侧外界面的中心位置。数值模拟中,输出 h 分别为 0、1、2、3、4 和 5 mm 工况下 P_1 和 P_2 的速度-时间($t \leq 25 \mu\text{s}$)曲线,同时每间隔 $1 \mu\text{s}$ 输出内、外壳体材料的变形分

布, 这 2 套数据用于机器学习代理模型的训练。数值模拟的计算域为 $12\text{ cm} \times 20\text{ cm}$, 网格尺寸为 0.1 mm , 每一个模型的串行计算机时约为 45 h 。

采用 3 种不同的机器学习代理模型。第 1 种为速度(v)剖面代理模型, 可表示为:

$$v = f(h, t) \quad (2)$$

第 2 种为速度反函数代理模型, 可表示为:

$$h = f^{-1}(v, t) \quad (3)$$

第 3 种为流场中材料动态时空分布代理模型, 可表示为:

$$Z = G(h, c_x, c_y, t) \quad (4)$$

式中: v 为速度, t 为时间, Z 为体积分, G 为任意多元函数, c_x 和 c_y 为空间坐标。

采用如图 3 所示的深度神经网络代理模型, 根据具体问题中的数据规模、输入/输出数据的维度、数据分布特征等因素调整隐含层深度(d_h)和宽度(w_h)这 2 个参数。模型参数的选取原则为: (1) 数据集规模较小、输入/输出数据维度较低时, 为减轻过拟合现象, 不宜采用大规模的神经网络模型, 即应选取较小的 d_h 和 w_h ; (2) 输入数据与输出数据之间的映射关系越接近线性, 越容易被小规模神经网络模型描述, 即可选择较小的 d_h 和 w_h ; (3) 如果同一组数据集可以训练多个代理模型, 然后再选择其中最有效的一个, 则应在满足精度要求的前提下, 尽可能选择规模更小的模型, 即选择 d_h 和 w_h 更小的模型配置。在速度剖面(速度-时间曲线)代理模型和速度反函数代理模型中, $d_h=8$ 、 $w_h=20$; 在流场中材料动态时空分布代理模型中, $d_h=16$ 、 $w_h=50$ 。

代理模型在训练过程中接收输入的数值模拟数据。在速度剖面代理模型和速度反函数代理模型中, 自变量为 2 个, 且输入数据具有典型的一维特征, 规模较小; 在流场中材料动态时空分布代理模型中, 自变量有 4 个, 输入数据涉及空间位置坐标, 与数值模拟的网格数相关, 规模较大。在代理模型的构建过程中, 考虑到速度剖面和材料空间分布的取值均可能接近零, 此时, 相对误差无法定义, 因此, 采用更具普适性的均方误差(mean square error, MSE)作为损失函数。同时, 为了限制神经网络模型的过拟合程度, 采用 L2 正则化优化模型参数。在评估代理模型的预测效果时, 依旧采用了相对误差。

2.2 代理模型的计算精度及其预测能力分析

图 7 显示了 h 分别为 0、1、2、3、4 和 5 mm 工况下测点 P_1 和 P_2 的速度剖面。可以看出, P_1 的速度剖面比较光滑, P_2 的速度剖面出现明显的层裂现象, 说明 P_2 处的外界面材料存在局部拉伸情况。图 8 比较了采用速度剖面代理模型计算的 P_1 和 P_2 的速度剖面与训练点上的数值模拟结果, 其中, 为清晰地展示速度剖面曲线上的波动特征, 图 8(b) 采用增量层叠的方式放置曲线。表 2 给出了速度剖面代理模型在训练点上的相对误差(为避免除零错误, 本文中所有速度剖面的相对误差均采用有效时间内的积分作为分母, 给出整条曲线的平均相对误差), 均小于 0.01%, 可见其精度极高。

以预测点上相关物理量的计算精度评估代理模型的预测能力, 图 9 给出了 h 分别为 0.5、1.5、2.5、3.2、4.7 mm 工况下采用速度剖面代理模型计算的 P_1 和 P_2 的速度剖面, 并与数值模拟结果进行比较。从图 9 可以看出, P_1 处, 代理模型预测的速度剖面与数值模拟结果吻合良好; P_2 处, 预测的层裂现象出现时刻与数值模拟结果存在差异, 说明代理模型对于材料破坏行为的预测能力还存在不足。表 3 给出了速度剖面代理模型在预测点上的相对误差, 可以看出, P_1 处(没有层断裂), 机器学习代理模型预测的速度剖面精度很高, 相对误差小于 0.1%; P_2 处(有层断裂), 代理模型预测的精度明显降低, 相对误差在 0.1%~1.0% 之间。根据式 (2), 给出 h 和 t , 瞬间就能给出 v , 一条上百个点速度曲线的计算机时不到 1 s。

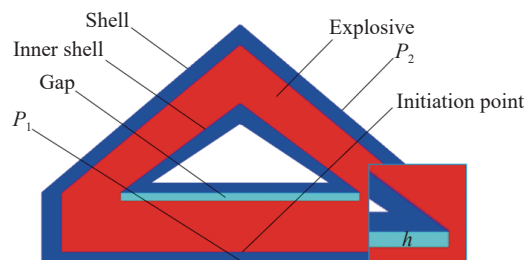


图 6 单因素影响的爆轰驱动模型

Fig. 6 Single-factor-influenced detonation drive model

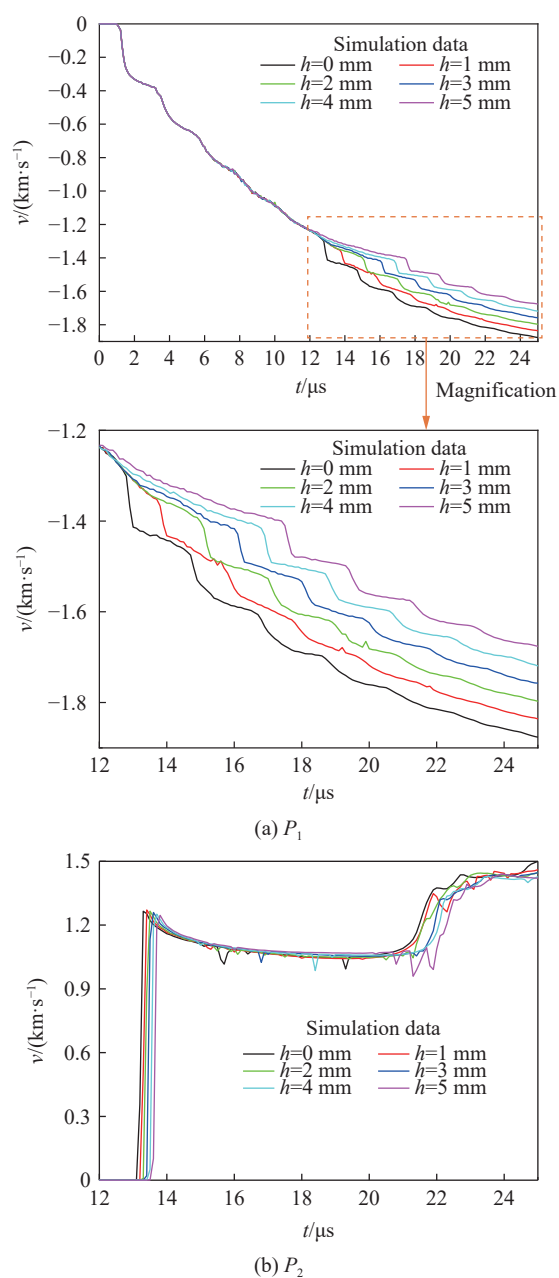
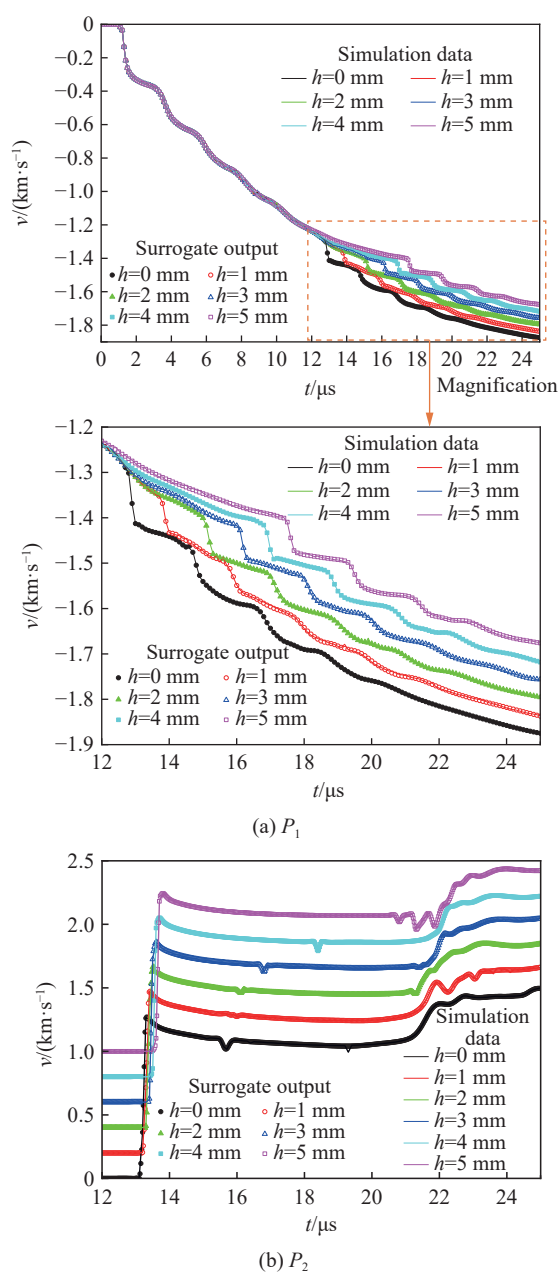
图 7 P_1 和 P_2 处模拟的速度剖面Fig. 7 Numerical simulated velocity profiles at P_1 and P_2 

图 8 训练点上速度代理模型和数值模拟的计算结果比较

Fig. 8 Results calculated by the speed surrogate model at the training points and the numerical simulation result

表 2 训练点上速度剖面代理模型计算的相对误差

Table 2 Relative errors of velocity surrogate model calculation at training points

h/mm	相对误差/%		h/mm	相对误差/%	
	P_1	P_2		P_1	P_2
0	0.0034	0.0040	3	0.0057	0.0014
1	0.0078	0.0094	4	0.0027	0.0094
2	0.0063	0.0036	5	0.0035	0.0067

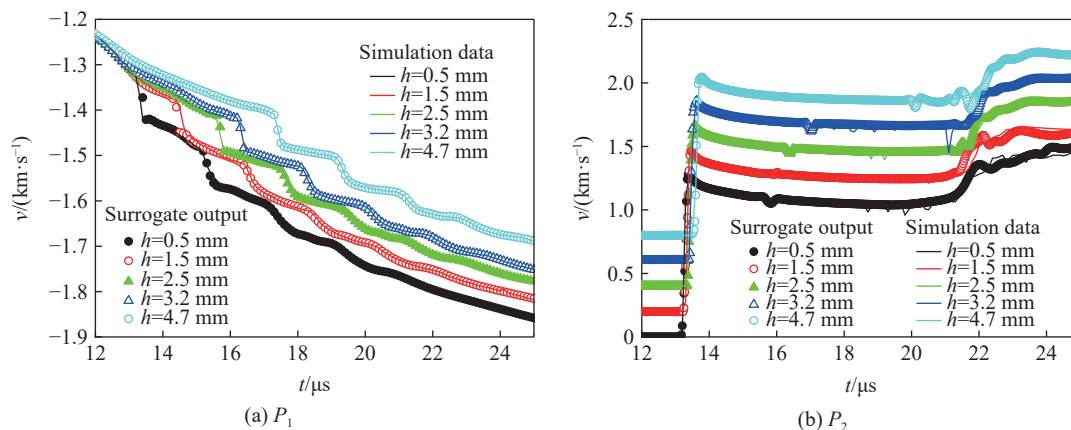


图 9 预测点上速度代理模型给出的计算结果及其与数值模拟结果的比较

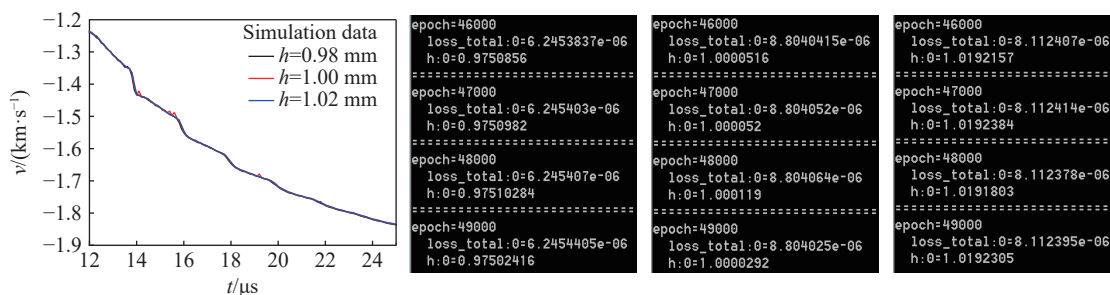
Fig. 9 Results calculated by the velocity surrogate model at the prediction points with their comparison with the numerical simulation results

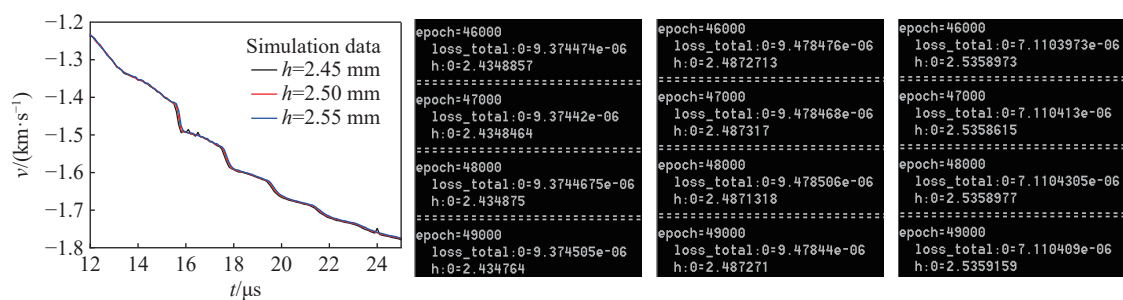
表 3 预测点上速度剖面代理模型计算的相对误差

Table 3 Relative errors calculated by velocity surrogate model at prediction points

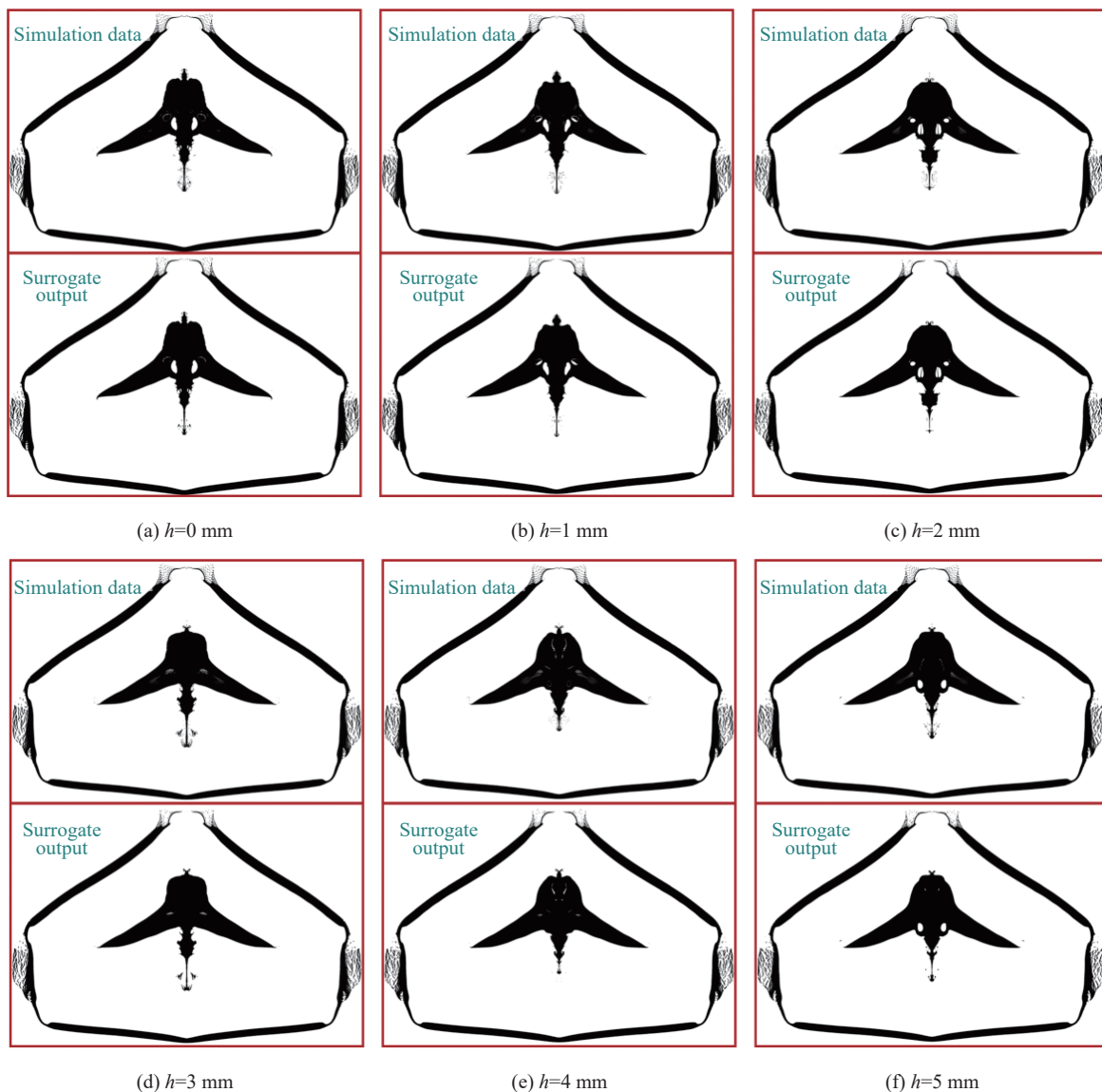
h/mm	相对误差/%	
	P_1	P_2
0.5	0.0571	0.6665
1.5	0.0524	0.8081
2.5	0.0034	0.4332
3.2	0.0116	0.1963
4.7	0.0129	0.1669

如果已知 P_1 和 P_2 的速度剖面, 可通过式 (3) 获得 h 。为了检验速度反函数代理模型对 h 的计算分辨能力, 在训练点 $h=1.00$ mm 和预测点 $h=2.50$ mm 附近 (偏离 $\pm 2\%$) 分别取 2 个点 $h=0.98$ mm、 $h=1.02$ mm 以及 $h=2.45$ mm、 $h=2.55$ mm, 即 h 取 0.98、1.00、1.02、2.45、2.50 和 2.55 mm, 数值模拟给出了 P_1 的速度剖面 (图 10) 作为输入, 采用训练好的速度反函数代理模型计算 h 。经过 5×10^4 个循环步后, 计算结果为: h 取 0.98、1.00 和 1.02 mm (训练点及附近) 时, 速度反函数代理模型计算的 h 分别为 0.975 02、1.000 03 和 1.019 23 mm, 相对误差分别为 0.510%、0.003% 和 0.075%; h 取 2.45、2.50 和 2.55 mm (预测点及附近) 时, 模型计算的 h 分别为 2.434 76、2.487 27 和 2.535 92 mm, 相对误差分别为 0.62%、0.51% 和 0.56%。可以看出, 速度反函数代理模型在训练点和预测点附近计算的 h 有很高的计算精度。根据式 (3), 给出速度剖面, h 优化迭代的计算机时约为 6 min。

(a) Simulated velocity profiles when $h=0.98, 1.00, 1.02$ mm

(b) Simulated velocity profiles when $h=2.45, 2.50, 2.55$ mm图 10 应用代理模型依据速度剖面反向求解 h 值Fig. 10 Applying the surrogate model to solve the h values according to velocity profiles

对于爆炸力学流场, 用于代理模型训练的输入数据为 h 、内外壳体材料的体积分数和 t , h 取 0、1、2、3、4、5 mm, t 取 0、1、2、3、 \dots 、25 μs , 共计 156 组数据。采用流场中材料动态时空分布代理模型, 深度神经网络的 d_h 和 w_h 分别取 16 和 50, 计算流场的体积分数。图 11 给出了 $t=25 \mu s$ 时代理模型计算的

图 11 $t=25 \mu s$ 时训练点上流场中材料动态时空分布代理模型计算的流场体积分数与数值模拟结果的比较Fig. 11 Comparison of material distribution surrogate model with numerical simulation results at training point at $t=25 \mu s$

材料的空间分布, 并与数值模拟结果进行对比。表 4 给出了流场中材料动态时空分布代理模型计算的流场体积分数与数值模拟结果的标准差以及相对误差(体积分数为 0~1 之间的无量纲数), 可以看出, 在训练点上标准差小于 6.4%, 相对误差小于 1%, 计算精度较高。图 12 为预测点(h 取 0.25、1.50、3.75、4.75 mm)上不同时刻流场中材料动态时空分布代理模型计算的流场体积分数, 并与数值模拟结果进行比较, 二者吻合较好。

表 4 $t=25\ \mu\text{s}$ 时训练点上流场中材料动态时空分布代理模型计算的标准差和相对误差

Table 4 Standard and relative errors calculated by the material distribution surrogate model at training points at $t=25\ \mu\text{s}$

h/mm	标准差	相对误差/%
0	5.99×10^{-2}	0.3953
1	5.81×10^{-2}	0.2721
2	5.95×10^{-2}	0.0955
3	6.15×10^{-2}	0.3082
4	6.30×10^{-2}	0.3415
5	6.39×10^{-2}	0.2211

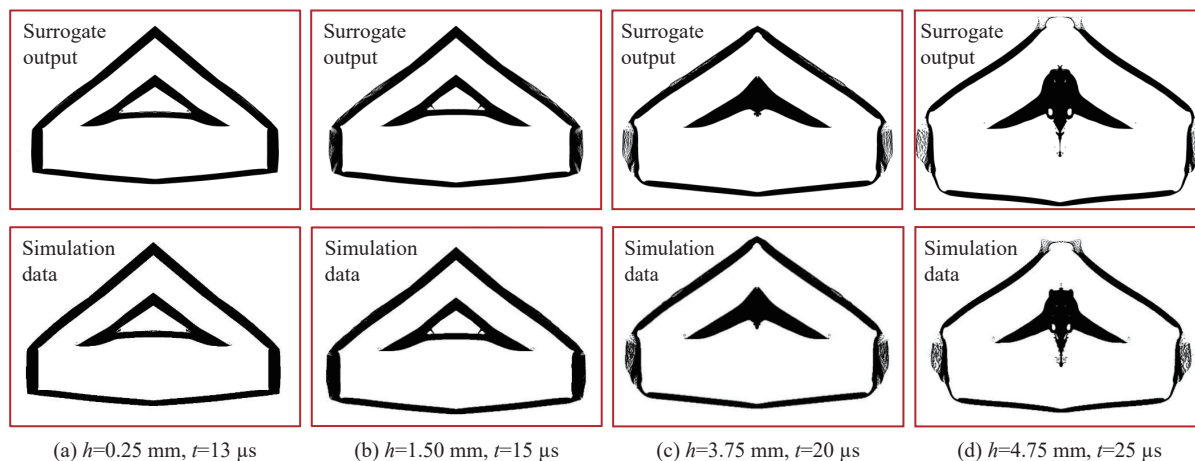


图 12 预测点上流场中材料动态时空分布代理模型计算的流场体积分数与数值模拟结果的比较

Fig. 12 Material distribution calculated by surrogate model at prediction points with comparison to simulation data

双因素影响的爆轰驱动模型如图 13 所示, 其中: c 为有机玻璃厚度, d 为有机玻璃与炸药之间的间隙厚度, c 取 0、1、2、3、4、5 mm, d 取 0、1、2 mm, 共计 18 组数据。深度神经网络中, 根据 $v = f(c, d, t)$, d_h 和 w_h 分别取 8 和 20, 获得速度, P_1 处的速度剖面如图 14 所示; 根据 $Z = G(c, d, c_x, c_y, t)$, d_h 和 w_h 分别取 16 和 50, 获得流场体积分数。图 15 给出了 $c=1\ \text{mm}$ 、 $d=1\ \text{mm}$ 、 $t=25\ \mu\text{s}$ 时代理模型计算的流场体积分数, 并与数值模拟结果进行比较, 二者符合良好。

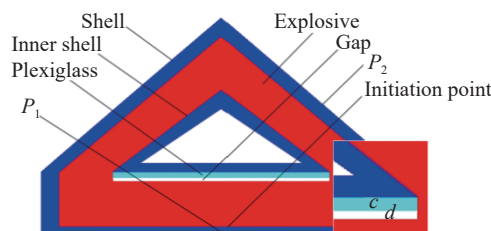
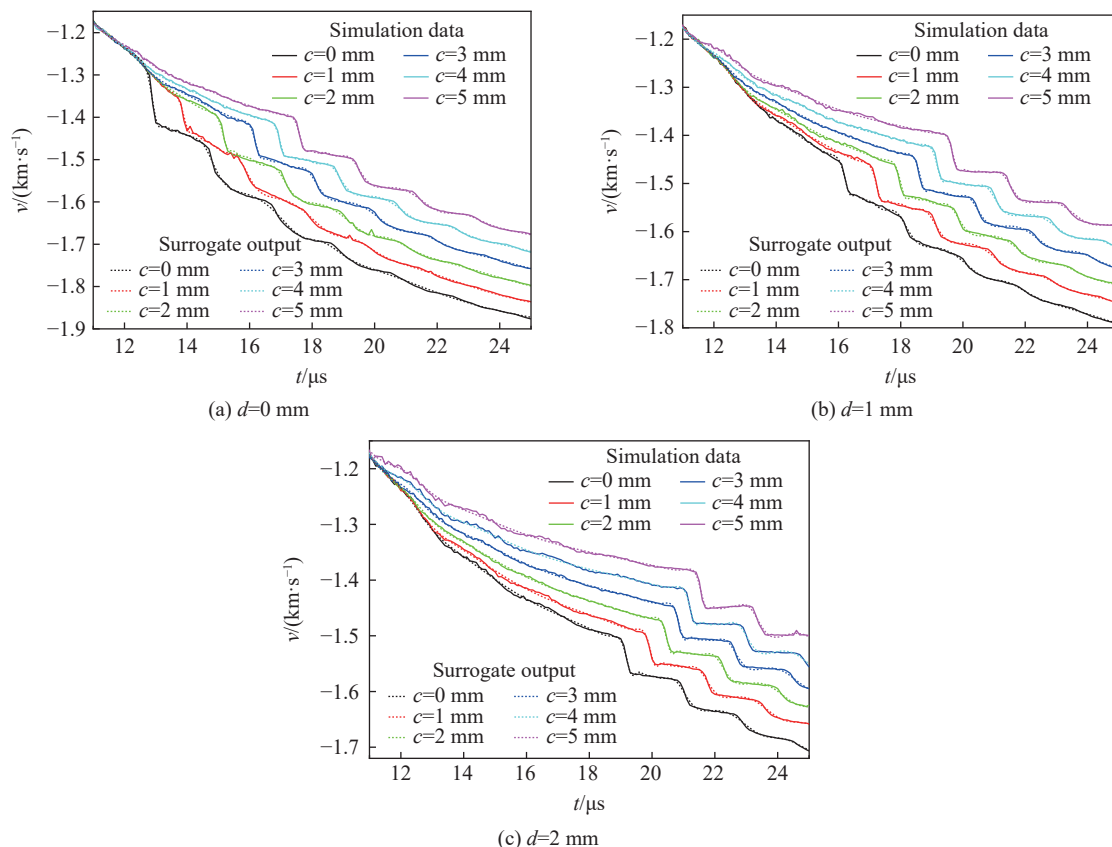
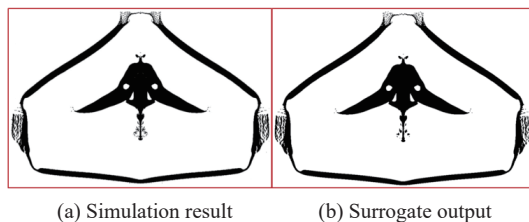


图 13 双因素影响的爆轰驱动模型

Fig. 13 Two-factor-influenced detonation drive model

图 14 代理模型计算的 P_1 处的速度剖面与数值模拟结果的比较Fig. 14 Numerical simulation and surrogate model calculation results of speed history at P_1 图 15 $c=1$ mm、 $d=1$ mm、 $t=25$ μ s 时代理模型计算的流场体积分数与数值模拟结果的比较Fig. 15 Numerical simulation of material distribution and calculation results of surrogate model at the point while $c=1$ mm, $d=1$ mm, $t=25$ μ s

3 结 论

应用人工智能机器学习技术,对深度神经网络优化算法进行了初步探索,以典型爆轰驱动问题为算例,构建了基于数值模拟数据的端到端代理模型,并给出了代理模型的计算精确度,验证了代理模型从速度剖面反演工程因素的能力。为验证深度学习代理模型的预测能力,基于一种单影响因素典型爆轰驱动模型,在数字模拟生成的数据上训练和测试了深度学习代理模型的预测误差和计算效率。测试表明:端到端代理模型具有较高的预测能力,相对误差均小于 1%,可用于高度非线性的爆轰驱动问题的快速设计、高精度预测和敏捷迭代,是深度学习技术和爆炸与冲击动力学融合的有效尝试。在另一种双影响因素典型爆轰驱动模型上所进行的测试中,深度学习代理模型依然能够与数值模拟数据符合良好,表明所提出的端到端深度学习代理模型可以在一定程度上推广到多影响因素爆轰驱动模型。考虑到多影响因素模型的复杂性,深度学习代理模型在不同场景中是否适用以及应该如何应用,将是进一步研究的重要问题。

感谢中国工程物理研究院流体物理研究所实验物理数值模拟创新研究中心原职工张恒第在计算程序实现上提供的帮助。

参考文献:

- [1] 杨凯, 吕文泉, 闫胜斌. 智能化时代的作战方式变革 [J]. 军事文摘, 2022(1): 7–11.
YANG K, LYU W Q, YAN S B. Reform of combat methods in the era of intelligence [J]. Military Digest, 2022(1): 7–11.
- [2] 中国国防科技信息中心. DARPA 成功完成“海上猎手”无人水面艇项目 [R/OL]. (2018-02-02)[2024-04-07]. https://www.sohu.com/a/220477417_313834.
China National Defense Science and Technology Information Center. DARPA successfully completed the Sea Hunter unmanned surface vehicle project [R/OL]. (2018-02-02)[2024-04-07]. https://www.sohu.com/a/220477417_313834.
- [3] DATTELBAUM A M. Materials dynamics: LA-UR-22-25248 [R]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2022.
- [4] SHALEV-SHWARTZ S, SHAMMAH S, SHASHUA A. Safe, multi-agent, reinforcement learning for autonomous driving [EB/OL]. arXiv: 1610.03295. (2016-11-11)[2024-04-10]. <https://arxiv.org/abs/1610.03295>. DOI: 10.48550/arXiv.1610.03295.
- [5] CHAR D S, SHAH N H, MAGNUS D. Implementing machine learning in health care—addressing ethical challenges [J]. *The New England Journal of Medicine*, 2018, 378(11): 981–983. DOI: 10.1056/NEJMp1714229.
- [6] LIN W Y, HU Y H, TSAI C F. Machine learning in financial crisis prediction: a survey [J]. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part C (Applications and Reviews)*, 2012, 42(4): 421–436. DOI: 10.1109/TSMCC.2011.2170420.
- [7] LIPSON H, POLLACK J B. Automatic design and manufacture of robotic lifeforms [J]. *Nature*, 2000, 406(6799): 974–978. DOI: 10.1038/35023115.
- [8] BERRAL J L, GOIRI Í, NOU R, et al. Towards energy-aware scheduling in data centers using machine learning [C]// *Proceedings of the 1st International Conference on Energy-Efficient Computing and Networking*. Passau: ACM, 2010: 215–224. DOI: [10.1145/1791314.1791349](https://doi.org/10.1145/1791314.1791349).
- [9] ENGEL A, VAN DEN BROECK C. Statistical mechanics of learning [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2001.
- [10] CARLEO G, TROYER M. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks [J]. *Science*, 2017, 355(6325): 602–606. DOI: 10.1126/science.aag2302.
- [11] SCHAFER N P, KIM B L, ZHENG W H, et al. Learning to fold proteins using energy landscape theory [J]. *Israel Journal of Chemistry*, 2014, 54(8/9): 1311–1337. DOI: 10.1002/ijch.201300145.
- [12] VANDERPLAS J, CONNOLLY A J, IVEZIĆ Ž, et al. Introduction to astroML: machine learning for astrophysics [C]// *Proceedings of 2012 Conference on Intelligent Data Understanding*. Boulder: IEEE, 2012: 47–54. DOI: [10.1109/CIDU.2012.6382200](https://doi.org/10.1109/CIDU.2012.6382200).
- [13] BLASCHKE D N, NGUYEN T, NITOL M, et al. Machine learning based approach to predict ductile damage model parameters for polycrystalline metals [J]. *Computational Materials Science*, 2023, 229: 112382. DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112382.
- [14] FERNÁNDEZ-GODINO M G, PANDA N, O'MALLEY D, et al. Accelerating high-strain continuum-scale brittle fracture simulations with machine learning [J]. *Computational Materials Science*, 2021, 186: 109959. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109959.
- [15] 杨寓翔, 李炜, 申建民, 等. 机器学习在相变中的应用 [J]. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2023, 53(9): 290011. DOI: [10.1360/SSPMA-2023-0130](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2023-0130).
YANG Y X, LI W, SHEN J M, et al. Machine learning applications in phase transitions [J]. *Scientia Sinica Physica, Mechanica & Astronomica*, 2023, 53(9): 290011. DOI: [10.1360/SSPMA-2023-0130](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2023-0130).
- [16] 刘泮宏. 基于机器学习的湍流建模应用研究 [D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2021. DOI: [10.27061/d.cnki.gghgdu.2021.001683](https://doi.org/10.27061/d.cnki.gghgdu.2021.001683).
LIU P H. Application of turbulence modeling based on machine learning [D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2021. DOI: [10.27061/d.cnki.gghgdu.2021.001683](https://doi.org/10.27061/d.cnki.gghgdu.2021.001683).
- [17] 刘永泽. 水下爆炸载荷下板架结构毁伤特性的机器学习方法及应用研究 [D]. 哈尔滨: 哈尔滨工程大学, 2022. DOI:

[10.27060/d.cnki.ghbcu.2022.001951](https://doi.org/10.27060/d.cnki.ghbcu.2022.001951).

LIU Y Z. Research on the machine learning method and its application in damage assessment of plate frame subjected to underwater explosion [D]. Harbin: Harbin Engineering University, 2022. DOI: [10.27060/d.cnki.ghbcu.2022.001951](https://doi.org/10.27060/d.cnki.ghbcu.2022.001951).

- [18] 张筱迪. 混凝土楼板火灾及冲击作用下力学性能数值仿真研究 [D]. 抚顺: 辽宁石油化工大学, 2021. DOI: [10.27023/d.cnki.gfssc.2021.000186](https://doi.org/10.27023/d.cnki.gfssc.2021.000186).

ZHANG X D. Numerical simulation study on mechanical properties of concrete floor under fire and impact [D]. Fushun: Liaoning Shihua University, 2021. DOI: [10.27023/d.cnki.gfssc.2021.000186](https://doi.org/10.27023/d.cnki.gfssc.2021.000186).

- [19] BROYDEN C G. The convergence of a class of double-rank minimization algorithms: 2. the new algorithm [J]. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 1970, 6(3): 222–231. DOI: [10.1093/imamat/6.3.222](https://doi.org/10.1093/imamat/6.3.222).

- [20] FLETCHER R. A new approach to variable metric algorithms [J]. *The Computer Journal*, 1970, 13(3): 317–322. DOI: [10.1093/comjnl/13.3.317](https://doi.org/10.1093/comjnl/13.3.317).

- [21] GOLDFARB D. A family of variable-metric methods derived by variational means [J]. *Mathematics of Computation*, 1970, 24(109): 23–26. DOI: [10.1090/S0025-5718-1970-0258249-6](https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1970-0258249-6).

- [22] SHANNO D F. Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization [J]. *Mathematics of Computation*, 1970, 24(111): 647–650. DOI: [10.2307/2004840](https://doi.org/10.2307/2004840).

- [23] KINGMA D P, BA L J. Adam: a method for stochastic optimization [C]//Proceedings of International Conference on Learning Representations. Ithaca: ICLR, 2015.

- [24] 宁建国, 王成, 马天宝. 爆炸与冲击动力学 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2010: 347–364.

NING J G, WANG C, MA T B. Explosion and shock dynamics [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2010: 347–364.

- [25] 童石磊. 多介质界面改进数值模拟方法研究 [D]. 绵阳: 中国工程物理研究院, 2016.

TONG S L. Numerical simulation method of multi-media interface [D]. Mianyang: China Academy of Engineering Physics, 2016.

(责任编辑 王影)