



多物理耦合非线性偏微分方程与数值解不确定度量化数学方法

王瑞利*, 江松

北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094

E-mail: wang_rui.li@iapcm.ac.cn, jiang@iapcm.ac.cn

收稿日期: 2014-06-25; 接受日期: 2015-02-09; * 通信作者

国家自然科学基金 (批准号: 11372051 和 11201035) 和中国工程物理研究院科学基金 (批准号: 2011B0202043) 资助项目

摘要 多物理耦合的非线性偏微分方程和数值解在众多实际工程领域扮演重要角色, 对其不确定度量化的数学方法已成为具有挑战性的难题. 本文结合爆轰流体力学多物理耦合的非线性偏微分方程和数值求解, 介绍多物理耦合数学建模与模拟中的不确定性及复杂工程建模与模拟不确定度量化常用数学方法的优缺点, 提出未来多物理耦合数学建模与模拟中不确定度量化所面临的一些未解决的重要问题及困难.

关键词 多物理耦合 非线性 偏微分方程 数值解 不确定度量化 数学方法

MSC (2010) 主题分类 65C50, 65C60, 68N30

1 问题概述

自然科学与工程技术中的各种运动发展过程与平衡现象各自遵守一定的规律. 这些规律的定量表述一般呈现为关于含有未知函数及其导数的微分方程^[1]. 在航空航天、军事国防和气候预报等国家重大工程领域, 在一定条件下设计装置的动作过程都是多物理强耦合的复杂物理演化过程, 例如, 爆炸就是高温高压多介质复杂流体、剧烈温度辐射输运和中子、光子、带电离子随时间、空间迅速变化的行为, 以及中子热核反应过程耦合的复杂多物理过程^[2]. 描述其多物理复杂过程的数学模型往往是复杂的非线性偏微分方程组与常微分方程耦合在一起的不确定性微分方程组. 例如, 爆轰流体力学物理数学模型, 涉及高温高压多介质复杂非定常流体力学方程组和多种形式的爆轰唯象模型, 以及材料物性的函数关系式^[3-5]耦合在一起非线性偏微分方程. 但由于现实世界的复杂性和人们认知的局限性, 数学模型的背后有许多误差和不确定因素, 如模型中各种不确定的参数、模型的初边值条件、同一物理过程多种模型形式等, 所以, 爆轰流体力学物理数学模型是双曲型的偏微分方程组与一阶常微分方程、复杂函数关系式耦合在一起非线性不确定性偏微分方程组.

由于描述多物理非线性偏微分方程的复杂性, 根本无法得到其解析解, 只能通过计算机进行数值求解^[6,7]. 数值求解首先涉及偏微分方程的时空离散, 即采用数值求解将连续方程变为非连续离散的方程, 其离散过程会带来不确定性^[8,9]. 其次是通过一些算法对其离散方程进行求解, 此过程涉及收敛性和稳定性等不确定性因素. 总之, 由于自然现象的复杂性和人们认知的缺陷, 无论是偏微分方程组本

身, 还是与之耦合的常微分方程、复杂函数关系及其数值求解过程中都含有未认知或随机的变量, 使得耦合的微分方程组中含有大量不确定性的因素. 要通过建模与模拟 (modeling and simulation, M&S) 这条途径认证或决策大型工程设计参数或系统的可靠性, 必须对其建模与模拟中的不确定度进行量化, 才能发展高可信度的数值模拟仿真软件. 不确定度量化 (uncertainty quantification, UQ) 的数学方法是评估 M&S 可信度的最佳途径, 在航空航天和国防安全等国家众多尖端领域, 已引起学术界和工程应用领域的高度重视.

2 多物理耦合非线性偏微分方程的数学模型

2.1 非线性双曲型偏微分方程 (非定常爆轰流体力学模型)

这里以爆轰流体力学为例, 炸药爆轰过程所使用的基本方程是非定常可压缩流体力学方程和化学反应动力学方程的耦合方程组,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} = 0 \quad (\text{质量方程}), \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} \vec{u} + \nabla P = 0 \quad (\text{动量方程}), \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot \rho E \vec{u} + \nabla \cdot P \vec{u} = 0 \quad (\text{能量方程}), \quad (2.3)$$

$$P = \begin{cases} P(\rho, e), & \text{非炸药,} \\ P(\rho, e, F), & \text{炸药} \end{cases} \quad (\text{状态方程}), \quad (2.4)$$

$$\frac{d\lambda}{dt} = P(\rho, e, \lambda) \quad (\text{炸药反应率}), \quad (2.5)$$

其中 $E = e + \frac{1}{2}u^2$, ρ 表示密度, u 表示速度, E, e 和 P 分别表示单位质量的总能量、内能和压力, λ 为化学反应份额 (燃烧函数), 这里采用炸药反应率的唯象模型.

2.2 一阶常微分方程 (炸药反应率唯象模型)

由于爆轰过程中化学反应过程复杂, 反应速度快, 反应过程与放能物质的特性、状态和放能引起的物质运动密切相关. 目前, 从理论上, 严格建立反应率方程是相当困难的, 只能采用唯象近似. 国内外研究了多种形式的唯象反应率模型, 这些唯象模型往往是一阶的常微分方程, 这里给出几种常用的唯象模型:

(1) Arrhenius 反应率模型. 其形式为

$$\frac{1}{w} \frac{dw}{dt} = ze^{(-E^*/R_g T)}, \quad (2.6)$$

其中 w 是未反应炸药的质量分数, z, E^* 和 R_g 是常数, T 是温度.

(2) Forest Fire 反应率模型. 其形式为

$$-\frac{1}{w} \frac{dw}{dt} = e^{(\sum_{i=0}^4 a_i P^i)}, \quad (2.7)$$

其中 w 是未反应炸药的质量分数, P 是压力, a_i 是常数, 由实验确定.

(3) Cochran 反应率模型. 其形式为

$$R = \frac{dF}{dt} = (1 - F)[w_1 P^n + w_2 PF], \quad (2.8)$$

其中 F 是反应产物的质量分数, P 是压力, w_1, w_2 和 n 是常数, 由实验来定.

(4) Lee 反应率模型. 其形式为

$$\frac{\partial F}{\partial t} = I(1 - F)^x \eta^\gamma + G(1 - F)^x F^y P^z, \quad (2.9)$$

其中 F 是已反应炸药的分率, $\eta = \frac{V_0}{V} - 1$, V_0 是炸药的初始比容, V 是受冲击但未反应的炸药比容, P 是压力, I, x, G, y, z 和 γ 均为常数.

(5) Wilkins 反应率模型. 将时间燃烧函数和 C-J 比容燃烧函数组合起来. $F = 0$ 为凝固炸药 (未反应) 区; $0 < F < 1$ 为反应区; $F = 1$ 为爆炸产物区. 其形式为

$$F = [\max\{F_1, F_2\}]^{n_b}, \quad (2.10)$$

其中 F_1 为 C-J 比容燃烧函数, F_2 为时间燃烧函数, n_b 是可调参数,

$$F_1 = \begin{cases} 0, & \text{凝固炸药区,} \\ \frac{V_0 - V}{V_0 - V_J}, & \text{过渡区,} \\ 1, & \text{爆炸产物区,} \end{cases} \quad (2.11)$$

$$F_2 = \begin{cases} 0, & t \leq t_b, \\ \frac{t - t_b}{\Delta L}, & t_b \leq t \leq t_b + \Delta L, \\ 1, & t \geq t_b + \Delta L, \end{cases} \quad (2.12)$$

这里 $V_J = \frac{\gamma V_0}{\gamma + 1}$ 是 C-J 比容; t_b 是爆轰波刚到达计算网格的时刻, 即起爆时间; t 是当前计算时刻; $\Delta L = r_b \frac{\Delta R}{D_J}$, ΔR 是网格宽度, D_J 是爆轰速度, r_b 是可调参数.

2.3 函数关系式 (物态方程唯象模型)

在炸药爆轰驱动装置中, 涉及炸药和非炸药 (一般为金属) 两类材料, 这些材料随着状态的变化, 其行为相当复杂. 目前, 大部分采用平衡态下系统的温度与状态参量之间的函数关系式描述, 即物态方程. 针对某种材料, 可能有多种形式的函数关系式描述, 这里给出炸药爆炸产物和金属采用的物态方程唯象模型.

(1) 炸药. 爆炸产物常采用 JWL (Jones-Wilkins-Lee) 形式的状态方程, 其形式为

$$P = A \left(1 - \frac{w}{R_1 V}\right) e^{-R_1 V} + B \left(1 - \frac{w}{R_2 V}\right) e^{-R_2 V} + \frac{wE}{V}, \quad (2.13)$$

其中 $V = \frac{v}{v_0}$, E 为比热容力学能, A, B, R_1, R_2 和 w 是可调参数, v 和 v_0 是比容. 或爆轰产物的状态方程采用理想气体: $P = (\gamma - 1)\rho e$, 用燃烧函数 F 把凝固炸药和爆轰产物的状态方程连接起来, 即用 $P = (\gamma - 1)\rho e F$.

在 JWL 状态方程中, 其可调参数 A, B, R_1, R_2 和 w 之间又有相关性. 由爆轰波阵面上的守恒关系和 C-J 条件, 可推出 A, B 和 C 与 R_1 和 R_2 相关性的线性方程组, 即给定一组 R_1 和 R_2 , 可以求出 A, B 和 C .

$$Ae^{-R_1V_j} + Be^{-R_2V_j} + CV_j^{-(\omega+1)} = P_j, \quad (2.14)$$

$$AR_1e^{-R_1V_j} + BR_2e^{-R_2V_j} + C(\omega+1)V_j^{-(\omega+2)} = \rho_0D^2, \quad (2.15)$$

$$\frac{A}{R_1}e^{-R_1V_j} + \frac{B}{R_2}e^{-R_2V_j} + \frac{C}{\omega}V_j^{-\omega} = \rho_0Q + \frac{1}{2}P_j(1 - V_j), \quad (2.16)$$

其中 $V_j = \frac{P_j}{\rho_0D^2}$, D 是爆速由实验确定, P_j 和 V_j 分别是炸药 C-J 状态下的爆压和比容, Q 是爆热, A, B 和 C 三个参数依赖于不确定性参数 R_1 和 R_2 .

(2) 金属. 金属材料可采用理想气体: $P = (\gamma - 1)\rho e$, 也可采用更接近实际的复杂函数关系式, 如 Grunneisen 形式的状态方程, 其形式为

$$P = P_H \left(1 - \frac{1}{2}\Gamma\mu \right) + \Gamma\rho(e - e_0), \quad \mu = \frac{\rho}{\rho_0} - 1, \quad (2.17)$$

$$P_H = \begin{cases} \frac{\rho_0 C_0^2 \mu (1 - \mu)}{[1 - (\lambda - 1)\mu]^2}, & \text{若 } \mu \geq 0, \\ \rho_0 C_0^2 \mu, & \text{若 } \mu < 0, \end{cases} \quad (2.18)$$

其中 ρ_0, e_0 和 C_0 分别为材料的物性参数, λ 和 Γ 为常数.

从爆轰流体力学数学模型可看出, 模型中涉及初边值条件、方程形式和参数等多种不确定性因素.

3 多物理耦合数学模型的数值求解方法

多物理耦合数学模型的数值求解方法, 一般涉及计算空间离散 (即网格)、方程时空离散和离散方程的求解算法.

3.1 非定常爆轰流体力学计算方法

爆轰波由冲击波和波后的化学反应区组成, 是一个非常强的冲击波. 对于强间断 (即冲击波) 的计算有两种方法^[10]. 一种是激波装配法, 将间断面看成是块块连续解的边界, 在连续解区域内用差分方法求解, 而在间断面上用 Rankine-Hugoniot 条件作为内边界条件. 另一种是激波捕捉法, 在差分格式中引入人为黏性将间断解光滑化. 激波捕捉法的思想和做法可归纳为三点: (1) 在动量方程和能量方程的压力项中加上人为黏性, 这就是流体运动中引进了某种人为耗散机制, 使得冲击波间断解变成一个在相当狭窄的过渡区域内急剧变化的, 但却是连续的解; (2) 要求所加的人为黏性项只起到使冲击波间断光滑化的作用, 而基本上不会影响冲击波过渡区域以外的连续解的计算结果, 可以近似地满足冲击波间断条件; (3) 冲击波过渡区的范围应限制在几个空间步长以内, 并且这个过渡区在计算过程中不会扩大, 而过渡区的速度应逼近真实的冲击波速度. von Neumann 和 Richtmyer 引入人为黏性 q , 他们在动量方程 (2.2) 和能量方程 (2.3) 中将压力 P 换成 $p = P + q$. 人为黏性 q 的经典形式为

$$q = q_{NR} + q_L, \quad (3.1)$$

其中 q_{NR} 为 von Neumann-Richtmyer 人为黏性 (二次黏性), q_L 为 Landshoff 人为黏性 (一次黏性或线性黏性).

(1) von Neumann-Richtmyer 人为黏性 (二次黏性):

$$q_{NR} = \begin{cases} l_{NR}^2 \rho \left(\frac{\dot{V}}{V}\right)^2, & \dot{V} < 0, \\ 0, & \dot{V} \geq 0, \end{cases} \quad (3.2)$$

其中 l_{NR} 为具长度量纲的量; $l_{NR}^2 = a_{NR}^2 A$, 这里 a_{NR} 是人为黏性系数 (含有认知不确定性); A 为计算网格面积.

(2) Landshoff 人为黏性 (一次黏性或线性黏性):

$$l_{NR} = \begin{cases} l_{NR} \rho c \frac{\dot{V}}{V}, & \dot{V} < 0, \\ 0, & \dot{V} \geq 0, \end{cases} \quad (3.3)$$

其中 l_{NR} 为具长度量纲的量; $l_L = a_L \sqrt{A}$, a_L 是 Landshoff 人为黏性系数 (含有认知不确定性); A 为计算网格面积; c 为当地声速.

3.2 方程时空离散 (离散方程)

对于爆轰流体力学数学模型, 常采用 Laplace 方法^[11]. 对 Laplace 方法来说, 重点是动量方程的离散, 这里以有限体积格式为例. 如图 1 节点 α , 把节点 α 周围网格的中心和过节点 α 的网格边的中点按逆时针方向连线得到有限控制体积 Ω_α , 称为节点 α 的控制体. 其中节点 α_k 为节点 α 的第 k 个邻域节点, 即点 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{m_\alpha}$ 是与节点 α 的共线的网格节点; 网格 i_k 为节点 α 的第 k 个邻域网格, 即点 $i_1, i_2, \dots, i_{m_\alpha}$ 是邻域网格的中心点; 节点 β_k 是以节点 α 和 α_k 为端点的线段中点, 即点 $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{m_\alpha}$ 是共线边的中点, 这里 m_α 为节点 α 邻域网格数, l_{i_k} 为网格 i_k 邻域节点数. 如图 1 节点 α 的速度沿虚回路积分求解公式为

$$u_\alpha^{n+1} = u_\alpha^{n-1} + \frac{\Delta t^n}{B_\alpha^n} \sum_{k=1}^{m_\alpha} \{ -[(p+q)_{\beta_{k-1}, i_k}^n (r_{i_k}^n - r_{\beta_k}^n) + (p+q)_{i_k, \beta_k}^n (r_{\beta_k}^n - r_{i_k}^n)] \}, \quad (3.4)$$

$$v_\alpha^{n+1} = v_\alpha^{n-1} + \frac{\Delta t^n}{B_\alpha^n} \sum_{k=1}^{m_\alpha} \{ +[(p+q)_{\beta_{k-1}, i_k}^n (x_{i_k}^n - x_{\beta_k}^n) + (p+q)_{i_k, \beta_k}^n (x_{\beta_k}^n - x_{i_k}^n)] \}, \quad (3.5)$$

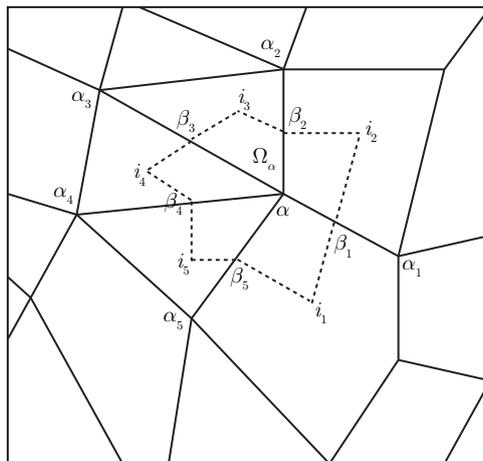


图 1 动量方程控制体积 Ω_α

其中

$$B_{\alpha}^n = \sum_{k=1}^{m_{\alpha}^n} \frac{\rho_{i_k}^n A_{i_k}^n}{l_{i_k}^n},$$

式中变量上标表示时间步, 下标为 Laplace 网格或节点编号, x 和 r 是 Laplace 网格中心或节点坐标, q 是人为黏性, Δt 为时间步长, A 为网格面积.

从爆轰流体力学数学模型的数值求解方法可以看出, 数值求解过程中涉及人工黏性系数 (参数) 取什么值最佳、计算空间网格划分尺度多大最合适、方程时空离散的项数等影响数值模拟结果的不确定性因素.

4 爆轰流体力学多物理耦合建模与模拟中的不确定性

不确定性按其性质一般分为偶然 (aleatory) 和认知 (epistemic) 两种类型的不确定性. 偶然不确定度通常与随机不确定性 (stochastic uncertainty)、变异 (variability) 和固有不确定性 (inherent uncertainty) 等相关. 从数学的表现形式和特征看, 偶然不确定度最普遍的量化方法是概率方法. 认知不确定性通常与可减小不确定性 (reducible uncertainty)、知识不确定性 (knowledge uncertainty) 和主观不确定性 (objective uncertainty) 等相关, 认知不确定性常用的量化方法包括概率方法和非概率方法. 多物理非线性偏微分方程及数值解的不确定性往往是偶然和认知不确定性耦合在一起的不确定性, 且大部分属认知不确定性.

从第 2 和 3 节描述爆轰流体力学多物理耦合的非线性偏微分方程及数值求解可以看出, 爆轰流体力学数学模型的不确定性大体包括模型输入参数的不确定性、唯象模型不同形式的不确定性、数学模型求解过程的不确定性、输入参数及唯象模型不确定性在求解过程中的传播和输出响应量的不确定性. 即使将第 2 和 3 节描述爆轰流体力学的数学模型当成确定性数学模型求解时, ρ, u, E, e 和 p 不仅是时间 t 和空间位置 (x, z) 的函数, 还是随机变量 ξ_i 的函数, 即 ρ, u, E, e 和 p 是 (x, z, ξ_i) 的函数. 表 1 罗列了第 2 节爆轰数学模型中输入参数不确定性、目前关心的重要因素和满足的概率密度分布.

表 1 爆轰数学模型中输入参数不确定性因素及分布

序号	不确定性因素	含义描述	概率密度分布
1	ρ_0	炸药初始密度	正态分布 $\rho_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$
2	$\sigma_{起爆阈值}$	体积起爆阈值. 当 $\sigma_{网格} \geq \sigma_{起爆阈值}$ 时, 炸药起爆	均匀分布. 一般炸药: $\sigma_{起爆阈值} \in [\sigma_a, \sigma_b]$
4	燃烧函数形式	燃烧函数几种情形: (1) 为 C-J 比容燃烧函数; (2) 为时间燃烧函数; (3) Wilkins 函数	将燃烧函数不同形式作为概率密度分布, 即考虑三种形式形成的分布
5	n_b	可调参数	均匀分布: $n_b \in [a_{n_b}, b_{n_b}]$
6	r_b	可调参数	均匀分布: $n_b \in [a_{r_b}, b_{r_b}]$
7	R_1	JWL 状态方程中的系数	均匀分布: $n_b \in [a_{R_1}, b_{R_1}]$
8	R_2	JWL 状态方程中的系数	均匀分布: $n_b \in [a_{R_2}, b_{R_2}]$
9	w	JWL 状态方程中的系数	均匀分布: $w \in [a_w, b_w]$
10	a_{NR}	N-R 人为黏性系数	均匀分布: $a_{NR} \in [a_{a_{NR}}, b_{a_{NR}}]$
11	a_L	Landshoff 人为黏性系数	均匀分布: $a_L \in [a_{a_L}, b_{a_L}]$

从表 1 可以看出, 在爆轰流体力学多物理耦合建模与模拟下, 输入参数的不确定性有各种类型, 其主要类型是偶然和认知不确定性耦合在一起的混合型不确定性. 其输入参数不确定性的概率密度函数或先验分布有均匀分布、正态分布、Weibull 分布和不同形式等多种类型, 加上这些输入参数在数学模型求解过程中的传播, 造成对输出响应量影响的不确定度量化是当前爆轰流体力学数学模型研究的热点问题.

5 多物理耦合数学模型的不确定度量化现状与发展

在多物理非线性偏微分方程及数值解中, 由于自然现象的复杂性和人们认知的缺陷, 建模与模拟中误差总是不可避免的. M&S 过程中由控制方程、唯象模型、物性参数和初边值条件等引起的建模误差, 计算区域网格划分、离散格式、边界条件的处理方法和计算过程中网格重整等引起的离散误差, 计算过程中使用的数值参数、舍入与迭代计算不完全等引起的计算误差, 这些误差就成为附加给 M&S 的多种不确定性, 或者说是 M&S 不确定性的由来, 导致 M&S 无法进行成功预测^[9, 12-15], 如何量化 M&S 中不确定性是科学与工程计算界普遍关注的问题. 然而, 对于很多复杂工程问题, 获得足够的确定性信息以量化 M&S 的不确定度, 往往显得非常困难或成本过高, 这便使得复杂工程 M&S 中不确定度量化数学方法成为极具挑战性的研究.

不确定度量化在工程设计中是一个历史悠久的课题, 已在水文、地理、预报、经济、自动控制和结构力学分析等领域发展了将近 30 多年 (参见文献 [16, 17]), 建立了很多不确定性分析方法, 如经典的敏感性分析方法、抽样方法、Bayes 理论和响应面方法等, 但对于多物理非线性偏微分方程及数值解的不确定度量化的数学方法比较少, 正处在发展阶段. 由于多物理非线性偏微分方程与数值求解中的不确定性不同于一般工程设计中的不确定性, 一般工程设计中的不确定性大部分属偶然不确定性. 而多物理非线性偏微分方程及数值解的不确定性往往是偶然和认知不确定性耦合在一起的不确定性, 要实现 M&S 不确定性的量化, 需要利用概率、测度论、泛函分析、微分方程、图形和网络理论、逼近论、遍历理论、随机过程、时间序列、经典推理、Bayes 分析、重要性抽样、非参数技术、稀有和极端事件分析、多元分析等各种数学和统计学研究. 从爆轰流体力学物理数学模型及数值解可以看出, 涉及初边值条件、材料特性、状态方程形式、反应率函数、几何和拓扑、参数和离散等多种不确定性因素. 目前常采用的量化方法是将其数学模型及数值求解中不确定性因素, 根据人们的经验预先给定一组值, 将其转换为确定性问题, 再通过数值求解, 得到输出响应量的一组样本, 然后采用灵感度分析方法、响应面方法和非嵌入多项式混沌方法等, 对其开展不确定度量化研究, 即将不确定性问题转化为确定性问题, 通过各种不确定度量化的数学方法对其进行不确定度量化. 近期, 在大尺度模拟的验证与确认^[18-21] (verification and validation, V&V) 和建模与模拟不确定度量化的领域, 取得了一些好的成果.

早在 20 世纪 90 年代美国针对流体和动力学模型, 在 UQ 领域产生了很重要的工作. 随后 2000 年初, UQ 研究得到高度重视与发展, 吸引了众多应用数学家的关注. 美国能源部 (DOE)、三大核武器实验室、航空航天学会 (AIAA) 和机械工程学会 (ASME) 都设立专项经费, 支持 UQ 方法的研究. 经过十余年的迅速发展, UQ 已成为应用数学研究的重要研究方向之一. 在学术界, 美国工业与应用数学学会 (SIAM) 从 2012 年开始每两年举办 UQ 年会, 前两届都有 500 余人参会. 2013 年, SIAM 和美国数理统计协会 (ASA) 创立联合期刊, 专门发表 UQ 领域的前沿研究成果. 美国科学院在《数学科学 2025》(参见文献 [22]) 将 UQ 列为重点方向. 在应用界, 美国国家核安全局, 对火星探测器再入系统进行了 UQ 研究. 通过 6000 次数值计算和敏感性分析, 将系统初始 417 个独立变量消减至不足 10 个核心参数, 并对每个核心参数进行了 UQ, 为系统性能优化和全系统试验节省了大量成本. 美国把 UQ 应

用到“库存重大问题 (SFI)”, 建模与模拟中的可调参数 (knobs) 大幅减少. 美国三大实验室为了 ASC (American Sensors Corp) 计划研发高可信度数值模拟软件, 近几年, 通过专款专项, 开展了大量 UQ 方法的研究, 研制了很好的分析软件, 如 PSUADE (LLNL)、DAKOTA (SNL) 和 GPMSA (LANL), 涉及大量 UQ 数学方法^[23-25]. 与此同时, 欧洲也非常重视 UQ 的研究. 俄罗斯在 UQ 方面也作了大量工作, 开展大量 UQ 数学方法研究.

与欧美相比, 中国关于 UQ 的研究相对滞后, 目前还没有形成良好的研究团队, 也没有相关的专门经费资助计划. 然而由于中国经济实力限制, 不能开展大量实验, 许多设计参数及装置的可靠性认证信息直接来源于 M&S 计算结果, M&S 计算结果的可信度成为理论设计和工程研制人员决策的重要依据. 中国对 UQ 方法的需求十分巨大, 更为迫切. 在计算流体力学 (CFD)、计算传热学和复杂系统设计等工程领域, 含有大量亟待需要解决的 UQ 的基础数学问题.

5.1 敏感性分析方法

敏感性分析^[26-29] (sensitivity analysis) 是一种定量描述模型输入变量对输出变量的重要性程度的方法, 敏感度分析的目的首先是确定哪些参数是重要参数, 对输出结果贡献较大; 其次是确定不同参数组合对模拟结果的影响, 以验证输入参数之间的相互作用; 第三是确定不敏感参数, 减少参数传播量化过程中的相关计算量及其不确定性. 敏感性分析方法是利用典型物理问题作为分析模型, 并结合已有的实验信息或模拟信息, 分析论证数值模拟计算结果中由于物理模型形式、参数和数值方法等引入的不确定性, 给出输入参数对输出模拟结果的影响程度. 具体做法是将复杂工程建模与模拟系统作为一个“黑盒子”, 在多种物理模型形式、参数空间和数值方法等组成的多维空间中, 抽取多种组合形式的输入参数, 作为“黑盒子”程序输入, 得到多组输出结果, 然后通过分析给出输入参数对输出模拟结果的影响程度.

根据是否考虑参数之间的相关性, 现有敏感性分析方法分为局部敏感性分析方法和全局敏感性分析方法. 局部敏感性分析方法操作便捷, 但它的缺点是忽略了变量间交互作用对输出的影响, 只考察单个变量对输出的影响. 全局敏感性分析考虑输入变量间共同作用对输出结果的影响, 更符合实际情形, 是一个研究趋势. 目前, 许多全局敏感性分析方法被广泛应用于输入参数的敏感性评估中, 如回归分析 (线性回归、非线性回归和半参/非参回归) 多元回归法、Latin hypercube-OAT (One-at-time) 方法、Morris-OAT 方法、基于方差分解理论的 Sobol 方法和统计检验 (直接计算参数样本的方差评估参数的方法). 目前, 敏感性分析中最主要的困难是大量计算耗费问题、输入变量之间相关性问题、非线性问题、输入变量之间对计算结果的交互作用, 以及多输出变量问题. 对于计算耗费问题, 随着计算机发展和数值算法的改进, 会得到较好的解决. 对于其他问题, 传统敏感性分析方法有一定的缺陷, 必须发展新的敏感性分析方法.

在复杂工程建模与模拟的敏感性分析中, 存在众多不确定性参数, 导致所谓的不确定性分析与量化的“维数灾难”. 参数灾难研究亟待解决的问题包括: 选用什么指标来衡量输入参数的敏感性的显著性; 如何确定哪些参数是敏感性因素, 哪些是不敏感性因素, 能否按敏感性系数对其进行排序; 如何寻找参数的敏感性区间 (参数可能在某些值处敏感, 在某些值处不敏感) 以构建可反映出单变量对输出的敏感性系数; 如何给出可反映多变量交互作用对输出的敏感性系数的敏感性分析方法等.

5.2 抽样方法

抽样方法^[30-34] (sampling method) 大多数不确定性量化方法几乎要通过采样建立各种不确定性

量化的样本. 抽样方法是在各参数取值可能满足区间或服从分布通过抽样, 然后建立计算所需要的参数组进行数值计算, 统计分析多次计算结果以获得概率分布函数, 对不确定性进行量化的一种方法. 抽样方法首先是建立或给定不确定性因素应满足的分布 (选择合理的变量概率分布函数是 UQ 分析计算需首先解决的问题). 常用方法有基于试验、理论、经验或猜想, 一般分布有均匀分布、Weibull 分布、正态分布和 Legendre 多项式等. 其中均匀分布和正态分布是最常见分布, 使用最广; 其次是针对确定的分布进行抽样. 常用抽样方法有 Monte Carlo 方法、重要性抽样、Latin 超立方方法、因子设计和 Sobol' 序列抽样等. 其中 Monte Carlo 方法是最传统的抽样方法, 它适用性广, 但是收敛速度较低. 为了达到指定的计算方差需要足够多的抽样样本, 导致计算量大. 对于有多参数或计算代价很大的模型, 这个弱点限制了 Monte Carlo 方法的应用. 因此, 如何提高 Monte Carlo 类方法的计算效率一直是重要的研究方向. 重要性抽样和 Latin 方抽样是提高抽样效率的重要抽样方法. 重要性抽样方法的思想是在重要区域集中抽样, 从而提高计算效率. 简单地讲, 为了计算 $h(x)f(x)$ 的积分, 传统的 Monte Carlo 方法是直接从分布 $f(x)$ 抽样. 有些 $h(x)f(x)$ 的函数值接近于零, 对积分的贡献不大, 但是在 Monte Carlo 抽样中可能占据了很大的比例, 浪费大量的计算资源. 重要性抽样方法则是要选取试验分布 $g(x)$ 尽量在形状上接近积分函数 $h(x)f(x)$, 然后从分布 $g(x)$ 抽样. Latin 方抽样方法是一种在分层抽样中使各层被抽到的单位的标志值均匀搭配的抽样方式. 该方法的主要优点是样本数随着参数的增加呈线性增长, 而不是指数增长. 例如, 有 M 维随机参数, 要抽取 N 个样本, 只需要每个参数抽 N 个即可, 总共需抽样 $M * N$ 次. Sobol' 序列抽样作为一种单元体内均匀分布的采样点生成技术, 其最大的特点是在初始样本点中允许增加采样点且同时保证后续样本的均匀性分布, 是一种拟随机序列方法. 在一些不确定性量化方法中, 概率密度分布范围内的样本点必须具有代表性, 数目也不能过少. 为了增加样本点的代表性, 使其在密度分布空间尽量均匀分布, 同时为了进一步减少样本点, 有时采用因子设计方法. 所谓因子设计方法, 就是在不考虑整齐可比性, 而完全保证样本点分布的均匀性情形下进行的一种抽样设计方法. 这些方法的优点在于实施简单, 只需随机抽样后在各抽样点上计算相应的确定性问题, 不足之处在于它的收敛速度比较缓慢. 目前, 抽样方法与其他一些不确定性量化技术结合已在不确定性量化中得到广泛使用, 但抽样方法的问题是如何选择合理的抽样参数维数、抽样参数的范围和对应的分布, 以及如何提高抽样方法的收敛速度仍是今后需进一步研究的问题.

5.3 响应面方法

响应面方法^[35-39] (response surface method) 可看作一种代理模型技术. 代理模型简单地是指在不降低精度的情形下构造一个计算量小、计算周期短, 但计算结果与高精度复杂模型的计算结果相近的数学模型, 并将其用于复杂模型的优化, 或通过对代理模型的大量计算分析复杂模型的不确定性. 建立代理模型首先要选用合适的抽样方法设计变量的样本点; 其次是结合这些样本点数据以及高精度复杂模型通过这些样本点获得模型的输出结果; 三是根据这些样本点数据和模型的结果输出数据, 构建出近似的模型来表述这种输入输出的函数响应关系; 最后对近似模型的不确定性进行评估和修改, 使得模型能够较好地代理原有复杂模型的输入输出响应关系. 代理模型又称为响应曲面模型 (response surface model). 响应面方法是代理模型技术不确定性量化的一种代表性方法, 它是应用数学方法和统计知识, 依据模型形式和试验设计的原理, 分析输入影响因子与输出响应之间的数学关系. 其基本思想是, 通过近似构造一个具有明确表达形式的多项式来表达隐式功能函数. 本质上来说, 响应面法是一套统计方法, 用它来寻找考虑了输入变量值的变异或不确定性之后的最佳响应值. 最早使用的响应面模型主要是低阶多项式的参数型拟合方法, 后来发展了高阶多项式参数型响应面方法. 随着问题越

来越复杂, 传统参数型响应面 (多项式形式响应面) 难以较好拟合或表示响应变量与影响因子之间的关系, 尤其难于处理高维 (> 10) 和非线性问题. 对高维、小样本和强非线性等复杂问题, 经过不断努力发展了很多非参数型的拟合方法, 如 Gauss 响应面方法、多元自适应回归样条方法 (MARS)、人工神经网络 (ANN) 和支持向量机 (SVM), 尤其是 Gauss 过程响应面还能够考虑响应面模型本身的不确定性, 因此, 在复杂工程建模与模拟 (M&S), 尤其是结构力学 M&S 的不确定性量化研究中受到广泛的关注. 响应面方法存在的问题是, 逼近的响应面是否是最佳逼近以及以什么速度收敛到最佳逼近, 这是具有挑战性的问题.

5.4 随机微分方程

随机微分方程是 20 世纪中叶发展起来的一个不确定性量化方法. 广义上的随机微分方程^[40, 41] (stochastic differential equations) 包括由随机过程驱动的微分系统和系数为随机量的微分方程, 狭义上的随机微分方程常常专指前者. 对于由随机过程驱动的微分系统, 方程的解一般是一个随机过程函数, 一般求解微分方程的方法不适用于求解随机微分方程. 然而, 有些复杂过程可以直接用随机过程建模, 模型的不确定性直接表现在模型本身上而不是输入参数的不确定性, 随机微分方程是一种研究不确定性量化的很好途径. 目前随机微分方程的分析及数值求解是应用数学界的热点和前沿方向, 特别是近三十年来随着随机微分方程越来越广泛地应用于系统科学、工程控制、生态学和复杂工程等各个方面, 使得随机微分方程的理论和应用有了迅速的发展, 内容十分丰富. 因此, 结合实际应用中的典型微分方程, 发展相应的随机微分方程模型及高效求解方法是当前和今后的重要研究方向. 系数为随机量的微分方程可以直接处理为随机参数的微分方程, 常见的分析方法是随机谱方法 (spectral method). 随机谱方法^[42-47] 是使用谱逼近随机微分方程或参量, 然后将其分解为独立的确定性分量和随机分量来量化不确定性. 其数学思想是把数学模型中的每个参量利用正交多项式 (如 Hermite 多项式) 展开成无穷级数项, 在实际应用中取有限项. 无穷级数第一项表示参量的平均值, 第二项表示 Gauss 随机波动, 第三项及高阶项表示非 Gauss 随机波动. 近几十年来, 随机谱方法在建模与模拟不确定性量化中得到了广泛应用. 常见的两类方法: KL 展开 (Karhunen-Loeve expansion, KLE) 和多项式混沌方法 (polynomial chaos, PC). 其中多项式混沌方法又分为嵌入式 (IPC) 和非嵌入式^[48, 49] (NIPC). 嵌入式多项式混沌法 (IPC) 是将数学模型中的每个参量进行正交多项式混沌展开, 然后利用 Galerkin 映射, 得到相应的随机控制方程, 即新的计算控制方程. IPC 无法利用已有程序, 需要对已有的数值求解程序进行大量修改或重新研制计算程序. 非嵌入多项式混沌法 (NIPC) 是把已有的数值求解程序作为一个黑匣子, 在随机空间 (不确定性参数分布) 里通过一定的抽样方法, 获得若干个样本点, 将各样本点输入确定性程序求解, 然后对确定性输出结果进行统计分析, 以获得相关数值求解结果的统计特征, 来评估输入参数或计算条件的不确定性在计算过程中传播的影响. NIPC 不需要对控制方程进行修改, 不需要重新编写程序. 无论是 KLE, 还是 PC 的随机谱方法, 其收敛效率比 Monte Carlo 方法高, 并且可以直接用于敏感性分析, 但其缺点是它的计算量随着随机参数的个数增长呈现指数增长. 因此, 该方法的随机变化的参数不能过多. 此外, 对于具有非连续或非光滑解的模型, 多项式混沌方法可能会不收敛. 因此, 随机谱方法的研究重点有几个方面: (1) 如何降低随机参数的维数; (2) 寻找更合适的数学方法解决非连续、非光滑的问题.

稀疏网格配置方法^[50, 51] (sparse grid collocation methods) 在一定程度上可以缓解随机参数的维数祸根问题 (curse of dimension), 在计算高维问题时能大大减少计算量. 由于高维参数空间中各个点的重要性是不同的, 如线性模型、光滑的函数区域, 只要少量的点就足以描述模型. 因此, 稀疏网格配置

方法的思想是在“不重要”的区域选取少量的点,“重要”的区域选取适量的点. 另一种降维的思想是“化整为零”,将原始问题分解成若干个小的子问题,分解之后再选择合适的方法(如多项式逼近方法)解决子问题. 这类方法包括多单元方法 (multi-element, ME) 和高维模型表示技术 (high dimensional model representation technique, HDMR). ME 方法将随机空间分解成若干小的子区域,然后在每个子区域上分别求解原来的方程. HDMR 方法是将高维问题分解成若干个低维问题. 通过推广确定性的降维模型,如特征正交分解方法 (proper orthogonal decomposition, POD) 和质心对偶法 (centroidal voronoi tessellation, CVT), 建立随机的降阶模型,可以达到降低计算的自由度,减少计算量的目的. 目前,随机谱方法已在一些工程领域的建模与模拟中得到应用,取得了良好的效果.

5.5 参数率定与优化方法

复杂工程建模与模拟中参数一般分为三类: (1) 具有明确物理意义的参数,可直接测量或用物理实验和物理关系推求; (2) 纯经验参数,可通过实测资料反求; (3) 具有一定物理意义的经验参数,可先按物理意义确定参数的取值范围,然后按实测资料确定其具体数值. 对于后两种参数,实际应用中需要通过参数率定和优化过程求解. 参数优化的数学问题^[52]可以看作是一个以时间和空间要素作为变量的函数过程. 参数优化是物理建模的反问题,求解方法分为直接法和间接法. 直接法是将参数作为因变量来直接求解,需要整个空间域和时间域的导数信息,所以应用较少且不适用于模型的非线性问题. 间接法是基于模型输出和观测值的接近程度的一个迭代寻优过程,通过构建一个模拟残差方程 (SRF),若 SRF 值低于某一设定值,或者处于可接受的范围内,则认为该参数是合理的、可接受的,否则调整参数重新评价.

参数优化是任何模型求解过程中都非常重要的一个环节,也是模型应用合理性的一个评断过程;通过参数优化使得模型的模拟输出值与实际观测值误差最小. 模型参数优化已成为参数调试、参数估计或参数率定的不确定性量化的重要方法. 目前,参数优化的主要问题是收敛区间、局部积小点、目标函数响应粗糙和响应曲面形状的问题.

6 多物理耦合数学模型的不确定度量化前景展望

21 世纪建模与模拟技术发展体现在两方面: (1) 一体化模拟技术; (2) 定量分析不确定性对计算结果的影响. 多物理非线性偏微分方程及数值解的建模与模拟的不确定现象分析与不确定度量化的数学方法及应用处于发展阶段,其许多数学理论和数学方法问题有待解决. 为进一步推动多物理非线性偏微分方程及数值解不确定度量化相关的数学理论与计算方法的发展,除了发展上述不确定度量化基本方法外,需更加关注以下数学方法的发展.

6.1 偶然与认知混合型不确定度量化数学方法

在科学与工程研究中,往往偶然和认知不确定性同时存在. 当系统中存在认知不确定性时,基于概率论与数理统计的不确定度量化方法,对模拟计算结果开展不确定性分析存在较大缺陷. 当系统的输入存在认知不确定性时,系统输出响应量的不确定度量化方法是一个非常具有挑战性的问题. 因此,必须深入研究认知不确定性、偶然和认知不确定性下的不确定度量化方法. 近年来,认知不确定性的不确定度量化方法已成为科学与工程领域研究的热点问题. 目前处理认知不确定性主要的理论和方法有区间分析、信息间隙模型、证据理论、模糊集理论和 Bayes 方法等. 这方面的研究成果引起了学术界

和工程界的极大关注. 特别是快速 Fourier 变换、自适应非线性近似、概率盒、双重迭代模型和 Bayes 方法等在少数领域得到应用. 但对于认知不确定性的不确定度量化方法研究仍比较欠缺, 各种方法只处于起步阶段, 要将应用于复杂系统不确定现象分析和量化, 仍有不少亟待解决的难点问题. 对于偶然和认知不确定性同时存在的复杂系统, 现有方法很难有效对其不确定度进行量化, 迫切需要发展能量化偶然和认知不确定性同时存在的复杂系统不确定度量化的新理论和新方法.

6.2 基于微分方程数值模拟确定性过程中的不确定性量化方法研究

基于微分方程建模与模拟的数值模拟, 是用数学物理公式或相关模型对复杂过程进行抽象和概化, 是研究和认识复杂系统各个环节的重要理论基础和技术手段. 虽然属于确定性方法, 但迫于客观需求, 不可避免地会进行一些简化处理, 因此, 在建模与模拟过程中, 必然存在着不确定性. 基于微分方程建模与模拟的数值模拟过程, 涉及输入和输出信息、物理模型 (方程形式、初边值条件、参数) 和计算方法 (网格、离散、计算过程、求解算法等). 随着计算机技术的发展, 高精度、高分辨率的计算方法及高性能的计算机带动了数值模拟的发展, 这对其复杂建模与模拟的不确定性研究也带来了新的挑战. 从物理、数学上去探讨、研究不确定性以及通过不确定性研究来改善建模与模拟精度成为当今国际科学研究的前沿课题.

根据不确定性的来源和不确定性传播过程, 微分方程确定性数值模拟的不确定性量化研究主要包括如下几个方面.

6.2.1 基于微分方程的建模方法研究

随着微分方程建模研究的不断深入, 考虑模型不确定性问题对模拟结果可信度的影响逐渐成为高可信度建模的重要研究内容, 会引起高度重视. 由于模型本身的复杂性, 高度非线性和多尺度等特征给模型不确定性研究带来许多挑战, 同时需要更多的新方法和新技术用于模型不确定性评价. 模型输入的不确定性, 输入数据的质量是影响模型不确定性的主要因素之一. 由于输入参数众多且各种参数性质不同, 成为影响模拟结果的一个不确定性因素. 针对高维引起的高度非线性和不确定性问题, 发展新技术量化模型在模拟时的输入, 降低初始条件的不确定性影响是当前的重要研究内容. 模型形式的不确定性是模拟的核心和关键. 由于物理方程具有高度复杂性和非线性, 使用简单的数学公式来描述内部规律, 存在许多假设和概化, 造成模型形式本身的不完善, 对模拟结果产生很大影响. 同时在耦合辅助模型过程中, 其耦合关系也存在很大的不确定性, 其中不同时空尺度转换问题成为模型耦合不确定性的主要因素之一. 模型形式的不确定性影响与其他方面的影响同样重要, 评价模型不确定性时不能忽略模型形式的不确定性影响. 怎样高逼真度建模, 需要依据不确定性分析, 科学合理的发展基于微分方程的建模方法.

6.2.2 针对微分方程模型的不确定性分析方法研究

对于模型输入的不确定性, 目前还没有一个完善的方法评价模型输入参数分布的敏感性, 因为没有足够的信息来描述各单元值频率分布的空间关系, 同时对于输入资料样本的时空插值的不确定性影响未能考虑, 且很多参数不能直接测量或者无法通过实验等手段获得. 对于模型形式的不确定性而言, 由于包含很多辅助模型, 各模型所表述的物理过程认识的不足以及在模型概念化过程中的影响, 及对各模型的耦合不确定性认识不足, 导致很难有一个很合适的方法量化评定各模型耦合过程中的不确定性影响, 对于典型物理过程机理描述的缺陷, 模型耦合的时空尺度转换问题是今后需要加强研究的重点. 对于模型参数方面, 因为存在模型参数众多, 且有些参数物理意义不明, 导致参数选取主观性太大,

从而影响模型整体的不确定性评价, 在众多的方法体系中, 还未形成一套可靠地优化方法可供推广, 同时由于参数响应面的多峰性与参数之间的相关性, 参数无法识别或可识别性很弱, 采用优化算法的结果往往只是局部最优, 难以寻求全局最优解. 对于模型初始条件和边界条件的不确定性问题目前研究甚少, 其不确定性影响在多数模型应用中未加以考虑, 然而对模型而言, 初始条件和边界条件在一定程度上决定着模型的预测结果, 其不确定性影响不容忽视.

6.2.3 微分方程模型的参数选取和优化方法研究

具体包括不确定性抽样设计、响应曲面分析、降维或参数筛选、敏感性分析和参数优化等. 其中抽样设计方法有 Monte Carlo 方法 (MC)、Latin 超立方抽样法 (LH)、正交表设计法 (orthogonal array, OA) 和因子设计等; 多变量自适应回归样条分析 (multivariate adaptive regression splines, MARS) 方法、人工神经网络、多元回归和 Gauss 过程等, 已有很好的研究成果. 但对于参数很多的模型, 选取过程将变得极为复杂, 同样也很耗时. 为此, 需要考虑参数之间的相互关联程度, 参数对模型输出的不确定性影响以及贡献程度, 利用敏感性分析识别模型输出响应的重要影响参数, 为后续的选取和优化提供条件. 通常敏感性分析包括局部敏感性分析和全局敏感性分析, 诸多研究表明全局敏感性分析方法比较适合多参数的水文模型研究. 全局分析过程通常考虑以下几种多参数方法包括 (1) 基于回归或相关分析技术的方法: 多元回归法和响应曲面方法; (2) 全局筛选法: LH-OAT 方法和 Morris 方法; (3) 基于方差理论的方法: Fourier 幅度敏感性检验法、Sobol 方法和扩展 Fourier 幅度敏感性检验法 (extend FAST).

6.2.4 不确定性传播 (模型形式) 方法应用研究

不确定性传播 (模型形式) 方法主要有 MC 方法和谱方法. MC 方法是一种统计抽样方法, 此方法需要大量的取样来达到统计上的收敛, 它的精度取决于样品数量的选择大小. 谱方法包括嵌入式多项式逼近法 (intrusive polynomial chaos, IPC) 和非嵌入多项式逼近法 (non-intrusive polynomial chaos, NIPC) 两种不确定度量化方法. IPC 方法无法利用现有程序, 需要对已有的数值求解程序进行大量修改或重新研制计算程序. 为了避免 IPC 的缺陷, NIPC 是把已有的数值求解程序作为一个黑匣子, 在随机空间 (不确定性参数分布) 里通过一定的抽样方法, 获得若干个样本点, 基于各样本点输入程序运行求解, 研究 M&S 中输入参数的不确定度在数值模拟中的演化, 然后对这些确定性结果进行统计分析, 也可以获得相关不确定性输入参数数值求解结果的统计特征, 以评估输入参数或计算条件的不确定性在计算过程中传播的影响. 嵌入式多项式逼近方法无法利用现有程序, 应用较多的是非嵌入式方法. 谱方法的研究重点有两个, 一个是如何降低随机参数的维数; 另一个就是寻找更合适的技术解决非连续、非光滑的问题.

6.3 多因素、多过程、多层级不确定度量化的基本方法研究

在纳米技术、燃烧模拟、惯性约束聚变、磁约束聚变、复杂电磁环境电子对抗、天体物理、新能源利用和空间物理等诸多领域的理论研究和工程设计中, 许多应用问题研究涉及多个复杂的物理过程, 而不是单个的物理过程. 特别是针对国家重大工程项目对应系统, 例如, 大飞机系统面临的气动特性预测不确定性和减阻降噪不确定性, 航空航天飞行器面临的界面不稳定、湍流、渗混、多相、空化、流固耦合等现象的复杂流动诸多不确定性等, 这些系统的建模与模拟的特点是多因素、多过程、多层级 (多系统), 模拟过程中的信息双向实时传递和相互反馈中存在各种不确定性因素, 直接影响模拟的精度, 如何减少模拟系统的不确定性成为当前高端领域研究的一个热门和前沿问题. 针对强非线性偏

微分方程及数值解的研究方面, 应重点发展描述强非线性多物理耦合的偏微分方程的不确定度量化数学方法和数值解的不确定性分析的数学方法, 突破非线性偏微分方程及数值解中不确定性量化的问题, 实现复杂工程高可信度的数值模拟.

目前不确定性研究体系还未形成, 如何量化模型输入、参数和模拟结果的不确定性以及各种来源对模型不确定性的影响程度? 如何发展不确定性量化理论体系和方法, 减少模拟不确定性? 以及如何建立可靠的不确定性评价平台或集成工具为模拟提供支持? 这些都是不确定性研究迫切需要解决的问题. 因此需要在现有不确定性分析方法的基础上, 集合各种方法的优点, 总结形成一套完整的不确定性量化理论体系和适合多因素、多过程、多层次耦合模型的不确定性量化方法, 有效地量化各种模型不确定性来源的影响程度, 从而提高模型不确定性研究的水平和数值模拟的精度.

6.3.1 非线性多方程强耦合数学模型的不确定性数学描述及不确定度量化数学方法

由于很多自然现象是多物理强耦合的复杂物理演化过程, 物理数学模型含有不同类型的方程, 例如, 爆轰流体力学数学模型是双曲型的偏微分方程组与一阶常微分方程和复杂函数关系式耦合在一起的多物理非线性偏微分方程, 对此类方程求解不仅涉及单类方程的不确定度, 而且涉及不同类方程之间的不确定性传递. 其次, 由于多物理非线性偏微分方程随时空的演变, 整个数学模型的不确定性出现在组件级、子系统级和全系统级等级别, 因此, 系统的不确定性是由不同级别不确定性耦合及由不同空间和时间尺度或相关性控制, 对其不确定度进行量化是一件非常具有挑战性的研究. 非线性多方程强耦合数学模型不确定性描述的数学方法及方程之间不确定性传递量化的数学方法的研究, 对多物理非线性偏微分方程的应用尤为重要.

6.3.2 非线性偏微分方程及数值解多因素的不确定性数学描述和不确定度量化数学方法

非线性偏微分方程的许多因素是未知的或不能确定的. 爆轰流体力学数学模型是双曲型的偏微分方程组与一阶常微分方程和复杂函数关系式耦合在一起的多物理非线性偏微分方程, 其中参数和方程形式等含有很多未确定的因素. 其次, 数值求解的条件或求解过程往往是不完美的, 含有较多近似或经验的因素. 爆轰流体力学数学模型求解是计算区域网格、方程时空离散和问题初边值条件施加的离散方程, 其中数值解与网格尺度大小和数值离散格式等有关系, 但对实际复杂问题模型时并不完全知道. 这种情形下, 要依据数值模拟结果作决策, 多因素(多参数、多过程和多层级等)不确定性适用的数学描述及量化的数学方法研究尤为重要. 多因素视作随机变量处理具有一定的合理性, 但不能适合参数变化的所有情形, 在不同情形参数可能取值的变化很难总满足随机分布的假定, 这就要求对多因素不确定性发展更为适用的数学描述和量化方法.

7 结论与建议

本文提及的不确定度量化的数学方法, 主要关注的是多物理耦合的非线性偏微分方程的物理建模与数值求解过程中的不确定度, 这是一个很具有挑战性的数学难题, 不仅因为其显著的多物理强耦合的非线性偏微分方程数学模型的复杂性, 还因为其数值求解方法中时空相关性和多因素的不确定性等, 这些特性的存在, 均显著增加了数值求解和不确定度量化的难度.

基于多物理耦合的非线性偏微分方程的建模与模拟不确定度量化涉及参数相关性、参数不确定性、模型形式不确定性、参数变异性和不确定度传播等, 对其不确定度进行量化是相当复杂的, 且非常具有挑战性的新领域. 需要结合多物理自身建模与模拟的特点, 发展建模与模拟的不确定度量化数学

方法, 自主研发建模与模拟的不确定现象分析和不确定度量化的软件, 这是不确定度量化数学方法尽快应用到国家重大工程, 产生创新成果的重要支撑.

多物理耦合的非线性偏微分方程与数值解的不确定性量化研究本质上是跨学科研究, 需要学科领域专家、数学家、统计学家和计算机科学家紧密协作, 强强联合, 组成跨学科研究团队, 共同发展建模与模拟的不确定性量化数学方法, 作出创新性成果.

参考文献

- 1 李大潜, 秦铁虎. 物理学与偏微分方程. 北京: 高等教育出版社, 1997
- 2 黄祖洽. 核反应动力学基础. 第二版. 北京: 北京大学出版社, 2007
- 3 孙锦山, 朱建士. 理论爆轰物理. 中国工程物理研究院科技丛书. 北京: 国防工业出版社, 1995
- 4 朱建士, 胡晓棉, 王裴, 等. 爆炸与冲击动力学若干问题研究进展. 力学进展, 2010, 40: 401-423
- 5 孙承纬. 关于爆炸力学发展方向的若干思考. 高能密度物理, 2007, 148: 139-142
- 6 秦元勋, 张锁春. 计算物理概论. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1988
- 7 陶文铨. 数值传热学. 第二版. 西安: 西安交通大学出版社, 2001
- 8 张涵信, 查俊. 关于 CFD 验证确认中的不确定度和真值估算. 空气动力学学报, 2010, 28: 39-45
- 9 王瑞利, 张树道. 复杂系统 M&S 中不确定度量化方法进展. 中国力学大会 2013 会议文集. 西安: 中国力学学会办公室, 2013
- 10 周毓麟, 李德元. 非定常流体力学数值方法的若干问题. 数学进展, 1981, 10: 48-56
- 11 王瑞利, 林忠, 温万治, 等. 多介质拉氏自适应流体力学软件 LAD2D 研制及其应用. 计算机辅助工程, 2014, 23: 1-7
- 12 Helton J. Conceptual and Computational Basis for the Quantification of Margins and Uncertainty. Sandia National Laboratories Report, 2009, SAND2009-3055
- 13 Riley M, Grandhi R. Quantification of modeling uncertainty in aeroelastic design. In: 51st AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference. Orlando: AIAA, 2010, 12-15
- 14 Karniadakis G, Glimm J. Preface: Uncertainty quantification in simulation science. J Comput Phys, 2006, 217: 1-4
- 15 Rilety M. Quantification of model-form, predictive, and parametric uncertainties in simulation-based design. PhD Thesis. Dayton: Wright State University, 2011
- 16 李群. 不确定性数学方法研究及其在经济管理中的应用. 博士学位论文. 大连: 大连理工大学, 2002
- 17 彭忠明, 王玉明. 基于试验数据的性能裕量及其不确定性量化方法. 信息与电子工程, 2010, 8: 682-686
- 18 Roache P. Verification of codes and calculations. AJAA, 1998, 36: 696-702
- 19 Oberkampf W, Roy C. Verification and validation in scientific computing. London: Cambridge University Press, 2010
- 20 邓小刚, 宗文刚, 张来平, 等. 计算流体力学中的验证与确认. 力学进展, 2007, 37: 279-288
- 21 王瑞利, 温万治. 复杂工程建模与模拟的验证与确认. 计算机辅助工程, 2014, 23: 61-68
- 22 美国科学院国家研究理事会. 2025 年的数学科学. 刘小平, 李泽霞译. 北京: 科学出版社, 2014
- 23 Eldred M, Giunta A, Brown S. DAKOTA, A Multilevel Parallel Object-Oriented Framework for Design Optimization, Parameter Estimation, Uncertainty Quantification and Sensitivity Analysis Version 4.0 Reference Manual. Sandia National Laboratories Report, 2006, SAND2006-4055
- 24 Lin G, Engel D W, Eslinger P W. Survey and Evaluation of Uncertainty Quantification Methodologies. Pacific Northwest National Laboratory, 2012, PNNL-20914
- 25 夏强, 万力, 王旭升, 等. UCODE 反演程序的原理及应用. 地学前缘, 2010, 17: 147-151
- 26 Haaker M, Verheijen P. Local and global sensitivity analysis for a reactor design with parameter uncertainty. Chem Eng Res Design, 2004, 82: 591-598
- 27 Xu C, George Z. Uncertainty and sensitivity analysis for models with correlated parameters. Reliab Eng Syst Safe, 2008, 93: 1563-1573
- 28 王纲胜, 夏军, 陈军锋. 模型多参数灵敏度与不确定性分析. 地理研究, 2010, 29: 263-270
- 29 韩林山, 李向阳, 严大考. 浅析灵敏度分析的几种数学方法. 中国水运, 2008, 8: 177-178
- 30 吴丹清, 吕震宙, 郝文锐. 变量相关情况下方差贡献的参数影响分析. 工程力学, 2014, 31: 238-243
- 31 张峰, 吕震宙. 可靠性灵敏度分析的自适应重要抽样法. 工程力学, 2008, 25: 80-84
- 32 陈磊, 吕震宙, 宋述芳. 模糊可靠性灵敏度分析的线抽样方法. 工程力学, 2008, 25: 45-51
- 33 陈建华, 吴文传, 张伯明, 等. 电力系统动态仿真中模型参数不确定性的定量分析. 电网技术, 2010, 34: 18-23
- 34 Rohmer J, Foerster E. Global sensitivity analysis of large-scale numerical landslide models based on Gaussian-process

- metamodeling. *Comput Geosci*, 2011, 37: 917–927
- 35 刘信恩, 肖世富, 莫军. 高斯过程响应面法研究. *应用力学学报*, 2010, 27: 190–196
 - 36 梁忠民, 戴荣, 李彬权. 基于贝叶斯理论的水文不确定性分析研究进展. *水科学进展*, 2010, 21: 274–281
 - 37 万华平, 任伟新, 魏锦辉. 基于高斯过程响应面的结构有限元模型修正方法. *振动与冲击*, 2012, 31: 82–87
 - 38 隋允康, 宇慧平. 响应面方法的改进及其对工程优化的应用. 北京: 科学出版社, 2011
 - 39 傅大宝, 叶肖伟, 倪一清, 等. 基于遗传算法和有限混合分布的应力谱多模态建模. *工程力学*, 2014, 31: 172–179
 - 40 刘小清, 吴声昌. 随机微分方程计算方法及其应用. *计算物理*, 2002, 19: 1–7
 - 41 彭实戈. 倒向随机微分方程及其应用. *数学进展*, 1997, 26: 97–112
 - 42 Xiu D, Karniadakis G. The Wiener-Askey polynomial chaos for stochastic differential equations. *SIAM J Sci Comput*, 2002, 24: 619–644
 - 43 刘全, 王瑞利, 林忠, 等. 爆轰计算 JWL 状态方程参数不确定度研究. *爆炸与冲击*, 2013, 33: 647–654
 - 44 张稳. 若干微分方程最优控制问题的谱方法. 博士学位论文. 上海: 上海大学, 2009
 - 45 王晓东, 康顺. 多项式混沌方法在随机方腔流动模拟中的应用. *中国科学: 技术科学*, 2011, 41: 790–798
 - 46 Cohen A, Davenport M, Leviatan D. On the stability and accuracy of Least Squares approximations. *Found Comput Math*, 2013, 13: 819–834
 - 47 Xu Z, Zhou T. On sparse interpolation and the design of deterministic interpolation points. *SIAM J Sci Comput*, in press, 2014
 - 48 Narayan A, Xiu D. Stochastic collocation methods on unstructured grids in high dimensions via interpolation. *SIAM J Sci Comput*, 2012, 34: 1729–1752
 - 49 Narayan A, Xiu D. Constructing nested nodal sets for multivariate polynomial interpolation. *SIAM J Sci Comput*, 2013, 35: 2293–2315
 - 50 Narayan A, Gittelson C, Xiu D. A stochastic collocation algorithm with multifidelity models. *SIAM J Sci Comput*, 2014, 36: 495–521
 - 51 Song X, Zhan C, Kong F, et al. Advances in the study of uncertainty quantification of large-scale hydrological modeling system. *J Geogr Sci*, 2011, 21: 801–819
 - 52 梁忠民, 李彬权, 余钟波, 等. 基于贝叶斯理论的 TOPMODEL 参数不确定性分析. *河海大学学报*, 2009, 37: 129–132

Mathematical methods for uncertainty quantification in nonlinear multi-physics systems and their numerical simulations

WANG RuiLi & JIANG Song

Abstract Nonlinear multi-physics systems and their numerical simulations play an important role in many practical engineering fields, and the development of reliable mathematical methods for uncertainty quantification of such multi-physics systems is still facing great challenges. In this paper, taking the multi-physics models from detonation mechanics and their numerical solution, we briefly introduce recently developed mathematical methods for uncertainty quantification in both complex multi-physics engineering modeling and associated numerical simulation. Also, the strengths and weaknesses of the methods will be discussed, and open problems as well as mathematical challenges will be underlined.

Keywords multi-physics, nonlinearity, partial differential equations, numerical solution, uncertainty quantification, mathematical methods

MSC(2010) 65C50, 65C60, 68N30

doi: 10.1360/N012014-00115