

文章编号: 1001-2486(2007)06-0014-05

战斗部虚拟试验贝叶斯线性校准预测方法*

江振宇, 张为华

(国防科技大学 航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073)

摘要: 聚能装药战斗部射流虚拟试验中, 射流穿透对靶板材料模型参数较敏感。为建立较准确实用的射流穿透预测模型, 提出一种贝叶斯线性校准方法, 建立物理过程真实值、模型预测值和试验测量值间的统计关系, 结合有限的试验数据, 校准未知模型参数。实例分析表明, 该方法可较好地解决包含各种不确定性的复杂计算模型的参数校准问题。

关键词: 校准; 预测; 不确定性; 贝叶斯; 战斗部

中图分类号: TP391.9; O385 **文献标识码:** A

Bayesian Linear Calibrated Prediction Approach in Warhead Virtual Experiment

JIANG Zhen-yu, ZHANG Wei-hua

(College of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: The shaped charge penetration performance is sensitive to material model parameters of armor plate in virtual experiment. A Bayesian linear calibrated approach was proposed to obtain precise prediction of penetration limit. Statistical relationship between the physical process, the computer model output and experiment observations was formulated, combined with calibration experiment observations, to estimate the unknown model parameter. Analysis of an example demonstrates that the proposed approach is efficient in large calibration problem involving various uncertainties.

Key words: calibration; prediction; uncertainty; Bayesian; warhead

战斗部在设计和验收过程中要进行大量试验, 然而靶场试验面临许多困难: (1) 用弹量大, 试验成本高和周期长; (2) 试验过程伴随着较大的破坏性和不安全性, 许多中间过程参数无法测试; (2) 试验中存在的不确定性使得同一试验无法重复等。因此, 以数值计算模型为求解手段的虚拟试验逐渐成为弹药试验的主要方式之一, 它能完成理论分析和试验都不易完成的任务, 如检验本构方程的正确性等^[1-4], 而少量靶场试验则用于对计算模型进行验证, 对模型参数进行校准。

聚能装药战斗部虚拟试验中, 靶板材料本构模型参数对计算结果影响较大。对于塑性随动硬化模型, 针对不同材料应变率, 其失效应变 F_c 可由材料动态实验测试得到, 但在金属射流对靶板的作用过程中, 由于射流速度超过 7000m/s, 此时在碰击点周围的材料表现出高温、高压以及高塑性应变, 普通实验方法无法对 F_c 进行准确测定。为建立较准确实用的计算预测模型, 必须对模型参数进行校准。数值计算模型校准中存在多种不确定性, 主要包括数值模型不确定性、输入参数不确定性和试验测量不确定性。贝叶斯方法解决这类包含不确定性的问题有优势^[6-9]: (1) 可量化虚拟试验中多种来源的不确定性; (2) 利用专家知识和数值模型计算结果作为预测的先验, 经试验数据校准、更新, 得到物理过程的后验预测分布; (3) 可有效利用昂贵有限的试验数据。本文结合聚能装药战斗部数值计算, 提出一种贝叶斯线性校准方法, 解决包含不确定性的复杂计算模型参数校准问题。

* 收稿日期: 2007-04-15

基金项目: 国防科工委基础科研资助项目 (B0920060321)

作者简介: 江振宇 (1978—), 男, 博士生。

1 数值计算模型校准

1.1 模型校准概念

校准定义为调整计算模型中数值或物理建模参数,以提高计算模型结果与试验数据一致程度的过程^[4]。虚拟试验中,这类建模参数主要是指试验对象数学建模参数,如战斗部和靶板有限元模型网格参数、初始及边界条件参数、算法和材料模型参数等;试验数据包括类似应用条件下的历史数据或专门设计的校准试验数据。

计算模型校准过程中存在各种不确定性。将计算模型不确定输入参数分为两类,一类为对应试验中可测量的随机输入变量,称为输入参数 \mathbf{x} ;另一类为固定但未知的参数,对应试验中难以测量或不可测量的量,在计算模型中视为随机变量,通过试验校准,称为校准参数 u 。任何计算模型都只是物理过程带偏差的近似,设此偏差为 δ ,称为模型不确定性。试验中不可避免地会存在各种测量误差,记为 e 。物理过程、模型预测以及试验测量间的关系为:

$$z = f + e = y^M(\mathbf{x}, u) + \delta_x + e \quad (1)$$

其中, f 为物理过程真实值, $y^M(\mathbf{x}, u)$ 为对应计算模型预测值, δ_x 为模型偏差, z 为试验测量值, e 为测量误差,通常为方差已知或未知的零均值随机变量。

1.2 预测模型

设战斗部及靶板有限元计算模型为 $\eta(\mathbf{x})$,采用贝叶斯方法和试验设计^[1-3]建立其预测模型。设先验均值函数为 $m_0(\mathbf{x}) = E\{\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x})\} = \mathbf{h}(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\beta}$ 和协方差函数为 $v_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \text{Cov}\{\eta(\mathbf{x}), \eta(\mathbf{x}') | \sigma^2\} = \sigma^2 R(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 的高斯过程为其先验。其中, $\mathbf{h}(\mathbf{x})$ 为 q 维回归函数矢量; $\boldsymbol{\beta}$ 为系数矢量; $R(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 为相关函数;取 $p(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2) \propto \sigma^{-2}$ 。

采用极大熵试验设计方法产生一系列输入观测点 $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$,设在观测点运行计算模型得到数据 \mathbf{y} 。已知 $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x})$ 的先验分布为 $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}) \sim N(m_0(\mathbf{x}), v_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}'))$,消去超参数 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ^2 后计算模型输出的后验分布为

$$\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}) \sim t_{n-q}(m^*(\mathbf{x}), \sigma\{R^*(\mathbf{x}, \mathbf{x})\}^{1/2}) \quad (2)$$

式(2)是自由度为 $n - q$ 的 t 分布,其后验分布均值函数 $m^*(\mathbf{x})$ 不包含任何有关 $\eta(\mathbf{x})$ 的量,作为计算模型的预测模型,其中,

$$\begin{cases} m^*(\mathbf{x}) = \mathbf{h}(\mathbf{x})^T \hat{\boldsymbol{\beta}} + t(\mathbf{x})^T \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{H}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \\ R^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = R(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - t(\mathbf{x})^T \mathbf{A}^{-1} t(\mathbf{x}') + [\mathbf{h}(\mathbf{x})^T - t(\mathbf{x})^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{H}][(\mathbf{H}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{H})^{-1} \\ \quad [\mathbf{h}(\mathbf{x}')^T - t(\mathbf{x}')^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{H}]^T \\ \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{H}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{y}, \quad \sigma^2 = \mathbf{y}[\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{H}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{A}^{-1}] \mathbf{y} / (n - q) \end{cases} \quad (3)$$

\mathbf{A} 为训练点间相关函数矩阵, $t(\mathbf{x})$ 为预测点与训练点间相关函数矢量, $\mathbf{H}(\mathbf{x})$ 为回归函数矩阵。

1.3 校准预测模型

为建立计算预测模型与物理过程真实输出间的关系,设存在未知最佳输入 u^* ,记 $f^* = m^*(\mathbf{x}, u^*)$ 满足

$$f^* = m^*(\mathbf{x}, u^*) = f - \delta_x \quad (4)$$

其中, δ_x 与式(1)中的定义相同,则 f^* 的均值与方差分别为:

$$E(f^*) = E[m^*(\mathbf{x}, u^*)] \quad (5)$$

$$\text{Var}(f^*) = E[\sigma^2 R^*(\mathbf{x}, u^*), (\mathbf{x}, u^*)] + \text{Var}[m^*(\mathbf{x}, u^*)] \quad (6)$$

因此,计算模型、物理过程真实值与试验测量值间的关系如图1所示。模型校准预测的最终目的是用计算模型和试验观测获得对物理过程真实输出 f 的信息。 $\boldsymbol{\eta}$ 、 u^* 、 δ_x 和 e 已被明确定义,但其值不确定,通过指定概率分布解释其不确定性,得到其联合分布 $P(\boldsymbol{\eta}, u^*, \delta_x, e)$,计算模型输出 $\mathbf{y}; (\mathbf{x}_1, u_1), (\mathbf{x}_2, u_2), \dots, (\mathbf{x}_n, u_n)$ 和试验观测 z 已知,则 $\boldsymbol{\eta}$ 、 δ_x 和 e 可视为多余参数,对其积分,可推导出 (u^*, f) 的

分布。利用试验观测 z 来减少真实输入 u^* 中的不确定性,并预测未试验区物理过程真实输出 f 的过程称为校准预测,即求得条件分布 $P(u^*, f | z, y; (x_1, u_1), (x_2, u_2), \dots, (x_n, u_n))$ 。其中,利用试验观测 z 来减少 u^* 不确定性的过程称为校准,即计算条件分布 $P(u^* | z, y; (x_1, u_1), (x_2, u_2), \dots, (x_n, u_n))$;减少 f 不确定性的过程称为预测,即计算条件分布 $P(f | z, y; (x_1, u_1), (x_2, u_2), \dots, (x_n, u_n))$ 。

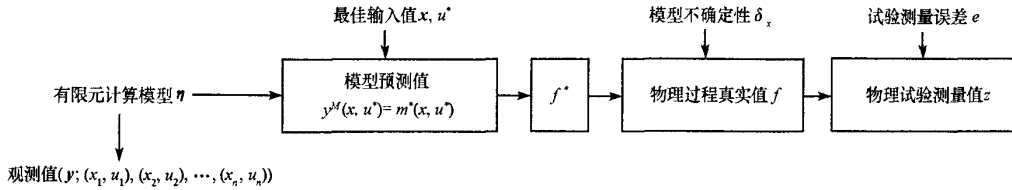


图1 校准预测贝叶斯图形模型
Fig.1 Bayesian calibrated prediction model

2 贝叶斯线性方法

贝叶斯线性方法^[10] 可视为全贝叶斯方法的近似,其先验信息的主要表达方法不是概率,而是期望值。全贝叶斯方法为不确定量指定联合概率分布描述其先验,然而为高维参数指定联合概率分布非常困难,它需要对大量参数有较详细较准确的先验信息,而且对大型问题,全贝叶斯分析计算量巨大。线性贝叶斯方法可避免上述先验指定和计算问题。

设参数空间有某随机变量 $X = (X_1, X_2, \dots)$,为其指定先验均值 $E(X_i)$ 、先验方差 $Var(X_i)$ 和先验协方差 $Cov(X_i, X_j)$ 。观测到数据 $D = \{D_1, D_2, \dots, D_k\}$,给定数据 D 后, X 的先验期望值改变为调整期望 $E_D(X)$,定义为线性组合:

$$E_D(X) = h_D^T D = \sum_{i=0}^k h_i D_i \tag{7}$$

满足 $\min \{E(X - \sum_{i=0}^k h_i D_i)^2\}$ 。其中, $h = (h_1, h_2, \dots, h_k)$, $D_0 = 1$ 。如果 $Var(D)$ 满秩,则

$$E_D(X) = E(X) + Cov(X, D)[Var(D)]^{-1}[D - E(D)] \tag{8}$$

同理, X 的调整方差为

$$Var_D(X) = Var(X) - Cov(X, D)[Var(D)]^{-1}Cov(D, X) \tag{9}$$

其中, $RVar_D(X) = Var(E_D(X)) = Cov(X, D)[Var(D)]^{-1}Cov(D, X)$ 为数据 D 分解的方差。

获得观测量和调整量后,应诊断先验指定过程的合理性,判断是否应该重新检查先验指定和数据观测过程。对某单个随机变量 X ,设为其指定先验期望和方差分别为 $E(X)$ 和 $Var(X)$,获得观测数据 $D = (d_1, d_2, \dots, d_k)$,计算随机量 $E_D(X)$ 的值为 $E_d(X)$,定义标准化调整量:

$$S_d(X) = S(E_d(X)) = \frac{E_d(X) - E(X)}{\sqrt{RVar_D(X)}} \tag{10}$$

$S_d(X)$ 描述数据对 X 的调整程度,与其期望值比较,它提供了非常重要的诊断信息。如果 $S_d(X)$ 的绝对值非常大,超过某一门限值,则对 X 不确定性描述不足;如果非常小,则对 X 不确定性描述过度。

3 贝叶斯校准预测方法

贝叶斯校准预测建模的基础是使用先验信息和后验信息。递归贝叶斯分级模型^[9]能序贯地综合专家信息、计算数据和试验数据,逐次估计参数,如图2所示。

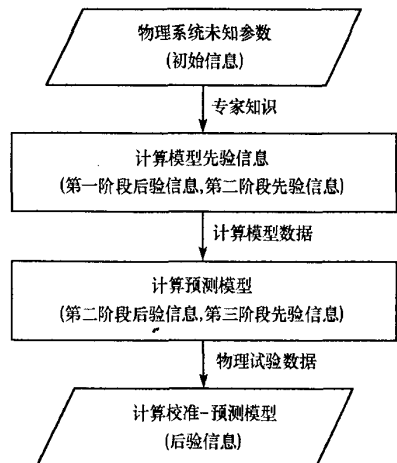


图2 校准预测递归贝叶斯分级模型
Fig.2 Recursive Bayesian hierarchical model

首先,利用初始知识给一系列未知参数如式(2)中的 β 和 σ^2 等指定先验,通过专家知识更新得到其对应后验值。接着,此后验值作为第二阶段先验,建立计算模型的先验信息,结合计算模型所得观测数据 $y; (x_1, u_1), (x_2, u_2), \dots, (x_n, u_n)$,更新得到计算预测模型 $\eta(x)$,即式(3)。最后,第二阶段后验信息作为第三阶段先验信息,并由物理试验数据校准更新,得到第三阶段后验均值与方差,即计算校准预测模型。

获得物理系统试验数据 z 后,物理过程真实输出的计算校准预测模型的后验均值和后验方差分别为:

$$E_z(f) = E(f) + \text{Cov}(f, z) \text{Var}(z)^{-1} [z - E(z)] \quad (11)$$

$$\text{Var}_z(f) = \text{Var}(f) - \text{Cov}(f, z) \text{Var}(z)^{-1} \text{Cov}(z, f) \quad (12)$$

贝叶斯线性方法应用于校准预测模型的基本思想是两次使用物理系统试验数据。首先,利用试验数据估计校准参数最佳输入值,随后在最佳输入处运行计算预测模型,其输出与试验数据比较,评价估计的充分性。最后,试验数据再一次被使用,利用贝叶斯线性方法,结合虚拟试验预测模型的输出结果,对物理系统进行线性预测。

首先,利用试验数据 z 计算最佳输入 u^* 的估计值,记为 \hat{u} ,即

$$\hat{u} = E_z(u^*) = E(u^*) + \text{Cov}[u^*, z] \text{Var}(z)^{-1} [z - E(z)] \quad (13)$$

为评价估计 \hat{u} 的合理性和充分性,计算方差

$$\text{Var}_z(u^*) = \text{Var}(u^*) - \text{Cov}(u^*, z) \text{Var}(z)^{-1} \text{Cov}(z, u^*) \quad (14)$$

其中, z 的均值和方差可由式(1)、(4)~(6)得到, u^* 与 z 的协方差 $\text{Cov}(u^*, z)$ 为:

$$\text{Cov}(u^*, z) = \text{Cov}(u^*, f) = \text{Cov}[u^*, m^*(u^*)] \quad (15)$$

最后,由 z 和 \hat{m}^* 得到物理系统真实输出的后验均值与方差分别为:

$$E_{z, \hat{m}^*}(f) = E(f^*) + \text{Cov}[f, (z, \hat{m}^*)] \text{Var}(z, \hat{m}^*)^{-1} [(z, \hat{m}^*) - E(z, \hat{m}^*)] \quad (16)$$

$$\text{Var}_{z, \hat{m}^*}(f) = \text{Var}(f^*) - \text{Cov}[f, (z, \hat{m}^*)] \text{Var}(z, \hat{m}^*)^{-1} \text{Cov}[(z, \hat{m}^*), f] \quad (17)$$

其中, $\hat{m}^* = m^*(x, \hat{u})$, 则均值 $E_{z, \hat{m}^*}(f)$ 是校准预测模型对物理系统真实输出的预测值, 方差 $\text{Var}_{z, \hat{m}^*}(f)$ 描述预测的精度。定义 $d \triangleq z - f^* = \delta_z + e$, 则诊断量 $Q^T [d - E(d)]$ 均值为 0, 方差为 1, 其中 Q^T 为 $[\text{Var}(d)]^{-1}$ 的 Choleski 分解。

4 应用实例

考虑某子母战斗部侵彻装甲钢虚拟试验, 计算模型中子弹口径为 62mm, 靶板长 208mm, 直径 80mm, 炸高为 20mm。为考察子弹结构中随机因素对其破甲性能的影响程度, 计算模型中考虑 2 个随机变量, 分别为药型罩壁厚差 x_1 和起爆点偏心 x_2 , 并适当放大 x_2 的取值范围。靶板材料本构模型中的失效应变 F , 为校准参数 x_3 , 在建立预测模型时, 将校准参数视为随机变量, 而在校准预测模型中为固定的校准值。

表 1 随机参数和校准参数

Tab. 1 Uncertainty parameters and calibration parameter

参数名称	符号	单位	先验信息及参数
药型罩壁厚差	x_1	mm	正态分布: $\mu = 0, 3\sigma = 0.05\text{mm}$
起爆点偏心	x_2	mm	正态分布: $\mu = 0, 3\sigma = 1\text{mm}$
失效应变	x_3	-	均匀分布: $[0.1, 0.9]$

采用极大熵试验设计方法为 $x = (x_1, x_2, x_3)$ 生成包含 30 个样本点的试验方案, 试验设计中各参数取值如表 1 所示。通过参数化建模技术分别建立对应的三维实体模型, 利用 LS-DYNA 对上述 30 组战斗部靶板有限元模型求解, 计算模型用 cm-g- μs 单位制, 采用流固耦合算法, 炸药、药形罩和空气用欧拉网格建模, 靶板采用拉格朗日网格, 共 651 383 个六面体单元, 采用 1/2 建模, 材料本构模型及状态方

程如表2所示。设30组虚拟试验得到射流穿深数据 y , 代入式(3)求得计算预测模型。

表2 材料本构模型及状态方程

Tab.2 Constructive model and equation of state

参数名称	本构模型	状态方程	密度(g/cm^3)
炸药	MAT_HIGH_EXPLOSIVE_BURN	EOS_JWL	1.72
药形罩	MAT_STEINBERG	EOS_GRUNEISEN	8.9
空气	MAT_NULL	EOS_LINEAR_POLYNOMIAL	1.29
靶板	PLASTIC_KINEMATIC	-	7.83

为校准计算模型参数,设计专门试验并获取试验数据,其中战斗部起爆点偏心通过加工时设置电雷管位置控制,装配前进行测量,而药型罩壁厚差在战斗部加工后可精确测量。同批次5发试验破甲深度分别为165mm、161mm、170mm、171mm和179mm,记为 z 。

通过校准参数最佳输入 $u^* = x_3^*$ 建立预测模型、战斗部试验以及试验测量值间的联系,将模型计算值 y 和试验测量值 z 代入式(16)和(17),求得计算校准预测模型,且由式(13)可得校准参数最佳输入估计值。其中, $u^* = x_3^*$, 均值和标准差初始值分别为 $E(u^* = x_3^*) = 0.500$ 及 $Sd(u^* = x_3^*) = 0.133$, 经试验数据 z 调整后分别为 $\hat{u} = \hat{x}_3 = E_z(u^* = x_3^*) = 0.32$ 及 $Sd_z(u^* = x_3^*) = 0.089$ 。比较模型计算值、校准预测模型计算值以及试验测量值,如表3所示。由表可见,校准预测模型均实现了较大的方差改变,减少了预测不确定性。诊断量 $Q^T[d - E(d)]$ 对应值分别为(0.000, -0.401, 0.071, 0.066, 0.263)。

表3 校准预测模型计算值比较

Tab.3 Results of calibrated prediction model

试验测量值	初始期望 $E(f^*)$	调整期望 $E_{z,m}(f)$	初始不确定性 $Var(f^*)$	调整不确定性 $Var_{z,m}(f)$
$z_1 = 165$	173.6	169.6	28.3	11.8
$z_2 = 161$	176.3	172.3	31.2	19.5
$z_3 = 170$	177.4	173.4	26.5	15.5
$z_4 = 171$	178.5	176.7	22.4	12.5
$z_5 = 179$	183.2	179.8	18.8	9.6

5 结论

模型校准是由复杂物理过程建模不确定性引起的,应调整不可测或弱特征的试验参数,可通过调整计算模型中的经验常数实现校准。校准不仅评估计算和试验中的误差和不确定性,更多的是用来提高计算结果与试验结果的一致性。在校准改善一致性问题的同时,降低了通用性。

参考文献:

- [1] Santner T J, Williams B J, Notz W I. Design & Analysis of Computer Experiments[M]. Springer-Verlag Inc., New York, 2003.
- [2] Sacks J, Welch W J, Mitchell T J, et al. Design and Analysis of Computer Experiments[J]. Statistical Science, 1989, 4(4): 409-435.
- [3] Currin C, Mitchell T, Morris M, et al. Bayesian Prediction of Deterministic with Applications to the Design and Analysis of Computer Experiments [J]. Journal of the American Statistical Association, 1991, 86(416): 953-963.
- [4] Acebal R. Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations[R]. AIAA-G-077, 1988.
- [5] 王志军, 尹建平. 弹药学[M]. 北京:北京理工大学出版社, 2005.
- [6] Kennedy M C, O'Hagan A. Bayesian Calibration of Computer Models[J]. Journal of the Royal Statistical Society, Ser. B, 2001, 63(3): 425-464.
- [7] Craig P S, Goldstein M, Rougier J C, et al. Bayesian Forecasting for Complex Systems Using Computer Simulators[J]. Journal of the American Statistical Association, 2001, 96: 717-729.
- [8] Goldstein M, Rougier J. Probabilistic Formulations for Transferring Inferences from Mathematical Models to Physical Systems[J]. Journal on Scientific Computing, 2005, 26(2): 467-487.
- [9] Reese C S, Wilson A G, Hamada M, et al. Integrated Analysis of Computer and Physical Experiments[J]. Technometrics, 2004, 46: 153-164.
- [10] Goldstein M. Bayes Linear Methods I Adjusting Beliefs: Concepts and Properties[D]. Department of Mathematical Sciences, University of Durham, 1995.

