

爆轰模拟不确定度的量化方法

马智博, 郑 淼, 殷建伟, 胡 杰, 魏 兰

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘 要: 通过对数值模拟不确定度产生机制的理论分析以及对不确定度从考核区到应用区发展趋势的反演, 展示数值模拟不确定度量化评估的关键技术. 基于工程设计的现实需求和数值模拟中验证与确认的思想, 提出数值模拟用于对爆轰系统进行科学预测时不确定度的评估框架, 并结合实例对方法进行演示和验证.

关键词: 数值模拟不确定度; 不确定度的量化; 验证与确认; 可靠性认证

中图分类号: O242.1

文献标识码: A

0 引言

自1991年暂停地下核试验后, 为了实现有效的武器库库存管理, 美国开发了在不依赖新型核试验的条件下评估和认证核武器可靠性与安全性的技术框架, 即 QMU (Quantification of Margins and Uncertainties - 裕度与不确定度的量化). QMU 方法能够简便高效地反映复杂系统各个环节的失效模式以及对应的可靠性水平, 对其它类型的产品也存在很高的推广应用价值^[1].

在应用 QMU 方法进行爆轰系统的可靠性认证时, 需要用到某些特征物理量的裕度 M 及其不确定度 U 的信息^[1-3], 这两类信息将直接影响对一个型号产品或设计方案的认证和决策. 在缺乏实验的条件下, 对裕度 M 的量化要求数值模拟具有足够的能力, 以确保计算过程顺利完成并得到模拟结果; 对不确定度 U 的量化 (Quantification of Uncertainties, QU) 关键是如何对数值模拟结果的不确定度进行量化评估. 在很多情况下, 计算程序能够对用于可靠性研究的物理模型实现全过程模拟, 但对计算结果的不确定度缺乏定量评估的方法. 因此, 在解决工程问题时, 对数值模拟不确定度的量化常常成为制约全局的技术瓶颈.

本文针对爆轰数值模拟中不确定度的量化方法展开研究, 通过简单算例, 提出了数值模拟用于科学预测时不确定度的量化思想, 并演示了量化分析的全过程.

1 数值模拟不确定度的组成结构

在规定的工作条件下, 爆轰系统的最终性能取决于该系统的初始状态, 因此初始状态的确定是方案设计的本质内容. 假设描述爆轰系统物理状态的参数组为

$$\xi(\mathbf{x}, t) = (\xi_1(\mathbf{x}, t), \xi_2(\mathbf{x}, t), \dots, \xi_m(\mathbf{x}, t))^T,$$

描述物质一系列行为规律 (例如本构关系或状态方程) 的函数组为

$$\eta(\xi) = (\eta_1(\xi), \eta_2(\xi), \dots, \eta_n(\xi))^T,$$

那么数值模拟所求解的爆轰系统性能参数组就可表示为一个泛函

$$\zeta(t) = (\zeta_1(t), \zeta_2(t), \dots, \zeta_p(t))^T = L[\xi(\mathbf{x}, t), \eta(\xi)].$$

数值模拟 (Modeling & Simulation, M&S) 的工程目的可被理解为, 在特定的工作条件下, 求解系统初始状态 $\xi(\mathbf{x}, t_0)$ 与其最终性能 $\zeta(t_e)$ 的映射关系. 为了突出初始状态对最终性能的决定性作用, 该映射关系也可以用另外一个泛函表示为

$$\zeta(t_e) = P[\xi(\mathbf{x}, t_0), \eta(\xi), t] \big|_{t=t_e}, \quad (1)$$

收稿日期: 2010-01-19; 修回日期: 2010-06-13

基金项目: 总装备部预研基金 (9140A19030908ZW0401) 及国家自然科学基金 (70771014) 资助项目

作者简介: 马智博 (1963-) 男, 河南, 研究员, 博士, 从事计算力学及可靠性研究.

其中初始状态 $\xi(\mathbf{x}, t_0)$ 是空间变量 \mathbf{x} 的函数。

不确定度分偶然不确定度 (Aleatory Uncertainty) 和认知不确定度 (Epistemic Uncertainty) 两大类。在构造计算模型时, $\xi(\mathbf{x}, t_0)$ 来自对模拟对象的实测结果, 虽然测量结果的不确定度源自测量过程的随机性, 具有偶然不确定度的性质, 但由于测量结果代表的是人类对某一固定模拟对象的认知结果, 所以 $\xi(\mathbf{x}, t_0)$ 所具有的不确定度宜看作认知不确定度。函数 $\eta(\xi)$ 的结构取决于物理唯象模型 (如材料的本构关系和状态方程等), 由于对这些唯象模型认识不足, $\eta(\xi)$ 常常存在认知不确定性。泛函 P 的结构取决于基本物理定律, 如质量、动量和能量守恒律等, 一般是严格和精确的。

对批量产品, 初始状态常常存在随机分布, 考察初始状态的变化对最终性能的影响属于敏感度分析^[4-6]。敏感度分析要求数值模拟是高度可信的, 而对复杂的爆轰系统, 这个要求常常不能满足, 因为数值模拟的可信度受到严峻的挑战, 尤其当数值模拟用以实现预测目的时, 计算方法本身所产生的不确定度往往很大。目前尚缺乏对数值模拟本身的不确定度进行量化评估的有效手段, 而这正是本文所关心的问题。

验证与确认 (Verification and Validation, V&V) 的主要任务是检验和确保数值模拟的可信度。前者偏重于数学, 用于评价计算结果能否正确反映数学模型的真解, 其中计算结果的比照对象是已知的解析解或相对精确的数值解; 后者偏重于物理, 用于评价数值模拟能否正确反映现实世界中的物理规律, 计算结果的比照对象是实验数据。本文把相对来说最有资格用以对比分析的解统称为标准解, 那么 V&V 就是通过数值解与标准解的对比分析来量化一定范围内物理模型的数值模拟不确定度, 但这并不能完全满足 QMU 的要求^[7]。工程上常常需要解决的问题是, 如何在 V&V 的基础上, 对外推性数值模拟的不确定度进行有效的量化, 而此类数值模拟主要用于发挥预测功能, 没有标准解可用以对比分析。

从概念上, 数值模拟不确定度不包含实验结果的测量不确定度, 因而在量化过程中应尽量排除后者对前者的影响。不确定度主要产生于数值模拟的三个主要环节, 这些环节在式(1)中均有体现, 我们可由此归纳出数值模拟不确定度的三个主要来源: ①对模拟对象初始状态的描述不够精确, 即函数 $\xi(\mathbf{x}, t_0)$ 存在不确定度; ②物理建模没有精确地反映物质的行为规律, 即函数 $\eta(\xi)$ 存在不确定度; ③数值模拟没有精确地反映那些代表基本物理规律的总体微分方程, 即数值计算在演绎泛函结构 $P[\cdot]$ 的过程中存在不确定度。

按照以上分析, 数值模拟不确定度指的是对特定初始状态的物理系统进行性能预测时所对应的不确定度, 不是初始状态在加工和贮存过程中因随机变化所实际导致的性能不确定度。两者有本质区别, 前者属于认知不确定度, 后者属于偶然不确定度。

工程设计中, $\xi(\mathbf{x}, t_0)$ 就是爆轰产品的设计参数。结合数值模拟的发展过程, 本文将 $\xi(\mathbf{x}, t_0)$ 的参数空间分为考核区和应用区, 前者有标准解用于对比分析, 后者则没有。对 V&V, 考核区对应于验证过程中的验证区和确认过程中的确认区, 所涉及的不确定度在信息来源上可能不同, 但量化方法存在共性。考核区内的数值模拟一般具有可信度较高的标准解, 通过对比分析可以发现计算误差并提出改正措施; 而应用区内的数值模拟才真正担负着科学预测的重任, 但仅靠该区的计算结果, 却不能得到计算结果本身的不确定度信息。因此, 数值模拟中不确定度量化的最终目标, 是有效地利用计算科学的理论方法以及考核区内的计算结果和对比信息, 实现应用区内数值模拟不确定度的量化预测和评估。

根据以上分析, 爆轰模拟的不确定度主要来源于对产品状态的建模、对物理规律的建模和数值计算过程这三个方面。本文强调, 在产品测量技术、物理建模技术和计算方法基本不变的前提下, 数值模拟从考核区过渡到应用区, 导致不确定度发生变化的幕后因素主要是产品或者说模拟对象的设计参数 $\xi(\mathbf{x}, t_0)$ 。因此, 在忽略高阶影响量的前提下, 数值模拟的总不确定度与设计参数 $\xi(\mathbf{x}, t_0)$ 之间存在函数关系, 并可被分解为三个部分,

$$U[\xi(\mathbf{x}, t_0)] = U_1[\xi(\mathbf{x}, t_0)] + U_2[\xi(\mathbf{x}, t_0)] + U_3[\xi(\mathbf{x}, t_0)], \quad (2)$$

其中右边第一项 $U_1[\cdot]$ 是产品建模引起的数值模拟不确定度, 其函数结构与测量手段有关, 它起源于对模拟对象工程测量的不确定度, 用这些测量结果构造产品模型, 自然导致最终计算结果的不确定度。右边第二项 $U_2[\cdot]$ 是构造物理模型 (比如材料的状态方程和湍流模型等) 时因函数 $\eta(\xi)$ 存在不确定度而引起的数值模拟不确定度, 其函数结构与物理建模时所采用的科学理论和实验手段等因素有关。右边第三项 $U_3[\cdot]$ 是计算过程产生的数值模拟不确定度, 其函数结构与计算方法 (包括空间和时间的离散方法) 有重要关系, 该

项反映了在 $\xi(x, t_0)$ 和 $\eta(\xi)$ 已经给定的情况下, 数值模拟在求解 $\xi(x, t_0)$ 和 $\zeta(t_e)$ 的映射关系时所产生的不确定度. 另外, 当产品建模、物理建模和计算过程都存在不确定度时, 还可能会产生非线性耦合效应, 但所产生的效果属于更高阶的小量, 本文暂不考虑.

如果拥有不确定度的源头信息和充分的数值计算能力, 就可以结合扰动分析理论和数值模拟技术, 实现对 $U_1[\cdot]$ 和 $U_2[\cdot]$ 的量化. 对爆轰系统, 最为关键的技术环节是对 $U_3[\cdot]$ 的量化. 我们认为, 对 $U_3[\cdot]$ 的量化至少包含两个过程: ①通过考核区中的结果对比和理论分析, 在设计参数 $\xi(x, t_0)$ 的参数空间中发现并锁定对不确定度有明显影响的设计变量, 然后将其整合形成一组特征设计变量(如果被锁定的设计变量个数不多且结构简单, 可直接作为特征设计变量), 作为不确定度量化预测模型的自变量; ②建立以函数表示的不确定度量化预测模型, 即根据考核区中数值模拟的不确定度信息, 提取不确定度随特征设计变量的变化规律, 用于估计应用区内数值模拟的不确定度.

本文针对工程设计所关心的物理问题, 构造了一个类似于爆轰过程的一维理论模型, 初始条件和物理建模都是精确的, 所以该模型的不确定度不包含 $U_1[\cdot]$ 和 $U_2[\cdot]$ 两项. 结合对有限元程序计算结果的综合分析, 研究了在设计变量 $\xi(x, t_0)$ 中特征设计变量的选取方法和函数 $U_3[\cdot]$ 的确定方法, 展示了爆轰数值模拟在 V&V 中验证阶段的不确定度量化思想.

2 概念模型

数值模拟的第一步是建立概念模型. 根据计算机模拟协会(SCS)的定义, 概念模型为数值计算所需要的所有输入信息, 包括描述物理规律的偏微分方程、初始条件、边界条件、材料本构关系、状态方程以及表现各种伴随现象的物理模型. 显然, 这里的概念模型同时包含了本文所述的物理模型 $\eta(\xi)$ 和反映初始状态的设计参数 $\xi(x, t_0)$.

本文对概念模型的选择来源于爆轰模拟中普遍存在而又值得重视的壁热现象——密度和内能的计算结果在物质界面附近产生非物理的数值振荡. 壁热现象及其产生的原因一直受到许多学者的关注, 它的产生与人工粘性的引入有关, 并随着人工粘性的增大而加强, 导致物理量的计算在接触边界附近产生明显误差, 从而对爆轰系统的精密设计带来不利影响. 为了定量地评估目前所使用的有限元程序在爆轰计算时因壁热问题而产生的不确定度, 我们设计了一维 Riemann 模型, 并且使该模型的物理参数尽量接近实际的爆轰模型.

模型中第一区的初始状态和状态方程分别为

$$x_1 < 0.155 \text{ m}, \quad u_1 = 0, \quad \rho_1 = 15\,000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}, \quad P_1 = 0, \quad E_1 = 0, \\ P = 2\,000^2(\rho - \rho_0) + 4.0\rho E.$$

第二区的初始状态和状态方程分别为

$$x_2 > 0.155 \text{ m}, \quad u_2 = 0, \quad \rho_2 = 2\,400 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}, \quad P_2 = 3.0 \times 10^{10} \text{ Pa}, \\ E_2 = 6.0 \times 10^6 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}, \quad P = 2.0\rho E,$$

其中, 初始间断的左侧即第一区用来比拟某些爆轰问题中存在的金属飞片, 初始间断右侧即第二区用来比拟炸药的高压爆轰气体产物.

该模型的初始密度比为 6.0, 初始压强比为无穷大, 两边压差为 $3.0 \times 10^{10} \text{ Pa}$, 因此壁热问题在第一区的物质界面处能够明显地表现出来. 图 1 为 $1.1 \mu\text{s}$ 时, 第一区内能和密度的有限元数值解和理论解. 从图上可以看到, 在物质界面附近, 密度和内能的数值解相对理论解的误差分别是 4.9% 和 41.6%. 两者有明显的差别, 说明此模型能较好地表现程序中的计算方法在处理这一类间断问题时存在的缺陷.

一般情况下, 产品的设计参数很多, 但在设计方案的变化过程中, 只有一部分设计参数是作为设计变量而跟着改变的. 在本文的设计方案中, 只有第一区的初始密度 ρ_1 和第二区的初始内能 E_2 属于设计变量, 其他模型参数在各设计方案中保持不变. 在设计变量 ρ_1 和 E_2 的参数空间中, 定义集合

$$\alpha = \{(\rho_1, E_2) \mid \rho_1 \in [12 \times 10^3, 18 \times 10^3], E_2 \in [4.8 \times 10^6, 7.2 \times 10^6]\}, \\ \beta = \{(\rho_1, E_2) \mid \rho_1 \in [10 \times 10^3, 20 \times 10^3], E_2 \in [4.0 \times 10^6, 8.0 \times 10^6]\},$$

同时将集合 α 设定为验证区(Verified Domain), 将集合 $\beta \cap \bar{\alpha}$ 设定为应用区(Applied Domain). 在验证区内可

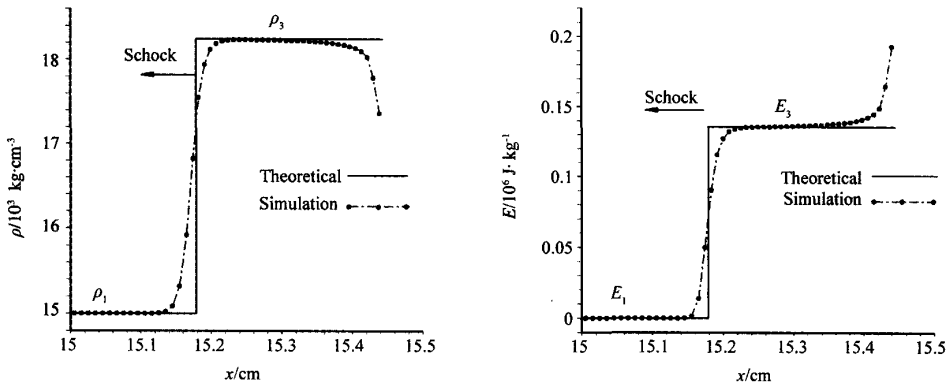


图1 第一区密度和内能分布

Fig. 1 Distribution of density and energy in the first zone

通过与理论解进行对比以获取数值模拟不确定度的原始信息,本文的主要目标在于对验证区中的不确定度进行外推以获取应用区内的不确定度。

3 特征设计变量的选取

特征设计变量的选取是数值模拟不确定度量化中最重要的技术环节之一,选取的依据来源于对误差源的理论分析。如前所述,本例中的计算误差产生于物质界面附近,根据对计算方法的理论研究,这种误差的产生与人工粘性项的引入有关,即在激波穿过预先存在密度间断的地方,引入粘性压强的算法可能不够合理,使得内能出现非物理升高现象,从而导致物质的过度膨胀,并由此引起密度的非物理下降。

根据以上分析,不妨设想,粘性项的函数结构应该能够提供有关特征量选取的某些信息。我们知道,人工粘性项 q 的引入,相当于在离散的流体力学方程组中用 $(P + q)$ 去代替原来的压力项 P , q 的形式如下:

$$q = \begin{cases} l\rho c \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| + l^2 \rho \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2, & \frac{\partial u}{\partial x} < 0, \\ 0, & \frac{\partial u}{\partial x} \geq 0, \end{cases} \quad (3)$$

其中 u 是速度, l 是一个常数,与 x 有相同的量纲, c 是等熵声速。由(3)式可以看出,密度 ρ 和速度梯度 $\partial u / \partial x$ 是影响人工粘性的主要因素。根据力学原理,不难想象设计变量 ρ_1 和 E_2 都可能是影响 ρ 和速度梯度 $\partial u / \partial x$ 的源头信息,所以可将两个设计变量 ρ_1 和 E_2 均作为特征设计变量来看待。另外,在选取过程中如果把某些对不确定度没有影响的设计变量也误列为特征设计变量,后继的量化模型会自动地排除这些设计变量,对 QU 的结果不会造成本质的影响。

4 不确定度的量化

如前所述,在本文的概念模型中,不确定度 $U_3[\cdot]$ 的量化将主要表现在验证区和应用区。这项工作包含两个步骤:第一步负责将不确定度的信息从验证区中提取出来;第二步负责从提取出来的信息中发现规律,然后将这些规律投送到应用区,从而得到应用区内的不确定度信息。

随着问题的不同,从验证区中得到的对比结果有可能直接以不确定度的形式出现,也有可能以误差等其它形式出现。无论提取的信息形式如何,最终得到的应用区内的不确定度都要经过转换和整合,使之符合 QMU 认证所需要的结构形式。本文所举的算例是一个比较简单的物理问题,在特征设计变量的取值空间中,模拟结果相对于理论解的偏离是单向的,可以直接对计算误差进行量化分析。对实际问题,可以结合具体的工程需求,将该量化结果转化为不确定度的形式。

4.1 验证区内不确定度的量化

4.1.1 概念模型的理论解

本算例中的概念模型为一维流体力学 Riemann 问题

$$(u, \rho, P, E) = \begin{cases} (u_1, \rho_1, P_1, E_1), & x < 0.155, \\ (u_2, \rho_2, P_2, E_2), & x > 0.155. \end{cases} \quad (4)$$

该问题的理论解包括一个向左传播的激波、一个向左传播的接触间断和一个向右传播的稀疏波,并假定将第一区中激波波后物质界面位置上密度 ρ_3 和内能 E_3 的计算结果是否正确作为实际工程中所主要关心的问题. 对于特征设计变量 ρ_1 和 E_2 , 验证区内若干设计点的理论解如表 1, 2 所示.

表 1 验证区内 ρ_3 的理论解 ($\rho/10^3 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}, E/10^6 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}$)

Table 1 Theoretical solution of ρ_3 in the verified domain ($\rho/10^3 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}, E/10^6 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}$)

E_2	ρ_1						
	12. 0	13. 0	14. 0	15. 0	16. 0	17. 0	18. 0
4. 8	14. 554 0	15. 663 7	16. 766 2	17. 862 2	18. 952 3	20. 037 1	21. 117 1
5. 2	14. 664 9	15. 782 8	16. 893 2	17. 996 8	19. 094 2	20. 186 1	21. 272 9
5. 6	14. 768 7	15. 894 5	17. 012 5	18. 123 5	19. 228 0	20. 326 8	21. 420 2
6. 0	14. 865 9	15. 999 3	17. 124 7	18. 242 8	19. 354 3	20. 459 7	21. 559 6
6. 4	14. 957 2	16. 098 0	17. 230 5	18. 355 6	19. 473 8	20. 585 7	21. 691 9
6. 8	15. 043 2	16. 191 1	17. 330 5	18. 462 3	19. 587 0	20. 705 3	21. 817 6
7. 2	15. 124 3	16. 279 1	17. 425 2	18. 563 4	19. 694 5	20. 819 0	21. 937 3

表 2 验证区内 E_3 的理论解 ($\rho/10^3 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}, E/10^6 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}$)

Table 2 Theoretical solution of E_3 in the verified domain ($\rho/10^3 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}, E/10^6 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}$)

E_2	ρ_1						
	12. 0	13. 0	14. 0	15. 0	16. 0	17. 0	18. 0
4. 8	0. 130 055	0. 118 076	0. 107 794	0. 098 889	0. 091 111	0. 084 270	0. 078 214
5. 2	0. 145 206	0. 132 002	0. 120 656	0. 110 815	0. 102 212	0. 094 636	0. 087 922
5. 6	0. 160 630	0. 146 196	0. 133 780	0. 122 999	0. 113 564	0. 105 247	0. 097 870
6. 0	0. 176 281	0. 160 616	0. 147 126	0. 135 402	0. 125 131	0. 116 069	0. 108 024
6. 4	0. 192 153	0. 175 252	0. 160 685	0. 148 014	0. 136 904	0. 127 093	0. 118 376
6. 8	0. 208 210	0. 190 072	0. 174 426	0. 160 805	0. 148 853	0. 138 291	0. 128 900
7. 2	0. 224 441	0. 205 065	0. 188 338	0. 173 765	0. 160 969	0. 149 653	0. 139 584

4. 1. 2 验证区内不确定度的量化

算例(4)的数值误差定义如下:

$$e_\rho = \rho_3^{\text{simulation}} - \rho_3^{\text{theoretical}}, \quad (5)$$

$$e_E = E_3^{\text{simulation}} - E_3^{\text{theoretical}}, \quad (6)$$

根据验证区内多个设计点的数值解和理论解,可由式(5)和(6)得到该区内密度误差 e_ρ 和内能误差 e_E 的分布,如图 2 所示.

4. 2 应用区内不确定度的量化

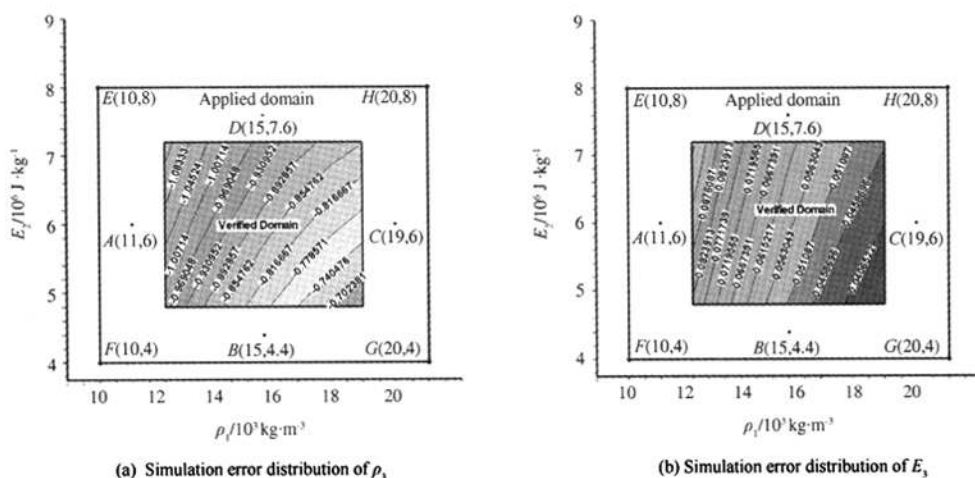
根据(2)式所反映的基本思想,本算例中的数值模拟误差与初始密度 ρ_1 和初始内能 E_2 存在某种函数关系,通过提取验证区内的误差分布规律,即可建立以函数表示的误差预测模型,从而得到应用区内误差的量化结果.

本文拟通过一组基函数来刻画数值误差随特征设计变量的变化规律,

$$\boldsymbol{e} = \boldsymbol{A}_n \boldsymbol{B}_n, \quad (7)$$

其中 $\boldsymbol{e} = [e_\rho \ e_E]^T$, \boldsymbol{A}_n 是一个系数矩阵, \boldsymbol{B}_n 是由特征设计变量的多项式基函数组成的基底.

在验证区内,特征设计变量和数值误差是已知的,为提取误差的分布规律,需要反演系数矩阵 \boldsymbol{A}_n . 由于

图 2 密度 ρ_3 和内能 E_3 的模拟误差Fig. 2 Simulation errors of ρ_3 and E_3

验证区内有多个设计点,求解系数矩阵 A_n 时将遇到超定方程问题,即方程数目多于未知数的数目.本文利用最小二范数原则来实现解的唯一性和最优性,这组解对应于 $\|A_n B_n - e\|_2$ 达到最小时系数矩阵 A_n 的取值^[8-9].

当数值误差采用特征设计变量的二阶多项式来表达时,矩阵 B_2 为

$$B_2 = [1 \quad \xi_1 \quad \xi_2 \quad \xi_1^2 \quad \xi_1 \xi_2 \quad \xi_2^2]^T,$$

其中 $\xi_1 = \rho_1$, $\xi_2 = E_2$, 对应的系数矩阵为

$$A_2 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \end{bmatrix}.$$

类似地,当数值误差采用特征设计变量的三阶多项式表达时,矩阵 B_3 为

$$B_3 = [1 \quad \xi_1 \quad \xi_2 \quad \xi_1^2 \quad \xi_1 \xi_2 \quad \xi_2^2 \quad \xi_1^3 \quad \xi_1^2 \xi_2 \quad \xi_1 \xi_2^2 \quad \xi_2^3]^T,$$

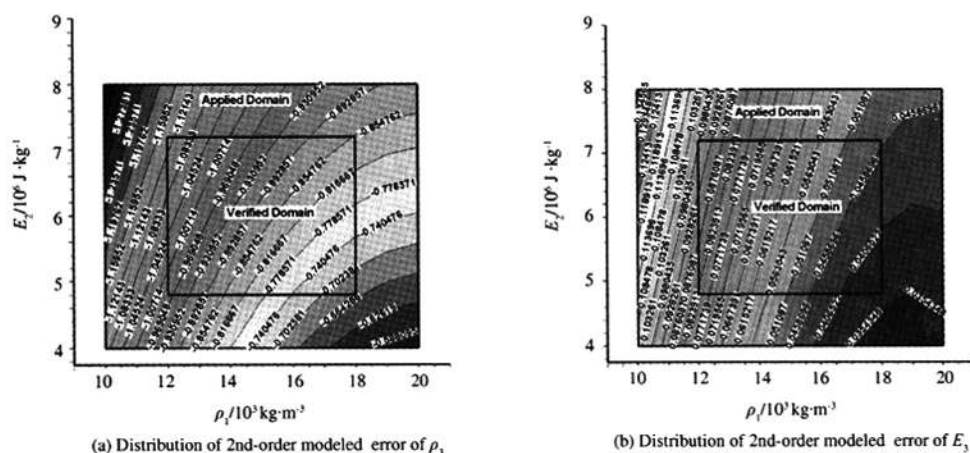
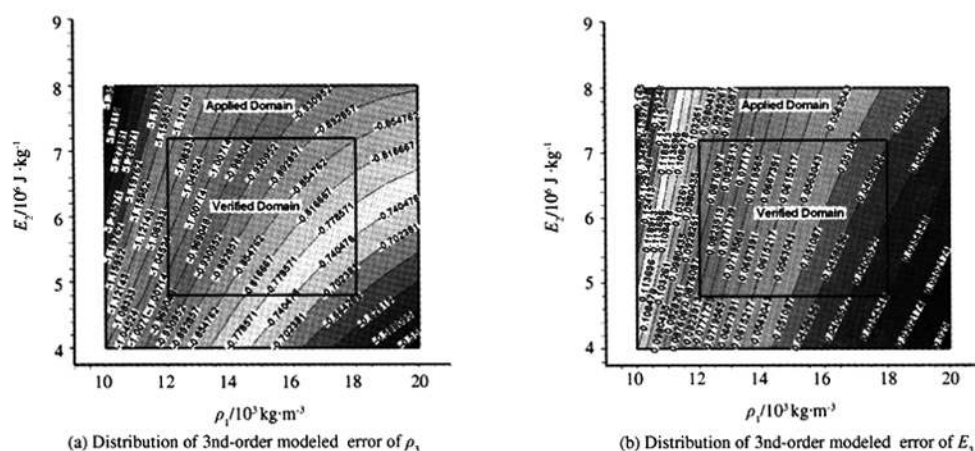
对应的系数矩阵为

$$A_3 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,10} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,10} \end{bmatrix}.$$

根据表 1 和表 2 中各参考点的数值解和理论解,可分别反演出对应于二阶和三阶预测模型的系数矩阵

$$A_2 = \begin{bmatrix} -2.240\ 274 & 0.313\ 055 \\ 0.193\ 520 & -0.033\ 903 \\ -0.081\ 785 & 0.014\ 143 \\ -0.004\ 414 & 0.000\ 958 \\ -0.001\ 913 & -0.000\ 497 \\ 0.003\ 292 & -0.000\ 083 \end{bmatrix}^T, \quad A_3 = \begin{bmatrix} -1.850\ 557 & 0.463\ 200 \\ 0.236\ 964 & -0.078\ 038 \\ -0.038\ 451 & 0.047\ 168 \\ -0.012\ 145 & 0.004\ 553 \\ 0.021\ 902 & -0.003\ 558 \\ 0.024\ 360 & -0.001\ 825 \\ 0.000\ 232 & -0.000\ 091 \\ -0.000\ 449 & 0.000\ 081 \\ -0.000\ 863 & 0.000\ 052 \\ -0.000\ 451 & 0.000\ 054 \end{bmatrix}^T$$

误差预测模型反映的是误差随特征设计变量的变化规律,不仅可以得到应用区内的误差分布,同时也可以得到考核区内的误差分布,如图 3 和图 4 所示,但考核区内的误差分布属于反演结果,与原始的误差信息存在概念上的差别.

图 3 ρ_3 和 E_3 的模拟误差的二阶模型预测结果Fig. 3 Predicted simulation errors of ρ_3 and E_3 by 2nd-order model图 4 ρ_3 和 E_3 的模拟误差的三阶模型预测结果Fig. 4 Predicted simulation errors of ρ_3 and E_3 by 3rd-order model

有了应用区内的误差量化结果,可进一步根据工程系统的具体要求以及可靠性认证所对应的信息特征,将误差信息转化为不确定度,比如可用 $U = |e|$ 或其他形式实现这一转化.如果预测模型直接针对不确定度,则无须转化.

5 对不确定度量化方法的鉴定

前一节通过对验证区内计算误差的分析,建立了用函数表示的误差预测模型.为了验证该方法的正确性和可行性,还需对其进行鉴定.鉴定的一般方法是,首先在应用区内选择一些没有进行过数值模拟的新模型,用本文的方法预测其数值模拟的不确定度,然后对这些新模型进行数值模拟并设法得到其标准解,将数值解与标准解进行对比以得到真实的数值模拟不确定度,最后将预测得到的不确定度 $U|_{\text{prediction}}$ 与真实的数值模拟不确定度 $U|_{\text{simulation}}$ 进行比较分析,以判定本文所提方法的正确性.

本算例为简单的一维 Riemann 问题,在应用区内仍存在理论解,因此可以得到应用区内各个设计点(如图 2 中的 A, B, C, D, E, F, G, H 点)真实的数值模拟误差 $e_{\rho}|_{\text{simulation}}$ 和 $e_E|_{\text{simulation}}$,而通过预测模型得到的误差为 $e_{\rho}|_{\text{prediction}}$ 和 $e_E|_{\text{prediction}}$,如表 3 所示.

在应用区内,密度误差的二阶和三阶预测值比较接近;在初始密度比较大的情况下,例如 C、G 和 H 点,内能误差的二阶与三阶预测值的差别较大。为了描述预测模型对数值模拟误差的预测精度,定义

$$\varepsilon_{\rho} = \frac{e_{\rho}|_{\text{prediction}} - e_{\rho}|_{\text{simulation}}}{e_{\rho}|_{\text{simulation}}} \times 100\%,$$

(8a)

$$\varepsilon_E = \frac{e_E|_{\text{prediction}} - e_E|_{\text{simulation}}}{e_E|_{\text{simulation}}} \times 100\%,$$

(8b)

并给出用 ε 表示的对数值模拟误差进行预测的精度,如表 4 所示。结果显示,两组预测值都能在对新模型的数值模拟还没有进行之前,较好地预测出这些模拟行为将可能产生的数值误差。从该例的个案中可以看出,本文提出的爆轰模拟不确定度的量化思想是正确可行的,但应该注意到,在多数情况下,随新模型所对应的设计点逐渐远离考核区,不确定度的变化规律将随之发生改变,对数值模拟不确定度的预测精度也会逐渐下降,如果变化规律发生质的改变,则该思想方法不再适用。

表 3 密度误差 e_{ρ} 和内能误差 e_E 的数值模拟值与预测值 ($e_{\rho}/10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $e_E/10^6 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$)

Table 3 Simulation and prediction of e_{ρ} and e_E ($e_{\rho}/10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $e_E/10^6 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$)

设计点	数值模拟	二阶预测	三阶预测	数值模拟	二阶预测	三阶预测
	$e_{\rho} _{\text{simulation}}$	$e_{\rho} _{\text{prediction}}$	$e_{\rho} _{\text{prediction}}$	$e_E _{\text{simulation}}$	$e_E _{\text{prediction}}$	$e_E _{\text{prediction}}$
A	-1.155 693	-1.144 154	-1.154 701	0.109 866 52	0.105 091 97	0.108 490 67
B	-0.755 568	-0.753 077	-0.754 908	0.048 321 54	0.047 880 45	0.048 277 30
C	-0.737 250	-0.747 249	-0.736 702	0.037 095 52	0.039 946 19	0.036 547 48
D	-0.976 857	-0.980 215	-0.978 384	0.065 608 70	0.066 071 06	0.065 674 18
E	-1.377 756	-1.343 160	-1.370 942	0.156 877 93	0.137 866 91	0.148 881 43
F	-1.073 680	-1.097 498	-1.082 402	0.116 192 07	0.105 183 27	0.108 754 00
G	-0.545 182	-0.563 106	-0.535 324	0.025 724 0	0.033 696 43	0.022 681 89
H	-0.921 689	-0.885 290	-0.900 386	0.043 149 97	0.046 489 30	0.042 918 56

表 4 密度与内能误差的预测精度

Table 4 Prediction accuracy of simulation errors of density and energy

设计点	$\varepsilon_{\rho} (\%)$		$\varepsilon_E (\%)$	
	二阶预测	三阶预测	二阶预测	三阶预测
A	-0.998	-0.086	-4.346	-0.138
B	-0.330	-0.087	-0.913	-0.092
C	1.356	-0.081	7.672	-1.489
D	0.338	0.154	0.703	0.100
E	-2.511	-0.501	-12.118	-5.097
F	2.218	0.812	-9.475	-6.401
G	3.283	-1.816	30.991	-11.826
H	-3.949	-2.311	7.738	-0.536

6 结论

在缺乏实验数据的前提下,爆轰系统的可靠性认证信息主要来自数值模拟,而数值模拟能力和对数值模拟不确定度的评价能力是 QMU 认证体系所不可少的两个支撑条件。如何评估科学预测的不确定度,是制约可靠性工作有效开展的技术屏障。该项工作虽然与 V&V 有相似之处,但二者的目标不尽相同。V&V 的服务对象是数值模拟体系,包括物理建模、算法、软件和软件的运行环境等,其目标是验证和确认特定的数值模拟工具能否用于一定范围内物理模型的数值计算,评价所需的信息主要来自模拟结果与标准解的比较,而数值

模拟 QU 的服务对象是可靠性工程,其目标是评价人们对物理系统的认知不确定度,虽然量化评估所需的源头信息也来自比较,但它的最终任务是对未曾经过试验的新模型进行数值模拟不确定度预估,所涉及的专业面和技术领域更加广泛. 本文的目的是借助简单算例建立概念和技术框架,对复杂爆轰系统数值模拟不确定度的量化评估,由于存在人为校准(Calibration)等诸多现实因素,不确定度从考核区到应用区的变化规律将更难把握,因而会遇到新的挑战!

参 考 文 献

- [1] Ma Zhibo, Ying Yangjun, Zhu Jianshi. QMU certifying method and its implementation[J]. Chinese Journal of Nuclear Science and Engineering, 2009, **29**(1): 1 - 9.
- [2] Pilch M, Trucano T G, Helton J C. Ideas underlying quantification of margins and uncertainties (QMU): A white paper[R], SAND2006-5001, Sandia National Laboratory, 2009.
- [3] Helton J C. Conceptual and computational basis for the quantification of margins and uncertainty [R]. SAND 2009-3055, Sandia National Laboratory, 2009.
- [4] Chantrami T, Doostan A, Iaccarino G. Padé-Legendre approximants for uncertainty analysis with discontinuous response surfaces [J]. Journal of Comp Phys, 2009, **228**: 7159 - 7180.
- [5] Doostan A, Iaccarino G. A least-squares approximation of partial differential equations with high-dimensional random inputs [J]. Journal of Computa Phys, 2009, **228**: 4332 - 4342.
- [6] Helton J C, Johnson J D, Sallaberry C J, Storlie C B. Survey of sampling-based method for uncertainty and sensitivity analysis [J]. Reliability Engineering and System Safety, 2006, **91**(10 - 11): 1175 - 1209.
- [7] Oberkampf W L, Trucano T G. Verification and validation in computational fluid dynamics [R]. SAND2002 - 0529, Sandia National Laboratory, 2002.
- [8] Xu Cuiwei, Sun Shengwu. Guidance of computing method[M]. 3ed. Chinese Higher Education Press, 2007.
- [9] Jia Xiaoyong, Xu Chuansheng, Bai Xin. Foundation and theory of least square method [J]. Transaction of North-West University (Natural Science Edition), 2006, **36**(3): 501 - 511.

Quantification of Uncertainties in Detonation Simulations

MA Zhibo, ZHENG Miao, YIN Jianwei, HU Jie, WEI Lan

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics 100088, China)

Abstract: According to the principles of Modeling & Simulation (M&S) and charactersitic of detonation system that final performances are determined by initial conditions, total uncertainties are sorted to three parts that varying along with initial conditions. It reveals how uncertainties are brought on and evolve from benchmark models to new models. Based on engineering practices and technology of verification & validation, a framework of quantification about uncertainty is brought forward in detonation simulation. An example is presented to demonstrate general idea in quantifying uncertainty of M&S.

Key words: uncertainty of modeling & simulation; quantification of uncertainty; verification & validation; reliability certification