

核反应堆物理计算数据同化研究进展

龚禾林¹, 刘威震², 吴 屈³, 李 庆³, 李天涯³, 廖鸿宽³, 钟旻霄³,
王江宇³, 赵文博³, 张世全², 陈 长³

(1. 上海交通大学 巴黎卓越工程师学院, 上海 200240;

2. 四川大学 数学学院, 四川 成都 610064;

3. 中国核动力研究设计院 核反应堆系统设计技术重点实验室, 四川 成都 610041)

摘 要: 为了更全面深刻地认识用于核反应堆物理计算中的数据同化理论, 介绍了数据同化在反应堆物理领域的两大应用方向, 即最佳参数估计和物理场重构。详细分析了基于模型降阶的数据同化理论, 包括模型降阶理论基础和基于本征正交分解的模型降阶; 分别介绍了广义经验插值法和稳定格式本征正交分解, 并给出了部分数值结果。讨论了反应堆物理领域中开展不确定度分析和量化的相关工作进展。此外, 为了进一步确保数据同化结果的精度和可靠性, 强调了不确定度分析的重要性并对其进行介绍。分析表明: 基于模型降阶的数据同化方法具有计算效率高、精度高的优点, 是核工程领域数据同化的新兴发展方向。

关键词: 数据同化; 核反应堆物理; 模型降阶; 观测值

中图分类号: TL329.2

文献标志码: A

文章编号: 2097-2741(2024)02-057-015

Progress of Data Assimilation in Reactor Physics

GONG Helin¹, LIU Weizhen², WU Qu³, LI Qing³, LI Tianya³,
LIAO Hongkuan³, ZHONG Minxiao³, WANG Jiangyu³,
ZHAO Wenbo³, ZHANG Shiquan², CHEN Zhang³

(1. Paris Elite Institute of Technology, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240;

2. School of Mathematics, Sichuan University, Chengdu 610064, Sichuan;

3. Science and Technology on Reactor System Design Technology Laboratory, Nuclear Power Institute of China, Chengdu 610041, Sichuan)

ABSTRACT: To have a stronger appreciation of the data assimilation used in nuclear reactor physics, the optimal parameter estimation and physical field reconstruction, the two main applications in reactor physics, were introduced firstly. Then, the model order reduction-based data assimilation theory, including the theoretical basis of model order reduction and the model order reduction based on proper orthogonal decomposition, were analyzed. Furthermore, the generalized empirical interpolation method and the stabilized proper orthogonal decomposition, as well as numerical results were presented. Accordingly, the progress of uncertainty analysis and quantifica-

收稿日期: 2023-09-25

基金项目: 上海市自然科学基金面上项目 (23ZR1429300); 国家自然科学基金面上项目 (12175220); 中核集团领创科研项目 (CNNC-LCKY-202234); 国防科技工业核动力技术创新中心项目 (HDLXZX-2023-HD-039-02)

第一作者: 龚禾林 (1987—), 男, 副教授, 主要从事工程科学计算与人工智能研究。E-mail: gonghelin06@qq.com

引用格式: 龚禾林, 刘威震, 吴屈, 等. 核反应堆物理计算数据同化研究进展[J]. 火箭军工程大学学报, 2024, 38 (2): 57-71.

tion in reactor nuclear reactor physics were discussed. Additionally, the importance of uncertainty analysis was emphasized and introduced to ensure the accuracy and reliability of the data assimilation results. Analysis showed that the data assimilation method based on model order reduction has the advantages of high computational efficiency and accuracy, and represents an emerging direction in data assimilation in the field of nuclear engineering.

KEYWORDS: data assimilation; nuclear reactor physics; model order reduction; observations

传统的反应堆物理计算框架, 基于稳态或含时中子输运或扩散方程的数值模型, 需要精确给定初始条件、边界条件和其他物性参数等作为输入参数, 以实现指定状态的堆芯物理行为的建模和模拟。但是, 仅基于反应堆物理模型的数值计算与工程实践之间存在不可避免的差异性因素, 主要包括寿期内随着燃耗加深和实际功率运行史引发的各种参数不确定性。这些差异性因素由于无法被准确和全面测量而缺乏合适的分析模型, 是现阶段反应堆物理数值模拟误差的主要来源。

数据同化 (Data Assimilation, DA) 旨在考虑数据时空分布以及观测场和背景场误差的基础上, 在数值模型的动态演变过程中科学融合观测数据的方法。它是在过程模型的动态框架内, 通过 DA 算法不断融合时空上离散分布的不同来源和不同分辨率的直接或间接观测信息来自动调整模型轨迹, 以改善动态模型状态的估计精度, 提高模型预测能力。DA 在气象学、天气预报、海洋、环境等领域应用于结合有限测量值和理论值重构物理场的研究尤为广泛^[1-2]。在核能领域, Bryson 等^[3]首先对卡尔曼滤波方法应用于堆芯功率分布的重构进行了尝试; 近年来, 以法国电力公司 (Électricité de France, EDF) 为代表的研究团队针对不同的 DA 方法应用于堆芯通量、功率重构进行了广泛研究^[4-6]。耿小兵等^[7]基于集宗四维变分同化对核事故源项进行了反演, 取得了不错的效果。本研究团队基于三维变分 (3D-Var) DA 方法发展了局部非线性插值方法, 在“华龙一号”堆芯三维功率分布重构方面取得了非常好的效果^[8]。

数据同化方法具备利用多源异构探测器测量信息的潜力, 即能够综合利用不同来源、不同精度、不同分布的探测器信息以提高重构精度^[6]。但是, 对于高维物理场, 数据同化需要建模的物理场协方差矩阵维度很高, 极大地增加了建模的不确定性和计算成本。因此, 在高维空间、多尺度、非线性、非高斯、复杂不确定性以及状态量空间相关性等多种因素的综合作用下, 现有的数

据同化算法的不足日益突出, 针对上述问题的新的数据同化算法亟待被提出, 这也是数据同化算法的发展方向^[9]。

本文详细阐述了数据同化在核反应堆工程计算中的两方面应用, 即最佳参数估计和物理场重构, 介绍了基于模型降阶的数据同化最新理论和相应的数值结果。本文旨在系统介绍核反应堆堆芯物理 (稳态) 计算的数据同化架构, 通过科学利用试验和运行相关的实测数据, 提升理论计算输入参数和计算输出结果的精度, 实现堆芯核设计、试验和运行相关的反应堆物理计算闭环生态, 强化对反应堆物理计算软件和反应堆实测数据价值挖掘的能力, 提升堆芯核设计和堆芯在线监测计算精度。

1 数据同化理论基础

数据同化方法旨在结合背景状态信息 $\mathbf{x}_b \in \mathbb{R}^n$ (理论值或计算值) 和观测信息 $\mathbf{y}_o \in \mathbb{R}^m$ (由探测器或传感器测量), 给出真实物理状态 $\mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^n$ 的最佳估计^[10]。记 G 为观测算子, 考虑到背景物理场向量和观测向量均存在误差, 于是有

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_t &= \mathbf{x}_b + \mathbf{e}_b \\ \mathbf{y}_o &= G(\mathbf{x}_t) + \mathbf{e}_o\end{aligned}\quad (1)$$

式中: $\mathbf{e}_b \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{e}_o \in \mathbb{R}^m$, 分别为背景状态误差和观测误差, 对应的协方差矩阵分别为

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= E(\mathbf{e}_b \mathbf{e}_b^T) \in \mathbb{R}^{n \times n} \\ \mathbf{R} &= E(\mathbf{e}_o \mathbf{e}_o^T) \in \mathbb{R}^{m \times m}\end{aligned}$$

通过最小化如下代价函数 J :

$$\begin{aligned}J(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b)^T \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b) + \\ &\quad \frac{1}{2} (G(\mathbf{x}) - \mathbf{y}_o)^T \mathbf{R}^{-1} (G(\mathbf{x}) - \mathbf{y}_o)\end{aligned}\quad (2)$$

得到综合考虑背景和观测值的预测结果:

$$\mathbf{x}_a = \arg \min_{\mathbf{x}} J(\mathbf{x})$$

式 (2) 也可由概率论贝叶斯理论推导。当观测函数为线性时, 还可通过最佳线性无偏估计

(Best Linear Unbiased Estimation, BLUE)、3D-Var、卡尔曼滤波 (Kalman Filter) 等方法导出。此外, 还可导出 $\mathbf{x}_a$ 对应的协方差矩阵。当 G 是线性时, 可使用矩阵 H 表示, 即 $G(\mathbf{x}) = H\mathbf{x}$, 式 (2) 的解为

$$\mathbf{x}_a = \mathbf{x}_b + K(\mathbf{y}_o - H\mathbf{x}_b)$$

式中: K 为增益矩阵 (又称卡尔曼增益矩阵), 有

$$K = BH^T (HBH^T + R)^{-1}$$

也可从概率论的角度出发推导式 (2)。记 π_X 为随机变量 X 的概率分布, 则 $\mathbf{x}$ 的先验概率为 $\pi_X(\mathbf{x})$ 。根据式 (1) 有观测量

$$Y = G(X) + \Theta$$

式中: 观测误差 Θ 的概率密度为 π 。则给定 $\mathbf{x}$ 后, $\mathbf{y}$ 的条件概率为 $\pi_{Y|X}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \pi(\mathbf{y} - G(\mathbf{x}))$ 。根据贝叶斯公式, 在给定观测量 $\mathbf{y}$ 的条件下, $\mathbf{x}$ 的后验概率为

$$\pi_{X|Y}(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \frac{\pi_{Y|X}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) \pi_X(\mathbf{x})}{\pi_Y(\mathbf{y})} \propto \pi_{Y|X}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) \pi_X(\mathbf{x})$$

式中: $\pi_Y(\mathbf{y}) = \int_{\mathbb{R}^n} \pi_{Y|X}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) \pi_X(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ 为仅依赖于 $\mathbf{y}$ 的归一化常量。若 X 满足联合高斯分布 $X \sim N(\mathbf{x}_b, B)$, 则

$$\pi_X(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n \det(B)}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_b)^T B^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_b)\right)$$

误差 Θ 也满足联合高斯分布 $\Theta \sim N(\mathbf{0}, R)$, 有

$$\pi_{Y|X}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^m \det(R)}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{H}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}_o)^T R^{-1}(\mathbf{H}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}_o)\right)$$

于是

$$\pi_{X|Y}(\mathbf{y}|\mathbf{x}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_b\|_{B^{-1}} - \frac{1}{2}\|\mathbf{H}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}_o\|_{R^{-1}}\right)$$

$\mathbf{x}$ 的最大后验概率对应的解为

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_a &= \arg \max_{\mathbf{x}} \pi_{X|Y}(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \\ &= \arg \min_{\mathbf{x}} \frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_b\|_{B^{-1}} + \frac{1}{2}\|\mathbf{H}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}_o\|_{R^{-1}} = \\ &= \arg \min_{\mathbf{x}} J(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

有关数据同化的详细理论推导和具体数值求解过程可参见文献[10]。

2 数据同化在反应堆物理领域的应用

数据同化在反应堆堆芯物理计算中有两大方面研究: 最佳参数的估计和物理场重构^[3,5,11-12]。具体到核工程界的应用实践, EDF 率先在其堆芯数值仿真集成平台 (SALOME) 上集成了数据同化功能模块 (Assimilation de Données et Aide à l'Optimisation, ADAO)^[13], 用于实测数据和理论计算数据的最佳融合, 相关示例可参考文献[12]。此外, 中国核动力研究设计院相关研究团队亦正在发展基于数据同化理论的数据驱动堆芯物理计算软件。

2.1 最佳参数估计

反应堆物理计算结果与试验、实验值始终存在偏差, 这类偏差是多方面的误差共同作用的反映。这些误差难以经过严格的论证分析进行拆解, 但总体包括以下方面: (1) 数值计算模型边界条件、初始条件误差; (2) 计算程序的输入参数误差, 主要包括冷却剂出入口温度、冷却剂压力、硼浓度、棒位、功率水平、宏观燃耗等集总参数误差; (3) 宏观截面数据库误差, 如两步法中, 组件计算得到宏观截面数据, 这类数据实际上只是计算模型引入的中间参数, 不具备明显的准确物理意义, 数值准确性无从谈起, 这类数据误差对计算结果有重要影响; (4) 微观截面数据库 (各种材料对应的核素截面数据库) 的误差, 这类误差由协方差数据库得到反映, 是不确定性分析的重要内容; (5) 数值计算建模的其他误差。

对于上述第 (1) 方面误差, 可通过数据同化方法进行优化^[12]。对于第 (2) 方面误差, 这类参数维度较小, 一般为 10 维量级, 通过数据同化方法, 根据堆内外功率或其他探测器实测值进行数据同化调整, 实现对集总参数的精确估计, 进而利用更精确的集总参数进行堆芯物理计算得到功率分布和其他数据, 思想直观, 操作简单, 在工程上具备很高的可行性^[14]。对于维度更高的第 (3)、(4) 方面误差, 常见方法是截面数据库调整^[14-17]。值得注意的是, 随着高保真建模和数值计算技术及数据科学的发展, 基于实测数据的数据驱动建模方式建立了设计到验证的闭环, 促进了高效设计和优化设计的发展。数据驱动建模最有代表性的技术就是数据同化、数据挖掘和人工智能。基于数据同化的反应堆物理计算, 一个重要

方面就是最佳参数估计^[18-21]。Zeng 等^[22]从随机变量的角度考虑模型参数,通过引入贝叶斯推理和马尔可夫链蒙特卡罗方法,提出一种集成贝叶斯方法用于模型参数估计。

图 1 展示了基于 IAEA-2D 基准题,假设中子扩散系数不确定时,使用该方法对中子扩散系数估计的结果。其中,样本数为 200, Metropolis-Hastings 算法收敛步数为 100。

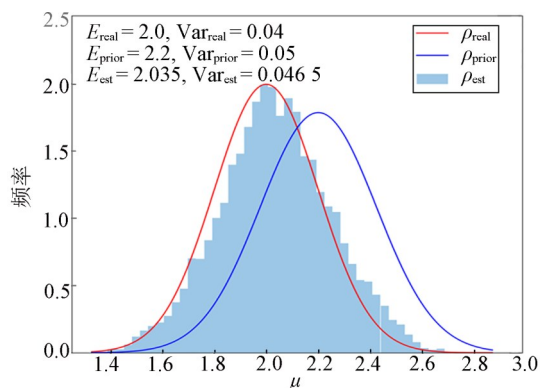


图 1 IAEA-2D 基准题的集成贝叶斯方法结果^[22]

Fig. 1 Integrated Bayesian results of IAEA-2D benchmark problem^[22]

核数据是压水堆模拟的重要输入之一,通过调整核数据的精度可以科学有效地提高压水堆模拟的精度。核数据调整通过积分试验结果或实际运行数据与核数据组合的协方差数据,从而合理推测核数据真实值,并进一步运用于程序确认中。统一贝叶斯推理 (Uniform Bayesian Inference, UBI) 方法是核数据调整的重要方法,该方法通过将先验核数据与积分试验结果统一纳入贝叶斯推理框架,可同时推理得到核数据与计算值的后

验估计。在将 UBI 方法用于海南核电站 I 号与 II 号机组的模拟研究中,调整的核数据对象为 45 群多群数据库中的 ^{235}U 平均裂变中子数,共 45 个值,积分响应为随燃耗变化的临界硼浓度。计算流程如下:

1) 通过协方差数据库 (加工自 ENDF-B/VII.1) 对 ^{235}U 平均裂变中子数抽样 25 次,得到 25 个随机扰动的多群数据库;

2) 利用 NESTOR 软件包与 25 个扰动的多群数据库进行 I 号机组首循环模拟计算,得到所有燃耗步下的临界硼浓度;

3) 利用 I 号机组首循环前 7 步燃耗的临界硼浓度测量值、计算值以及扰动值,对 45 群 ^{235}U 平均裂变中子数进行调整,更新多群核数据库;

4) 利用 NESTOR 软件包与后验多群核数据库对 I 号机组与 II 号机组首循环进行计算,得到后验临界硼浓度。

海南 I 号机组首循环临界硼浓度随燃耗的变化如表 1 所示,可知,临界硼浓度的先验计算值与测量值的偏差在 -30 mg/L ,而后验计算值与测量值的偏差仅仅大约 -10 mg/L ,调整后的多群数据库在临界硼浓度的计算上更加准确。其中,使用 UBI 方法的过程中假设测量偏差为 $\pm 5\text{ mg/L}$,UBI 方法可以在不进行堆芯计算的前提下直接预测后验计算值,7 个临界硼浓度的偏差几乎为零。通过更新多群数据库计算得到后验硼浓度的偏差也几乎在 2 倍测量偏差以内。结果表明,通过调整 ^{235}U 的平均裂变中子数,有效减小了程序计算的临界硼浓度与堆芯实际运行值之间的偏差,充分提高了压水堆模拟的精度^[16-17]。

表 1 海南 I 号机组临界硼浓度

Tab. 1 Critical boron concentration for Hainan No. I unit

燃耗/ ($\text{MWd}\cdot\text{t}^{-1}\text{U}$)	测量硼浓度/ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	先验计算硼 浓度/ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	先验计算值与测 量值偏差/ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	后验计算硼 浓度/ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	后验计算值与测 量值偏差/ ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)
995	889	851	-38	877	-12
1 742	880	846	-34	872	-8
2 433	858	822	-36	846	-12
2 666	838	808	-30	835	-3
3 646	793	762	-31	785	-8
4 313	754	725	-29	750	-4
5 282	692	659	-33	682	-10
6 203	620	594	-26	617	-3
7 027	572	545	-27	568	-4

2.2 物理场重构

除通过调整输入参数提高物理计算精度外,也可直接针对分布式的物理场进行数据同化,得到更准确的物理场分布,特别是用于反应堆运行支持场景。基于数据同化的物理场重构包含的要素如下:(1)测量值,指堆内自给能探测器测量值、堆内热电偶、堆外电离室测量值等可利用的实测值;(2)理论计算值(背景物理场),指基于输入参数由堆芯计算程序计算的功率分布、通量分布等,也可以是温度分布、压力分布等;(3)重构值,指数据同化给出的相比于理论计算值更精确的分布(通常假设测量值比理论计算更为准确可靠)。实际上,在物理场重构方面,有两大类方法:基于背景的物理场重构方法和背景无关的物理场重构方法。

2.2.1 基于背景的物理场重构方法

这类物理场重构方法,在给定的背景(background)物理场分布基础上,通过堆内外探测器的实测值,对背景进行修正或拟合,得到实测堆芯功率分布^[5-6]。背景物理场通常为理论计算分布或前一时刻的实测分布,与当前真实的功率分布存在一定的偏差。这类物理场重构方法主要有插值拟合法、耦合系数法、数据同化法等。

1) 插值拟合法。西屋公司开发的 BEA-CON^[23]系统,其物理场的重构是基于实测和理论计算物理场在实测点的偏差进行样条函数插值。此外,还有早期发展的权重系数法等。

2) 耦合系数法(Coupled Coefficient Methods, CC)。Combustion Engineering 公司开发的耦合系数法 CECOR^[24],计算流程简单且在工程上得到广泛应用。其核心思想是假设理论计算分布与真实分布差别不大,基本能够描述物理场的性状,理论与实际物理场的小量偏差则通过实测结合耦合系数加以修正。Webb 等^[25]对耦合系数法进行了改进,发展出 Lagrange 乘法,其计算思想和计算精度与 CECOR 的差别不大。

3) 数据同化法。数据同化旨在考虑数据时空分布以及观测场和背景场误差的基础上,在数值模型的动态演变过程中科学融合观测数据。

特别地,本研究团队基于 3D-Var 方法发展了具有局部非线性特性的反距离插值方法(Inverse-Distance-based, IDB),在“华龙一号”堆芯三维功率分布重构方面取得了较好效果^[8]。针对“华龙一号”反应堆堆芯功率分布计算进行了建模,

考虑影响功率分布的 2 个主要因素:(1) Bu, 燃料,从寿期初(Beginning of Cycle, BOC)到寿期末(End of Cycle, EOC),单位 MWd/tU;(2) St, R 棒插入步,从 0 到 220 步。功率水平为 100%FP(满功率),其他控制棒全提,硼浓度为临界硼浓度。因此,定义参数 $\mu(g) = (Bu, St) \in G$, 其中 $G = [0, 20\,000] \times [0, 220]$ 。利用中国核动力研究设计院自主研发的堆芯计算软件 CORCA-3D,计算得到参数空间内每种情况下的功率分布 f ,得到功率分布集合 $M = f(\mu(g)) | g \in G$ 。研究考察了几种典型的物理场重构方法,有 IDB、3D-Var 和 CC 方法。选取 $f_{bk}(Bu + \Delta Bu, St + \Delta St)$ 作为背景物理场,利用 IDB、3D-Var 和 CC 对 $f(Bu, St)$ 进行重构,其中, $Bu = 0, St = 0, 1, \dots, 220$ 。图 2 分别为 $(\Delta Bu = 2\,000, \Delta St = 0)$ 、 $(\Delta Bu = 4\,000, \Delta St = 0)$ 和 $(\Delta Bu = 6\,000, \Delta St = 0)$ 时对应的 2 范数误差。

这种情形代表了在理论计算时,控制棒棒位准确,但因为其他参数(如燃料)与真实状态有偏差而引起的背景物理场与真实物理场分布不一致的情况。可以看到, IDB 方法较其他 2 种对比方法在效果上有一定优势,特别是 IDB 省去了对背景协方差矩阵的建模,求解过程更为简单。

2.2.2 背景无关的物理场重构方法

这类物理场重构算法,无需事先给定参考的物理场分布,而是通过计算数据库或直接求解控制方程,结合实测值得到实测功率分布。这类算法主要有最小二乘法、谐波展开法、动态模态分解以及模型降阶数据同化方法等。

1) 约束最小二乘法。Lee 等^[26]发展的最小二乘法,通过求解中子扩散方程与探测器响应方程形成的超定方程组来获得实测通量分布。这种算法须嵌入堆芯扩散计算程序中,仍处于发展阶段,缺乏对该方法鲁棒性的研究,也未在商用堆芯核设计软件中得到应用。

2) 谐波综合法^[27]。该方法利用中子扩散方程高阶谐波作为基函数对堆芯通量分布进行拟合,谐波项系数则通过实测值确定。王常辉等^[28]通过建立谐波数据库实现了谐波综合法在线重构堆芯实时功率分布。这种方法需预先计算好若干参考工况的高阶谐波,前期工作量巨大。该方法最大缺陷是数学理论支撑不足,文献[29]的工作表明,该方法效果略逊于后来发展的模型降阶方法。

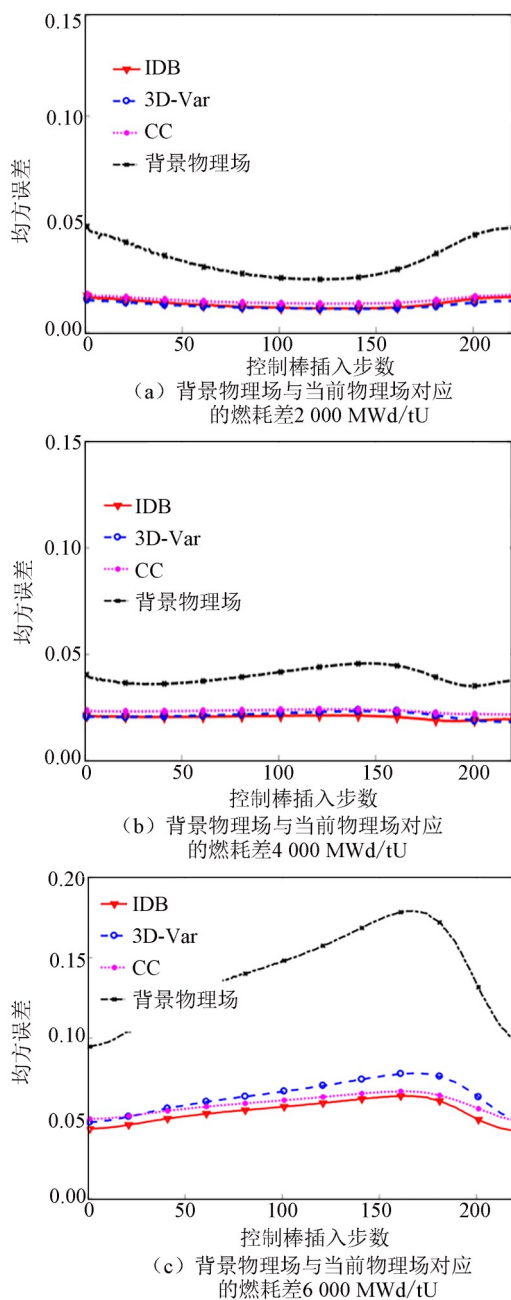


图 2 每个插入步情况下采用不同方法重构的功率误差

Fig. 2 Errors of power reconstructed by different methods in every insertion step

3) 动态模态分解。该方法是一种数据驱动的、无模型的矩阵分解技术,用于使用线性 Koopman 算子概念开发的数值和实验数据^[30]。动态模态分解法的关键是能够提取数据的时空模式特征,它结合了本征正交分解(Proper Orthogonal Decomposition, POD)和傅里叶变换的特征。Abdo 等^[31]应用该方法对核反应堆的同位素演化进行建模, Gong 等^[21]基于该方法提出了一种快速、无模型、易于实现的数据驱动策略来预测氙振荡

过程中的功率分布, Liu 等^[32]在该策略的基础上展开不确定度量化。

上述重构方法发展较早也趋于成熟,受当时计算能力的限制,现在来看相对简单,未融合最新的建模技术。

4) 模型降阶数据同化方法。这类方法的核心思想是通过离线计算数据库,得到反应堆运行状况的降阶模型,将功率分布表示为降阶基函数的线性组合,系数则通过实测值进行在线数据同化拟合得到。这类方法有严格的数学理论支持,其优点是不需要背景物理场,也实现了在线计算的精确和高效,代表着未来发展方向。在这方面, Maday、Argaud、Mula 及本文作者 Gong 等做了大量工作^[21,33-38],将在下一节详细论述。

3 基于模型降阶的数据同化理论

先进的模型降阶技术使得从大规模理论计算数据中读取关键信息成为可能,尤其适用于核反应堆这类复杂的工业系统。对于大多数工业系统而言,蕴藏在理论计算的大数据中的关键特征信息往往十分精简。采用最新发展的模型降阶技术可有效提取特征信息,是数据驱动物理约束建模的典型方法。

常见的模型降阶方法主要包括 POD^[39-40]、本征广义分解(Proper Generalized Decomposition, PGD)^[41-42]、降阶基方法(Reduced Basis Method, RBM)^[43-45]以及其他诸多变种。其中,本征正交分解使用最为广泛,研究最为深入。该方法步骤为:1) 构造待求问题的含参流形;2) 提取含参流形中的主要特征,如通过奇异值分解(Singular Value Decomposition, SVD)方法对全阶模型进行截断,只保留对全阶模型贡献最大的本征函数序列,舍弃贡献极低的本征函数序列,构成含参流形的低维空间正交基;3) 将全阶模型投影到低维空间求解,获得降阶模型。本征广义分解则是基于“分离变量法”的思想,将每个类别的参数用相应的近似函数表示,待求问题的解则表示成各参数相关函数的乘积之和,求和阶数依赖于所求解问题的精度,各阶系数则通过求解全阶问题相关的偏微分方程而得。降阶基方法,则是结合贪婪算法和先验误差指标,通过反复迭代全阶模型和降阶模型,得到满足计算精度要求的低维空间近似和相应的降阶模型。

对于高维物理场, 数据同化需要建模的物理场协方差矩阵维度很高, 极大增加了建模的不确定性和计算成本。特别是在高维空间、多尺度、非线性、非高斯、复杂不确定性及状态量空间相关性等多种因素的综合作用下, 现有的基于背景物理场的数据同化算法的不足日益突出, 基于模型降阶的数据同化方法则是应对上述挑战的重要技术方向。在这个趋势下, 为了进一步增强降阶模型的泛化能力和鲁棒性, 开始在数据同化和模型降阶工作中使用机器学习技术, 以借助机器学习强大的数据处理能力, 提高模型在面对复杂的实际情况时的适应性和准确性^[46]。在核工程领域, 针对广义经验插值法 (Generalized Empirical Interpolation Method, GEIM)^[38,47]、稳定格式的 POD (Stabilized Gappy POD, SGPOD)^[33-34,37]、带模型修正的含参数据同化 PBDW (Parameterized-background Data-weak)^[48-49] 以及结合机器学习的模型降阶^[50-53] 做了充分研究。

3.1 GEIM

GEIM^[38] 方法首先基于控制方程通过高保真建模生成问题在适定参数域内的含参流形 M , 通过贪婪算法学习得到降阶基 $\{q_i\}_{i=1}^n$, 由降阶基生成降阶子空间 V_n , 同时假设所研究物理模型的分布量的主要成分均可由 V_n 中的元素近似, 且达到一定的精度。即, 对于任何参数 $\mu \in P$, 物理场 $u(\mu)$ 有如下近似表示:

$$u(\mu) \approx u_n(\mu) = \sum_{i=1}^n \alpha_i(\mu) q_i \quad (3)$$

式中: q_i 是降价基, 为了求得这些系数 $\{\alpha_i(\mu)\}$, 传统的模型降阶方法是通过对控制方程对应的弱形式在 V_n 子空间投影计算而得 (即 POD 或 RBM 方法), 但前提是参数 μ 已知。对于动态过程, 参数往往是变化的, 因此, 求解上述问题的输入参数 μ 与实际对应的参数有误差, 甚至 μ 是未知量。GEIM 则是通过耦合实测值来求解式 (3) 中的系数 $\{\alpha_i(\mu)\}_{i=1}^n$ 。过程如下: 设探测器 $i (i = 1, 2, \dots, m)$ 对应的响应函数 l_i , 则物理场 $u(\mu)$ 对应该探测器的实测值可表示为 $y_i = l_i(\mu)$, 在有噪声的情况下, 上式的向量形式为

$$Y^o = l(u) + e$$

式中: e 是噪声向量, 协方差为 $D = E(ee^T)$ 。

对于任何参数 $\mu \in P$ (P 为参数可行域), GEIM 通过下述关系式求解系数:

$$l_i(u) = l_i(u_n) = l_i\left(\sum_{i=1}^n \alpha_i(\mu) q_i\right), \quad i = 1, 2, \dots, m$$

在实测值数目多于待求系数数目以及有测量误差的情况下, Gong 等^[36] 提出了改进 GEIM 方法 CS-GEIM (Constrained Stabilized GEIM), 并基于 IAEA-2D 基准题给出了很好的结果。图 3 给出了在计算基准题的中子通量时, 不同插值函数的数目 m 与测量次数 n 的比值下, 该方法与 GEIM 方法的误差对比结果。

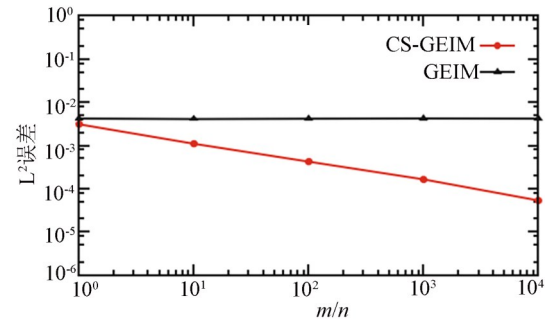


图 3 不同 m/n 比值的 CS-GEIM 和 GEIM 误差对比^[36]

Fig. 3 Comparison of CS-GEIM and GEIM errors at different m/n ratios^[36]

3.2 SGPOD

相比于 GEIM, SGPOD 则是采用了 POD 基函数^[33-34, 37]。实际上, 式 (3) 中的基函数可由 POD、RBM 或其他任何方法获得。数值结果指出, GEIM、RBM 或 POD 等方法求得的基函数, 在数据同化的时候, 会发生随着基函数维度增加出现数值结果不稳定和噪声放大的现象。进一步的工作^[33-34, 37] 则给出了稳定的数据同化方案

$$\begin{cases} u^d(Y^o) = \sum_{i=1}^n \alpha_i(\mu) q_i(x) = \Phi_n \alpha \\ \text{s.t. } \arg \min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} (M\alpha - Y^o)^T D^{-1} (M\alpha - Y^o) + \zeta \alpha^T C^{-1} \alpha \end{cases}$$

式中: $\Phi_n = (q_1, q_2, \dots, q_n)$; $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)^T$; $M \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $M_{ij} = l_i(q_j)$; ζ 为正则化参数; 对于 GEIM 或 RBM 方法的基函数 Φ_n , $C = \text{diag}((\alpha_1^{\max})^2, (\alpha_2^{\max})^2, \dots, (\alpha_n^{\max})^2)$, $\alpha_i^{\max} = \arg \max_{u \in M} \alpha_i^X(u)$, X 为 GEIM 或 RBM 方法求得的系数; 若 Φ_n 来自 POD 方法, 则 $\alpha_i = \sigma_i$ 为基 q_i 对应的奇异值。上式的解为

$$\alpha^d = [M^T D^{-1} M + \zeta C^{-1}]^{-1} M^T D^{-1} Y^o$$

仍然以 2.2 节的功率重构为例, 采用 SGPOD 方法进行功率重构, 并与 3D-Var 和 CC 法进行比较 (BOC), $Bu = 0$, SGPOD 采用 20 维基函数, 高斯噪声方差为 $\sigma = 10^{-2}$, 3D-Var 和 CC 对应的背

景物物理场 f_{BK} , $\Delta Bu = 8000$, $\Delta St = 0$, 相应的误差见图 4。图中还给出了背景物理场的偏差。

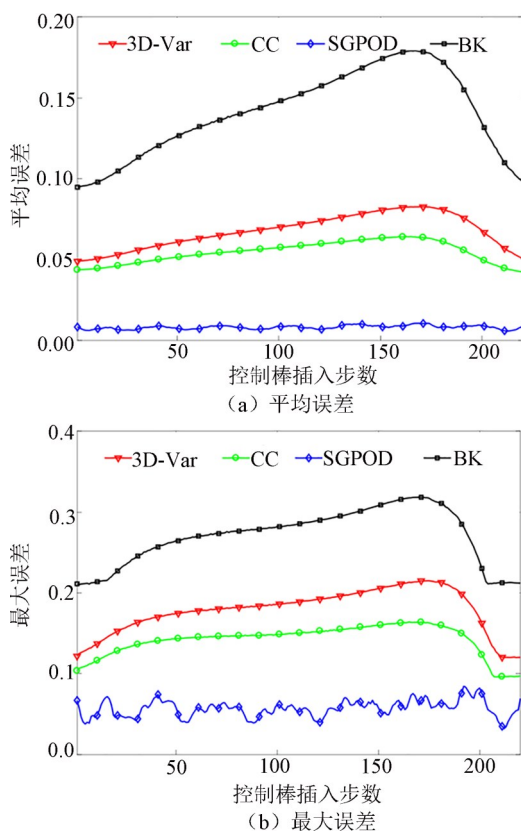


图 4 不同功率分布重构方法对应的相对误差随 R 棒插入步的变化情况^[34]

Fig. 4 Variations of relative errors of power reconstructed by different method along with insertion steps of R rods^[34]

可以发现：当背景物理场误差较大时 ($\Delta Bu = 8000$, $\Delta St = 0$), 即背景物理场与当前物理场燃料相差 8000 MWd/tU , 传统的数据同化方法会带来较大误差; SGPOD 则体现了背景物理场无关的特性。基于模型降阶的数据同化在核工程, 尤其是“华龙一号”上的系统性分析和应用可参见文献[33–34]。

3.3 基于机器学习的模型降阶

随着机器学习技术的兴起, 该技术在分析和预测复杂数据时展现出的强大能力受到各行各业的广泛关注, 大量工作开始引入机器学习方法到数据同化及模型降阶中, 以应对单独传统模型遇到的各种挑战。结合机器学习的数据同化研究中, Yang 等^[54]提出一种数据支撑的内嵌物理知识神经网络 (Data-enabled Physics-informed Neural Network, DEPINN), 能在使用较少观测信息的情

况下, 在求解中子扩散方程时得到满足工程精度要求的特征值。为了增强 DEPINN 的鲁棒性, Yang 等^[55]使用一个区间损失函数来处理有噪声的先验数据, 以促进 DEPINN 的工程应用。同时, 机器学习技术的引入, 促进了基于模型降阶的反问题求解的研究^[50, 56], 是反应堆运行数字孪生 (Reactor Operation Digital Twin, RODT) 的基础之一^[51]。RODT 能够实现反应堆全生命周期运行的实时预测、优化、监测、控制和改进决策, 最终能够进一步提高核能的经济性和安全性。

为了提高降阶模型预测未知参数集时的泛化能力, 基于传统模型降阶技术 (如 POD) 融合神经网络^[52–53]、决策树^[57–58]等机器学习方法构建降阶模型受到青睐。一种简易的结合过程是:

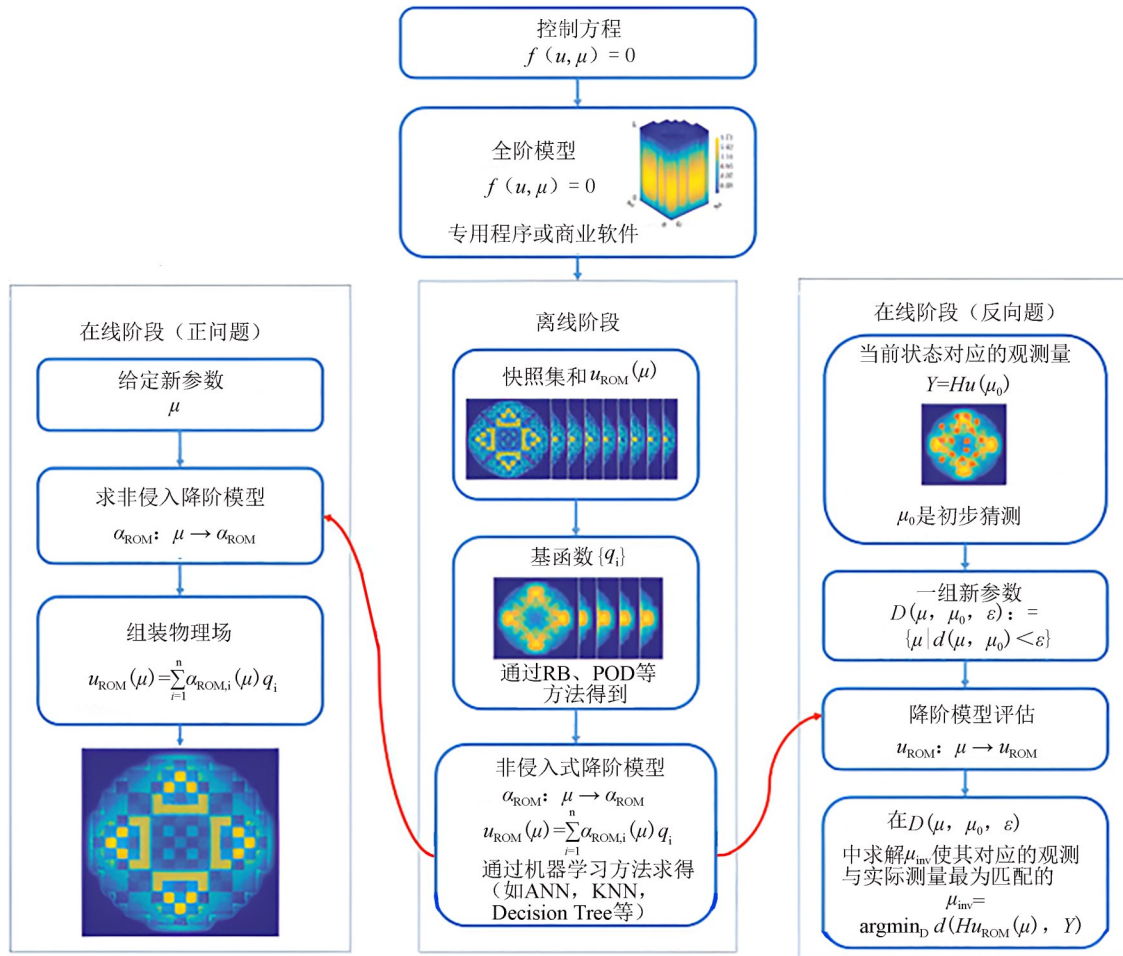
- 1) 构造待求问题的含参流形并提取含参流形中的主要特征, 得到降阶基;
- 2) 针对不同的参数集, 计算降阶基对应的系数 α , 构造机器学习的训练和测试样本集;
- 3) 使用训练样本集迭代训练机器学习模型, 即求解式 (4), 得到模型输出的基系数 $\bar{\alpha}$

$$\begin{cases} u^d(Y^o) = \sum_{i=1}^n \bar{\alpha}_i(\mu) q_i(x) = \Phi_n \bar{\alpha} \\ \text{s.t. } \arg \min_{\bar{\alpha} \in \mathbb{R}^n} \|\bar{\alpha} - \alpha\| \end{cases} \quad (4)$$

- 4) 使用测试样本集计算系数 $\bar{\alpha}$, 并采取某种度量评测模型精度。

基于 POD 结合全连接神经网络 (Full Connected Neural Network, FCNN) 的降阶模型技术, Kang 等^[52]进行了流场的模拟, 用于研究燃料棒束内冷却剂流动和传热特性。Li 等^[53]提出一种基于贝叶斯神经网络的 RODT 方法来解决反应堆堆芯三维功率场估计的反问题。本文作者^[57]采用 SVD 自编码器降阶模型结合 K-最邻近和决策树方法, 在不修改原仿真模型、非侵入式的情况下, 模拟受输入参数影响的两群中子扩散方程控制的堆芯, 计算流程如图 5 所示。

本团队^[58]在该正向计算的工作基础上, 基于广义潜同化方法设计能够根据观测数据进行参数估计的反问题模型。同时, 首次提出采用微分进化算法来升级逆求解器, 并提出了考虑同化噪声观测的 RODT 的系统不确定性量化^[51]。最后, 在不同的工作温度、控制棒步数、功率水平和反应堆堆芯入口温度下, 通过华龙一号的一个运行循环, 对所提出的 RODT 的准确性和有效性进行测试。

图 5 数据支持的物理信息数字孪生的机器学习降阶建模流程^[87]Fig. 5 Flow chart of the machine learning reduced-order model for the data-enabled physics-informed digital twin^[87]

试, 证实了该方法在在线参数识别和状态估计方面的实际工程应用潜力。

此外, PBDW 法^[48-49]在声学、气候学及核工业等领域也取得了应用。相比于 GEIM、SGPOD, PBDW 具备修正模型误差的能力。有关 PBDW 在反应堆物理领域的研究见文献[49, 59]。

4 数据同化中的不确定度分析

模型降阶技术大大降低了数据同化建模的计算复杂度, 节省了大量计算成本, 同时具有特别高的计算精度。但由于背景状态误差 e_b 和观测误差 e_o 的存在, 仅仅能保证模型降阶结果拟合观测信息 y_o 的精度, 并不能确定与 $G(x_i)$ 或 $G(x_b)$ 之间的误差。因此, 需要展开不确定度分析和参数敏感度分析, 进行不确定度量化, 以评估计算结果的可靠性^[60-61]。在高保真数值反应堆中展开不确定度量化, 能够最大限度减少数值模拟方法中假

设与近似带来的误差, 降低运行安全裕量, 对于核数据的评价调整和核反应堆的安全分析、优化设计等方面均具有非常重要的应用价值^[62-63]。不确定度分析的方法主要分为基于确定论的方法和基于统计学的方法^[64-66]。

基于确定论的方法主要采用“三明治准则”(Sandwich Rule)^[67], 基于协方差矩阵和敏感性系数可以确定响应参数的计算不确定性:

$$C_{y,y} = \sqrt{S_{x,y} C_{x,x} S_{x,y}^T}$$

式中: $C_{y,y}$ 为响应参数 y 的计算不确定性; $C_{x,x}$ 为输入参数 x 的协方差矩阵; $S_{x,y}$ 是响应参数 y 相对于输入参数 x 的敏感性。

使用基于确定论的方法, Qin 等^[68]对热管冷却反应堆的灵敏度与不确定度进行了分析; Makhoul 等^[69]对研究堆 TRIGA Mark II 进行建模, 并评估了有效增值因子的灵敏度; 曹良志等^[63]使用确定论和统计抽样的方法, 基于高保真数值反应堆 NECP-X 程序量化了各类核参数的协方差在

堆芯稳态和瞬态分析中的不确定度传递。

基于统计学方法的不确定性量化的关键在于如何生成输入参数样本、高效抽样以及量化统计波动。其计算流程为：1) 根据输入参数的空间分布进行采样，形成参数样本；2) 使用仿真模型计算不同的样本，收集每个样本的响应；3) 进行统计学计算，分析响应的不确定性和相关信息。

基于统计学方法的不确定性量化的应用案例如下：梁鑫源等^[70]将 POD 方法与经典的求解偏微分方程的 Galerkin 投影法结合，针对二维两群中子扩散问题构建物理驱动的降阶模型，对 POD-Galerkin 降阶模型用于抽样统计不确定性分析进行了研究；Dhulipala 等^[71]针对 TRISO 燃料，基于大规模可并行马尔可夫链蒙特卡罗采样器的贝叶斯不确定性量化方法，对模型参数、模型不充分和实验测量噪声引起的不确定性进行量化；本团队^[72]进行了华龙一号线功率密度 (Linear Power Density, LPD) 在线监测系统误差分析，通过研究华龙一号 LPD 在线监测系统的总体不确定度的分析方法，将系统的各部分误差通过统计方法综合起来，量化系统的总体误差限值，分析流程如图 6 所示。

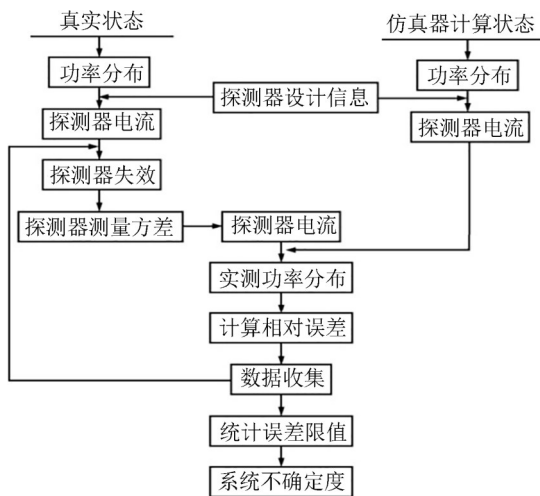


图 6 华龙一号 LPD 在线监测系统统计误差分析流程^[73]

Fig. 6 Flow chart of statistical error analysis for HPR 1000 online monitoring system^[73]

为了减少代码开发，较多不确定度量化工作基于桑迪亚国家实验室开发的 Dakota 工具包^[74]展开，其提供了一套不确定性量化和优化算法，目前在核反应堆领域得到了广泛应用^[75-76]。美国 Argonne 国家实验室^[77]验证了在 SAS4A/SASSYS-1 中结合 Dakota 工具包进行不确定度量化的能力，

拓展了原程序的不确定度分析能力。美国核能高级建模与仿真项目 NEAMS 把 Dakota 工具包整合到 NEAMS 工作台中，并对 Nek5000 代码计算反应堆物理领域的流体流动时的不确定性进行了表征^[78]。中广核研究院有限公司许多挺等^[79]使用 Dakota 中蒙特卡罗与拉丁超立方的非参数抽样方法，分析了燃料棒设计验证的不确定度。西安交通大学韩睿钰等^[80]基于 Dakota 和自编程热管反应堆单通道热工分析程序 HEART，对静默式热管反应堆 NUSTER 稳态热工水力特性进行了不确定性分析。

进行不确定度分析需要大量的样本模拟数据支撑，具有很大的算力需求，此时模型降阶能发挥降低算力要求的优势。依托模型降阶技术，Khuwaieh 等^[81]开发了 ROMUSE (Reduced Order Modeling based Uncertainty/Sensitivity Estimator) 工具包，能够基于模型降阶技术进行不确定性分析和灵敏度估计；Elzohery 等^[82]应用 POD-Galerkin 投影建立了一种降阶模型 (Reduced Order Model, ROM)，以较低的计算成本逼近多群瞬态中子扩散方程的解并进行不确定度分析，通过对比全阶与 ROM 计算结果的统计误差，验证了降阶模型应用于不确定性分析的可行性，同时表明包括投影在内的 ROM 降阶模型用时比全阶模型的用时快大约 4 倍。夏凡^[83]基于深度高斯过程的高保真深度学习代理模型进行反应堆不确定性分析，降阶后的模型能保证计算精度，同时很大程度上提高了计算效率；梁鑫源等^[84]进行了基于降阶模型的中子扩散特征值问题的不确定性研究，结果表明即使将构造降阶模型所需的全阶模型计算时间考虑在内，降阶模型的分析时间依然仅为全阶模型的 11.48%。随着对精度要求的提高，模型复杂度变高，计算时间增长，基于模型降阶技术进行不确定度量化将会成为进行不确定分析和量化的主流方法。

5 结语

数据同化方法的中心思想是在考虑数据时空分布和对模型、观测做出误差估计的基础上，在数值模型的动态运行过程中融合新的观测数据的方法，其目的是生成具有时间、空间和物理一致性的数据集。值得注意的是，随着高保真建模和数值计算技术及数据科学的发展，基于实测数据

的数据驱动建模方式建立了从设计到验证的闭环, 促进了高效设计和优化设计的发展, 开启了基于模型和数据驱动的新范式, 为核反应堆数据挖掘、数字孪生和人工智能创造了条件。

参考文献:

- [1] PARK S K, XU L. Data assimilation for atmospheric, oceanic and hydrologic applications (Volume 2) [M]. Berlin Heidelberg: Springer Publishing Company, 2013.
- [2] FLETCHER S J. Data assimilation for the geosciences: From theory to application[M]. Birmingham, UK: Elsevier, 2017.
- [3] BRYSON J W, LEE J C, HASSBERGER J A. Optimal flux map generation through parameter estimation techniques[J]. Nuclear Science and Engineering, 1993, 114(3): 238-251.
- [4] ASCH M, BOCQUET M, NODET M. Data assimilation: Methods, algorithms, and applications [M]. Philadelphia, PA, USA: SIAM, 2016: 71-100.
- [5] ARGAUD J P, BOURIQUET B, ERHARD P, et al. Data assimilation in nuclear power plant core[C]//Progress in Industrial Mathematics at ECMI 2008. Netherlands: Springer, 2010: 401-406.
- [6] BOURIQUET B, ARGAUD J P, ERHARD P, et al. Nuclear core activity reconstruction using heterogeneous instruments with data assimilation[J]. EPJ Nuclear Sciences & Technologies, 2015(1): 1-18.
- [7] 耿小兵, 绪梅, 陈琳. 基于集合四维变分同化的核事故源项反演方法[C]//中国核学会. 中国核科学技术进展报告(第5卷): 中国核学会2017年学术年会论文集第5册(核材料分卷、辐射防护分卷). 北京: 中国科学院大气物理研究所, 2017: 4-5.
- GENG X B, XU M, CHEN L. An inverse emission rate estimation method with PODEn 4D-Var for nuclear emergency response[C]//Progress Report on China Nuclear Science & Technology (Vol.5). Beijing: Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, 2017:4-5.
- [8] GONG H L, YU Y R, LI Q, et al. An inverse-distance-based fitting term for 3D-Var data assimilation in nuclear core simulation[J]. Annals of Nuclear Energy, 2020, 141: 107346.
- [9] 马建文, 秦思娴. 数据同化算法研究现状综述[J]. 地球科学进展, 2012, 27(7): 747-757.
- MA J W, QIN S X. Recent advances and development of data assimilation algorithms[J]. Advances in Earth Science, 2012, 27(7): 747-757.
- [10] GUZZI R. Data assimilation: Mathematical concepts and instructive examples[M]. London, UK: Springer International Publishing, 2016: 61-85.
- [11] CHEN W, YANG D, ZHANG J J, et al. Study of non-intrusive model order reduction of neutron transport problems[J]. Annals of Nuclear Energy, 2021, 162: 108495.
- [12] CLERC T, HÉBERT A, LEROYER H, et al. An advanced computational scheme for the optimization of 2D radial reflector calculations in pressurized water reactors[J]. Nuclear Engineering and Design, 2014, 273: 560-575.
- [13] ARGAUD J P. Assimilation de données dans SALOME et enjeux métiers[J/OL]. (2012-11-20) [2023-01-19]. <http://www.salomeplatform.org>.
- [14] ABDEL-KHALIK H, TURINSKY P, JESSEE M, et al. Uncertainty quantification, sensitivity analysis, and data assimilation for nuclear systems simulation[J]. Nuclear Data Sheets, 2008, 109(12): 2785-2790.
- [15] ALHASSAN E. Nuclear data uncertainty quantification and data assimilation for a leadcooled fast reactor: Using integral experiments for improved accuracy[J]. Acta Universitatis Upsaliensis, 2015(3): 60-61.
- [16] WU Q, PENG X, YU Y, et al. Bayesian inference of multi-group nuclear data by Monte-Carlo sampling method[J]. Annals of Nuclear Energy, 2021(3): 108453.
- [17] WU Q, PENG X J, YU Y R, et al. Nuclear cross-section adjustment based on the 2-D / 1-D transport code KY-ADJ-ScienceDirect[J]. Annals of Nuclear Energy, 2020, 13(3): 107068.
- [18] ZHAO X, AZARM S, BALACHANDRAN B. Online data-driven prediction of spatiotemporal system behavior using high-fidelity simulations and sparse sensor measurements[J]. Journal of Mechanical Design, 2021, 143(2): 021701.
- [19] LGUENSAT R, VIET P H, SUN M, et al. Data-driven interpolation of sea level anomalies using analog data assimilation[J]. Remote Sensing, 2019, 11(7): 858.
- [20] 龚禾林, 李庆, 于颖锐, 等. 基于数据驱动和物理约束建模在反应堆物理中的应用[J]. 科技信息, 2020, 610: 307-308.
- GONG H L, LI Q, YU Y Y, et al. Application of data-driven and physical constraint modeling in reactor physics[J]. Science Technology Information. 2020, 610: 307-308.

- [21] GONG H L, YU Y, PENG X, et al. A data-driven strategy for xenon dynamical forecasting using dynamic mode decomposition[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2020, 149: 10782.
- [22] ZENG J Q, ZHANG H Y, GONG H L, et al. Ensemble Bayesian method for parameter distribution inference: Application to reactor physics[J]. *Nuclear Science and Techniques*, 2023, 34(12): 199.
- [23] BOYD W A, MILLER R W. The beacon on-line core monitoring system: functional upgrades and applications[C]/Proc Specialists' Meeting Incore Instrumentation and Core Assessment. Washington D.C., USA: American Nuclear Society, 1996: 14-17.
- [24] CHARLES F K. Continuing advancements in in-core power distribution measurement methods using SIMULATE-3 AND CECOR 3.4[J]. *Nuclear Science and Engineering*, 1995, 121(1): 57-66.
- [25] WEBB R J, BRITTINGHAM J C. Comparison of CECOR algorithm to Lagrange multiplier method to estimate reactor power distributions[J]. *Nuclear technology*, 2000, 132(2): 206-213.
- [26] LEE K, KIM C H. The least-squares method for three-dimensional core power distribution monitoring in pressurized water reactors[J]. *Nuclear science and engineering*, 2003, 143(3): 268-280.
- [27] 李富. 重构堆芯通量分布的谐波综合法及其诊断应用[D]. 北京: 清华大学, 1994.
- LI F. Harmonic synthesis method for reconstructing core flux distribution and its diagnostic application[D]. Beijing: Tsinghua University. 1994.
- [28] 王常辉, 吴宏春, 曹良志. 在线监测压水堆堆芯功率分布的谐波展开法[J]. *核动力工程*, 2011, 31(S2): 97-101.
- WANG C H, WU H C, CAO L Z. Harmonics expansion method for on-line monitoring of PWR power distribution[J]. *Nuclear Power Engineering*, 2011, 31(S2): 97-101.
- [29] SARTORI A. Comparison of a modal method and a proper orthogonal decomposition approach for multi-group time-dependent reactor spatial kinetics[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2014, 71: 217-229.
- [30] SCHMID P, SESTERHENN J. Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2008, 656: 5-28.
- [31] ABDO M, ELZOHERY R, ROBERTS V. Modeling isotopic evolution with surrogates based on dynamic mode decomposition[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2019, 129(7): 280-288.
- [32] LIU J, GONG H L, WANG Z, et al. Uncertainty analysis of dynamic mode decomposition for xenon dynamic forecasting[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2023, 194: 110106.
- [33] GONG H L, CHEN Z, LI Q, et al. Optimal and fast field reconstruction with reduced basis limited observations: Application to reactor core online monitoring[J]. *Nuclear Engineering and Design*, 2021, 377C: 111113.
- [34] GONG H L, YU Y R, LI Q. Reactor power distribution detection and estimation via a stabilized gappy proper orthogonal decomposition method[J]. *Nuclear Engineering and Design*, 2020, 370C: 110833.
- [35] ARGAUD J P, BOUTIQUET B, GONG H, et al. Sensor placement in nuclear reactors based on the generalized empirical interpolation method[J]. *Journal of Computational Physics*, 2018, 363: 354-370.
- [36] ARGAUD J P, BOURIQUET B, GONG H, et al. Stabilization of (G)EIM in presence of measurement noise: Application to nuclear reactor physics[C]//BITTENCOURT M L, DUMONT N A, HESTHAVEN J S. Spectral and High Order Methods for Partial Differential Equations ICOSAHOM 2016. Cham: Springer International Publishing, 2017: 133-145.
- [37] GONG H L, LI Q, YU Y R, et al. A new data-driven approach for reconstruction with noisy data and physical constraints: Application to nuclear reactor physics[C]//ICAPP 2019 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants. Washington D. C., USA: American Nuclear Society, 2019.
- [38] MADAY Y, MULA O. A generalized empirical interpolation method: Application of reduced basis techniques to data assimilation[M]. BREIII F, COLLI-FRANZONE P, GIANAZZAU, et al. Analysis and Numerics of Partial Differential Equations. Netherlands: Springer, 2013: 221-235.
- [39] AUDOUZE C, DEVUYST F, NAIR P. Reduced-order modeling of parameterized PDEs using time-space-parameter principal component analysis[J]. *Int J Numer Methods Eng*, 2009, 80(8), 1025-1057.
- [40] CORDIER L, MAJD B A EL, FAVIER J. Calibration of pod reduced order models using tikhonov regularization[J]. *Int J Numer Methods Fluids*, 2010, 63(2), 269-296.
- [41] CHINESTA F, LADEVEZE P, CUETO E. A short review on model order reduction based on proper generalized decomposition[J]. *Arch Comput Methods Eng*, 2011, 18(4): 395-404.
- [42] GHNATIOS C, MASSON F, HUERTA A, et al.

- Proper generalized decomposition based dynamic data-driven control of thermal processes[J]. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2012, 213: 29-41.
- [43] HOANG K, KERFRIDEN P, BORDAS S. A fast, certified and tuning free two-field reduced basis method for the metamodeling of affinely-parametrised elasticity problems[J]. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2016, 298: 121-158.
- [44] Peterson J S. The reduced basis method for incompressible viscous flow calculations[J]. *SIAM J Sci Stat Comput*, 1989, 10(4): 777-786.
- [45] GREPL M A, MADAY V, NGUYEN N C, et al. Efficient reduced-basis treatment of nonaffine and non-linear partial differential equations[J]. *M2AN (Math. Model. Numer. Anal)*, 2007, 41(3): 575-605.
- [46] HUANG Q, PENG S, Deng J, et al. A review of the application of artificial intelligence to nuclear reactors: Where we are and what's next[J]. *Heliyon*, 2023, 9(3): E13883.
- [47] GONG H L, CHEN W, ZHANG C Y, et al. Fast solution of neutron diffusion problem with movement of control rods[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2020, 149: 107814.
- [48] MADAY Y, PATERA A T, PENN J D, et al. A parameterized-background data-weak approach to variational data assimilation: Formulation, analysis, and application to acoustics[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2015, 102(5): 933-965.
- [49] GONG H L, MADAY Y, MULA O, et al. PB-DW method for state estimation: Error analysis for noisy data and nonlinear formulation[J/OL]. (2019-06-03) [2023-07-26] <http://arxiv.org/abs/1906.00810>. v1.
- [50] 龙家雨, 宋美琪, 柴翔, 等. 基于聚类 and 随机搜索优化的核反应堆数字孪生参数反演模型[J/OL]. *原子能科学技术*: 1-10 [2024-01-23]. <http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.2044.TL.20230706.1556.003.html>.
- LONG J Y, SONG M Q, CHAI X, et al. Parameter inversion method of nuclear reactor digital twin based on clustering and random search optimization[J/OL]. *Atomic Energy Science and Technology*: 1-10 [2023-07-23] <http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.2044.TL.20230706.1556.003.html>.
- [51] GONG H, ZHU T, WAN Y, et al. Parameter identification and state estimation for nuclear reactor operation digital twin[J]. *Annals of nuclear energy*, 2023, 180: 109497.
- [52] KANG H L, TIAN Z F, CHEN G L, et al. Application of POD reduced-order algorithm on data-driven modeling of rod bundle[J]. *Nuclear Engineering and Technology*, 2022, 54(1): 36-48.
- [53] LI W, CAI J, LU H, et al. Constructing a probability digital twin for reactor core with Bayesian network and reduced-order model[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2023, 193: 110016.
- [54] YANG Y, GONG H L, ZHANG S, et al. A data-enabled physics-informed neural network with comprehensive numerical study on solving neutron diffusion eigenvalue problems[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2023, 183: 109656.
- [55] YANG Y, GONG H L, HE Q, et al. On the uncertainty analysis of the data-enabled physics-informed neural network for solving neutron diffusion eigenvalue problem[J]. *Nuclear Science and Engineering*, 2023 (1): 1-22.
- [56] 龚禾林, 陈长, 李庆, 等. 基于物理指引和数据增强的反应堆物理运行数字孪生研究[J]. *核动力工程*, 2021, 42(S2): 48-53.
- GONG H L, CHEN Z, LI Q, et al. Study on a data-enabled physics-informed reactor physics operational digital twin[J]. *Nuclear Power Engineering*, 2021, 42(S2): 48-53.
- [57] GONG H L, CHENG S, CHEN Z, et al. Data-enabled physics-informed machine learning for reduced-order modeling digital twin: Application to Nuclear Reactor Physics[J]. *Nuclear Science and Engineering*, 2022, 196(6): 668-693.
- [58] GONG H L, CHENG S, CHEN Z, et al. An efficient digital twin based on machine learning SVD auto-encoder and generalised latent assimilation for nuclear reactor physics[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2022, 179: 109431.
- [59] GONG H L. Data assimilation with reduced basis and noisy measurement: Applications to nuclear reactor cores[D]. Paris: Sorbonne Université, 2018: 14-34.
- [60] AVRAMOVA M N, IVANOV K N. Verification, validation and uncertainty quantification in multi-physics modeling for nuclear reactor design and safety analysis[J]. *Progress in Nuclear Energy*, 2010, 52(7): 601-614.
- [61] BRUMM S, GABRIELLI F, SANCHEZ-ESPINOSA V, et al. Uncertainty quantification for severe-accident reactor modelling: Setup and first results of the Horizon-2020 project MUSA[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2023, 191: 109919.
- [62] 吴宏春, 刘宙宇, 周欣宇, 等. 数值反应堆的研究

- 现状与发展建议[J]. 原子能科学技术, 2022, 56(2): 193-212.
- WU H C, LIU Z Y, ZHOU X Y, et al. Research status and development suggestion of numerical reactor[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2022, 56(2): 193-212.
- [63] 曹良志, 邹晓阳, 刘宙宇, 等. 高保真数值核反应堆不确定度量化方法研究进展[J]. 核动力工程, 2021, 42(2): 1-15.
- CAO L Z, ZOU X Y, LIU Z Y, et al. Research Progress of uncertainty quantification methods for high fidelity numerical nuclear reactor[J]. Nuclear Power Engineering, 2021, 42(2): 1-15.
- [64] DU X, QIAO L, LI X, et al. Uncertainty analysis of the China experimental fast reactor start-up tests based on refined calculation results[J]. Annals of Nuclear Energy, 2023, 193: 0306-4549.
- [65] QIU Z, YU H, XIONG Q, et al. Uncertainty and sensitivity analysis of the DVI line break loss of coolant accident for small modular reactor[J]. Progress in Nuclear Energy, 2023, 157: 104575.
- [66] 郝琛, 赵强, 李富, 等. 先进压水堆燃料组件计算不确定性分析[J]. 核动力工程, 2016, 37(3): 173-180.
- HAO C, ZHAO Q, LI F, et al. Uncertainty analysis of advanced pressurized water reactor fuel assembly[J]. Nuclear Power Engineering, 2016, 37(3): 173-180.
- [67] CACUCI D, IONESCU-BUJOR M. Sensitivity and uncertainty analysis, data assimilation, and predictive best estimate model calibration[M]. Netherland: Springer, 2010: 1913-2051.
- [68] QIN K, YANG B, LIU Y, et al. Uncertainty quantification and target accuracy assessment of nuclear data to effective neutron multiplication factor of heat pipe cooled reactor[J]. Annals of Nuclear Energy, 2023, 190: 109866.
- [69] MAKHLOUL M, BOUKHAL V, CHAKIR E, et al. Sensitivity and uncertainty quantification of neutron integral data in the TRIGA Mark II research reactor[J]. Nuclear Engineering and Technology, 2021, 54(2): 523-531.
- [70] 梁鑫源, 王毅箴, 郝琛. 基于降阶模型的中子扩散特征值问题的不确定性分析研究[J]. 原子能科学技术, 2023, 57(8): 1584-1591.
- LIANG X Y, WANG Y Z, HAO C. Uncertainty analysis of neutron eigenvalue problem based on reduced-order model[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2023, 57(8): 1584-1591.
- [71] DHULIPALA S, AYSENUR T, CHE Y, et al. Bayesian uncertainty quantification of tristructural isotropic particle fuel silver release: Decomposing model inadequacy plus experimental noise and parametric uncertainties[J]. Journal of Nuclear Materials, 2024, 588: 154790.
- [72] 张知竹, 廖鸿宽, 李庆, 等. 华龙一号 LPD 在线监测系统误差分析[J]. 核动力工程, 2020, 41(2): 11-15.
- ZHANG Z Z, LIAO H K, LI Q, et al. Error analysis of LPD on-line monitoring system in HPR 1000[J]. Nuclear Power Engineering, 2020, 41(2): 11-15.
- [73] 龚禾林. 自给能式堆芯功率分布在线监测程序物理模型研究[D]. 成都: 中国核动力研究设计院, 2013: 15-53.
- GONG H L. Research on physical model of power distribution online monitoring software based on self powered neutron detectors[D]. Chengdu: Nuclear Power Institute of China, 2013: 15-53.
- [74] ADAMS B, BOHNHOFF W, DALBEY K, et al. Dakota, A multilevel parallel object-oriented framework for design optimization, parameter estimation, uncertainty quantification, and sensitivity analysis: Version 6.13 User's Manual[R]. Washington: Office of Scientific and Technical Information, U. S. Department of Energy, 2020.
- [75] VAIDYA U. Uncertainty & sensitivity analysis of nuclear fuel using transuranus & dakota[D]. Stockholm: KTH Royal Institute of Technology, 2021: 48-49.
- [76] AVRAMOVA M, ABARCA A, HOU J, et al. Innovations in multi-physics methods development, validation, and uncertainty quantification[J]. Journal of Nuclear Engineering, 2021(1): 44-56.
- [77] SWILER L, LEFEBVRE R, LANGLEY B, et al. The NEAMS Workbench and Dakota: Providing an environment for uncertainty analyses[J]. Transactions of the American Nuclear Society, 2018, 118(96): 975-978.
- [78] ZHANG G, BRUNETT A J, SUMNER T, et al. Dakota-SAS4A / SASSYS-1 coupling for uncertainty quantification and optimization analysis[J]. 2017.
- [79] 许多挺, 金鑫, 卫小艳, 等. 基于 Dakota 的燃料棒设计验证不确定度研究[J]. 强激光与粒子束, 2022, 34(2): 74-80.
- XU D T, JIN X, WEI X Y, et al. Uncertainty research of fuel rod design verification based on Dakota[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2022, 34(2): 74-80.

- [80] 韩睿钰, 王成龙, 郭凯伦, 等. 静默式热管反应堆热工水力特性不确定性分析[J]. 原子能科学技术, 2023, 57(5): 998-1006.
- HAN R Y, WANG C L, GUO K L, et al. Uncertainty analysis of thermal-hydraulic characteristics of silent heat pipe cooled reactor[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2023, 57(5): 998-1006.
- [81] KHUWAIEH B, WILLIAMS B, TURINSKY P. ROMUSE: Reduced order modeling based uncertainty/sensitivity estimator for reactor core simulators[J]. Transactions of the American Nuclear Society, 2017, 117: 1448-1451.
- [82] ELZOHERY R, ROBERTS J. Modeling neutronic transients with Galerkin projection onto a greedy-sampled, POD subspace[J]. Annals of Nuclear Energy, 2021, 162: 108487.
- [83] 夏凡. 基于深度学习的反应堆核设计软件不确定性分析方法研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工程大学, 2022: 65-66.
- XIA F. Uncertainty analysis method of reactor nuclear design software based on deep learning[D]. Harbin: Harbin Engineering University, 2022: 65-66.
- [84] 梁鑫源, 王毅箴, 郝琛. 基于降阶模型的中子扩散特征值问题的不确定性分析研究[J]. 原子能科学技术, 2023, 57(8): 1584-1591.
- LIANG X Y, WANG Y J, HAO C. Uncertainty analysis of neutron diffusion eigenvalue problem based on reduced-order model[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2023, 57(8): 1584-1591.

通信作者及其研究团队介绍

龚禾林, 男, 1987年9月出生, 上海交通大学副教授, 博士生导师, 中国核动力研究设计院高级工程师, 法国索邦大学数学博士, 长期从事工程科学计算与数字孪生和人工智能研究。

面向国家先进核动力技术重大战略需求、面向下一代先进核能反应堆技术前沿, 团队致力于发展反应堆实时数字孪生和智能支持技术, 围绕“算得准、算得快”系统性开展理论建模、数值分析和专用软件开发技术研究, 开展模型降阶和数据同化耦合的先进建模技术研究、先进反应堆运行智能支持技术研究等, 从基础理论和工程应用两个维度为我国核动力装置运行灵活性、机动性以及“华龙一号”等国家重大核能工程安全性、经济性和数字化、智能化提供了支撑。

近5年, 主持及参与国家自然科学基金、上海市自然科学基金、国防科技工业核动力技术创新中心基金、核反应堆系统设计技术国家级重点实验室课题、科工局国防基础科研、核能开发科研项目、中核集团重点科技专项等各渠道课题多项。在 *Journal of Computational Physics*、*Communications in Computational Physics*、*Nuclear Science and Techniques*、*Annals of Nuclear Energy*、*Nuclear Science and Engineering*、*Nuclear Engineering and Design* 等国内外顶级期刊和计算数学领域、核能领域国际会议 ICOSAHOM、ICAPP、PHYSOR、M&C 等共发表和录用论文 30 余篇, 提交国防科技报告 4 篇; 获得国家发明专利授权 12 项, 受理 10 项; 获得四川省科技进步二等奖 1 项, 中国核能行业协会科学技术二等奖 1 项, 中国专利优秀奖 1 项。

