

基于机器学习的燃料棒温度分布代理模型构建方法研究

刘振海, 齐飞鹏, 周毅, 李垣明, 李文杰, 曾未, 辛勇, 王浩煜, 马超

Research on Construction Method of a Machine Learning-Based Fuel Rod Temperature Distribution Surrogate Model

Liu Zhenhai, Qi Feipeng, Zhou Yi, Li Yuanming, Li Wenjie, Zeng Wei, Xin Yong, Wang Haoyu, and Ma Chao

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.13832/j.jnpe.2023.S2.0001>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于局部离群因子和神经网络模型的设备状态在线监测方法研究

Study on Online Monitoring of Equipment Condition Based on Local Outlier Factor and Artificial Neural Networks Model

核动力工程. 2021, 42(3): 160–166

基于时间序列神经网络的蒸汽发生器传热管泄漏程度诊断研究

Diagnosis of Leakage Degree of Steam Generator Tube Based on Time Series Neural Network

核动力工程. 2020, 41(2): 160–167

基于PSO优化神经网络响应面技术的非能动系统可靠性分析

Reliability Analysis of Passive System Based on PSO Optimized Neural Network Response Surface Method

核动力工程. 2018, 39(4): 101–106

基于人工神经网络的RPV材料辐照脆化预测模型研究

Research on Prediction Model of Irradiation Embrittlement of RPV Materials Based on Artificial Neural Network

核动力工程. 2020, 41(6): 92–95

摩擦焊焊缝缺陷超声检测信号特征分析与神经网络模式识别

Characteristic Extraction Based on Wavelet Packet and Pattern Recognition for Ultrasonic Inspection Signals from Defects in FSW Joints Using Artificial Neural Network

核动力工程. 2020, 41(1): 163–166

燃料试样堆内辐照温度设计与实验研究

Design and Experimental Study of Irradiation Temperature in Fuel Specimen

核动力工程. 2018, 39(6): 43–48



关注微信公众号, 获得更多资讯信息

文章编号: 0258-0926(2023)S2-0001-05; DOI:10.13832/j.jnpe.2023.S2.0001

基于机器学习的燃料棒温度分布代理模型构建方法研究

刘振海, 齐飞鹏, 周毅, 李垣明, 李文杰, 曾未,
辛勇, 王浩煜, 马超

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, 成都, 610213

摘要: 为提高大规模燃料棒性能模拟的计算效率, 以燃料棒温度预测为例, 研究了燃料棒温度分布预测代理模型(简称“代理模型”)的构建方法。以燃料棒性能分析程序 COPERNIC 的计算结果作为数据源, 采用 k-means 聚类算法筛选代表性的训练数据, 训练了 4 个全连接前馈神经网络, 分别能够考虑冷却剂流动传热及氧化膜生长影响的包壳外表面温度预测、包壳径向温度分布预测、燃料芯块和包壳间隙变化影响的燃料芯块外表面温度预测、燃料芯块径向温度分布预测。通过这些神经网络的组合, 可以根据输入的燃料棒功率历史快速预测出燃料棒不同时刻的温度分布。数值试验表明: 构建的代理模型相比 COPERNIC 程序计算速度提升约 204 倍, 同时具有较高精度。在整个数据集上, 包壳温度和燃料芯块温度预测的平均偏差分别为 0.07°C、0.44°C。

关键词: 神经网络; 燃料棒温度; 代理模型; 燃料行为

中图分类号: TL333 **文献标志码:** A

Research on Construction Method of a Machine Learning-Based Fuel Rod Temperature Distribution Surrogate Model

Liu Zhenhai, Qi Feipeng, Zhou Yi, Li Yuanming, Li Wenjie, Zeng Wei,
Xin Yong, Wang Haoyu, Ma Chao

Science and Technology on Reactor System Design Technology Laboratory, Nuclear Power Institute of China, Chengdu, 610213, China

Abstract: In order to improve the computational efficiency of large-scale fuel rod performance simulation, the construction method of fuel rod temperature distribution surrogate model (referred to as "surrogate model") is studied by taking fuel rod temperature prediction as an example. The calculation results of the fuel rod performance analysis code COPERNIC are used as the data source, and the representative training data are selected by using the k-means clustering algorithm. Four fully connected feedforward neural networks are trained to predict the outer surface temperature of the cladding considering the effects of coolant flow heat transfer and oxide film growth, the radial temperature distribution of the cladding, the outer surface temperature of the fuel pellet considering the effects of the gap variation between the fuel pellet and cladding, and the radial temperature distribution of the fuel pellet. By combining these neural networks, the temperature distribution of the fuel rod at different times can be quickly predicted based on the input fuel rod power history. Numerical experiments show that the calculation speed of the surrogate model is about 204 times faster than that of the COPERNIC code, and it has high accuracy. The mean deviations of fuel cladding and pellet temperature prediction on the whole data set are about 0.07°C and 0.44°C respectively.

收稿日期: 2023-07-11; 修回日期: 2023-07-22

作者简介: 刘振海(1989—), 男, 高级工程师, 现主要从事核燃料设计及性能模拟研究, Email: 1989lzh@sina.com

Key words: Neural network, Fuel rod temperature, Surrogate model, Fuel behavior

0 引言

在堆芯级燃料棒性能评价、堆芯燃料-物理-热工多专业耦合、核电厂燃料棒性能在线监测等需要大规模燃料棒性能计算的领域,现有基于离散的求解方法需要大量的计算资源及时间。以一维半燃料棒性能分析程序 COPERNIC^[1] 为例,单根燃料棒的全寿期稳态性能评价需要几秒,全堆芯有几万根燃料棒,串行分析一次需要几十小时。为此有必要研究燃料棒性能预测代理模型的构建方法,在保证一定精度的前提下,大幅提高计算效率。

机器学习能够建立输入数据和输出数据之间复杂的非线性映射关系,并且可以快速推理,是构建燃料棒性能预测代理模型的重要方法。温度是燃料棒性能评价的重要基础参数,在基于机器学习方法预测燃料温度方面,研究人员已开展了较多的工作。王东东、杨红义等^[2]利用堆芯子通道程序 COBRA 生成数据样本,基于神经网络训练预测燃料棒包壳最高温度。洪亮等^[3]分别基于 k 近邻、决策树和 AdaBoost 机器学习算法预测燃料棒包壳外表面和燃料芯块中心温度。Che Yifeng 等^[4]采用多种机器学习算法对全堆芯燃料棒的最大燃料芯块中心温度等关键性能参数进行预测,其中神经网络算法的表现最好。

现有研究主要集中在预测燃料棒温度的代表性指标,如包壳峰值温度、燃料芯块中心温度等,基于机器学习预测燃料棒温度时空分布的研究尚未见报道。为此,本研究采用多个神经网络组合的方式,将空间位置、时间、燃耗、线功率等参数作为神经网络的输入,同时考虑物理信息约束对温度预测表达式进行优化,建立了一种高精度的燃料棒温度分布预测代理模型(简称“代理模型”)的构建方法,并采用典型算例对该方法的可行性进行验证。

1 燃料棒热学物理模型

燃料棒为细长结构,径向是主要的传热方向,轴向和周向传热可忽略不计。通常燃料棒性能分析中采用轴向分段、径向分环的 1.5 维框架,每个轴向段采用 1 维的轴对称模型,多个不同高度

的轴向段堆砌,实现对整根燃料棒的物理描述。

1.1 冷却剂流动传热模型

燃料棒性能分析程序中冷却剂流动传热通常采用单通道模型^[1]:

$$GA \frac{dH}{dz} = \pi dq_{\infty} \quad (1)$$

式中, G 为冷却剂质量流速; A 为等效热当量直径的流动面积; H 为冷却剂的比焓; z 为轴向位置; d 为等效热当量直径; q_{∞} 为壁面热流密度。

通过式(1)可以计算出不同轴向高度处的冷却剂温度,进而基于冷却剂与包壳壁面的换热状态计算出包壳壁面温度。由于锆合金包壳与水接触会发生腐蚀,随着辐照时间增加氧化膜生长,氧化膜热导率较低,准确计算包壳壁面温度需要考虑氧化膜热阻的影响。

1.2 燃料芯块和包壳传热模型

(1) 燃料芯块和包壳稳态传热方程^[1]:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[k_p(T, B) r \frac{dT}{dr} \right] + f(r, \bar{B}) \frac{q_1}{\pi r_{po}^2} = 0 \quad (2)$$

$$k_c(T) r \frac{dT}{dr} + \frac{q_1}{2\pi} = 0 \quad (3)$$

式中, r 为径向位置; T 为局部温度; B 和 \bar{B} 分别为燃料芯块局部燃耗和轴向段燃耗(轴向段线功率对应的燃耗,下同); $k_p(T, B)$ 、 $k_c(T)$ 分别为燃料芯块和包壳的局部热导率; q_1 为轴向段线功率; r_{po} 为燃料芯块外径; $f(r, \bar{B})$ 为径向功率分布因子。

(2) 燃料芯块与包壳的间隙传热采用 1 维稳态模型^[1]:

$$\frac{q_1}{2\pi r_{po}} = h(T_{po} - T_{ci}) \quad (4)$$

式中, T_{po} 为燃料芯块外表面温度; T_{ci} 为包壳内表面温度; h 为间隙换热系数,在热工安全分析中通常取典型值 5678 W/(m·K)^[5],在燃料棒性能分析程序中会进行详细的建模,并考虑间隙传热系数的动态变化。

2 燃料棒温度分布代理模型构建方法

2.1 基于多神经网络组合的温度分布预测方法

由于间隙的存在,燃料棒温度的径向分布整体上是光滑的,燃料芯块温度近似抛物线分布、

包壳温度近似线性分布，采用统一的神经网络预测这种不光滑的分布较困难。为此，采用4个神经网络：考虑冷却剂流动传热、氧化膜生长影响的包壳外表面温度预测神经网络（ $NN_{T_{co}}$ ）、包壳径向温度分布预测神经网络（ $NN_{T_{clad}}$ ）、考虑燃料芯块和包壳间隙变化影响的燃料芯块外表面温度预测神经网络（ $NN_{T_{po}}$ ）和燃料芯块径向温度分布预测神经网络（ $NN_{T_{pellet}}$ ），通过这些神经网络的组合完成整个燃料棒从包壳到燃料芯块的温度分布预测，见图1。

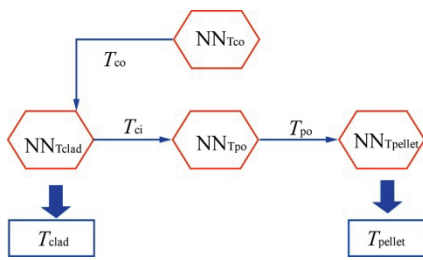


图1 多神经网络组合的温度分布预测示意图

Fig.1 Schematic Diagram of Temperature Distribution Prediction Based on Multiple Neural Networks

T_{co} —包壳外表面温度； T_{clad} —包壳不同径向位置温度； T_{pellet} —燃料芯块不同径向位置温度

2.2 神经网络架构设计

本研究中4个神经网络均采用全连接前馈神经网络架构。针对特定结构、特定材料类型的燃料棒准稳态温度分布预测，通过分析燃料棒传热各个过程的物理特点设计了神经网络的输入、输出参数。隐含层的层数、神经元数目属于神经网络的超参数，通过数值试验确定。输出层采用线性激活函数，其他层的激活函数均采用 \tanh 函数。燃料棒温度分布预测神经网络的架构参数见表1。输入参数中除 \bar{B} 以外，其余均是燃料棒性能分析的直接输入数据， \bar{B} 可基于线功率、燃料芯块中金属铀的线密度预先计算获得。本研究设计的神经网络借鉴物理信息神经网络^[6] 技术的思想，将径向位置坐标作为神经网络的输入值，将对应位置处的温度值作为神经网络的输出值，该设计可实现任意径向位置处的温度预测，而不受训练样本特定网格划分的影响。基于 PyTorch 软件包^[7] 在中央处理器（CPU）端构建和训练神经网络。采用有限内存拟牛顿法（L-BFGS）优化算法^[8] 对神经网络进行训练。

表1 燃料棒温度分布预测神经网络的架构参数

Tab.1 Architecture Parameters of Neural Networks for Prediction of Fuel Rod Temperature Distribution

神经网络	输入参数	输出参数	隐含层每层神经元个数
$NN_{T_{co}}$	$\tilde{q}_1, z, t, \bar{B}$	T_{co}	[30,30,30,30]
$NN_{T_{clad}}$	q_1, T_{co}, r	T_{clad}	[5]
$NN_{T_{po}}$	q_1, T_{ci}, t, \bar{B}	T_{po}	[30,30,30]
$NN_{T_{pellet}}$	q_1, T_{po}, \bar{B}, r	T_{pellet}	[30,30]

\tilde{q}_1 —轴向功率分布离散点

2.3 基于物理信息约束的温度预测表达式优化

对于燃料芯块温度和包壳温度分布预测，常规的数据驱动范式是将神经网络的输出值视为温度，通过优化算法调整神经网络的权重使得神经网络的输出值尽可能逼近目标温度值。由于没有考虑物理信息的约束，神经网络的输出值会出现不符合物理规律的情况，如边界条件不能精确满足，线功率为0时，预测的燃料芯块温度和包壳温度分布不等于边界温度等。为此，借鉴 SUN 等^[9] 提出的硬边界约束处理方法，对神经网络的输出值进行修正，构造了燃料芯块温度和包壳温度的表达式，即：

(1) 燃料芯块温度：

$$T_{pellet}(r) = \left\{ q_1 N_{T_{pellet}} \left[1 - \left(\frac{r}{r_{po}} \right)^2 \right] + 1 \right\} T_{po} \quad (5)$$

(2) 包壳温度：

$$T_{clad}(r) = \left[q_1 N_{T_{clad}} \ln \left(\frac{r_{co}}{r} \right) + 1 \right] T_{co} \quad (6)$$

式中， $N_{T_{pellet}}$ 和 $N_{T_{clad}}$ 分别为燃料芯块和包壳径向温度分布预测神经网络的输出值。

上述公式参考了定热导率下的温度分布解析表达式，能够自动满足定温边界条件且符合物理规律。

3 数值计算验证

3.1 算例描述及数据预处理

为验证提出的代理模型构建方法，取某压水堆核电厂平衡循环经历3个换料循环出堆的 UO_2 燃料棒功率史（共计91种）作为数据源，这些功率史可覆盖经历1个或2个循环出堆的燃料棒的功率史，更具代表性。燃料棒功率史用燃料棒每个换料循环的平均相对功率表示。采用燃料棒

性能分析软件 COPERNIC 对每种燃料棒功率史进行全寿期的性能模拟，从结果文件中提取相应数据建立数据集。

训练样本是影响神经网络性能的重要因素。训练样本不足，将导致神经网络没有充分学习到数据内在的特征关系，使得预测精度不高，泛化能力不足。训练样本过多，又会导致计算量大、训练速度慢。为此，以 3 个换料循环的燃料棒平均相对功率作为特征，采用 Scikit-learn 软件^[10]中的 kmeans (k 均值) 聚类算法将所有燃料棒功率史划分为 10 类，从每类中随机取 30% (向上取整) 的样本组成训练集，共计 32 个燃料棒功率史。

3.2 结果分析

3.2.1 总体误差分析 4 个神经网络分别训练 5 次，取在整个数据集上平均绝对误差 (MAE) 最小的神经网络作为温度预测的代理模型。整个数据集上，包壳温度有约 41 万个样本点，燃料芯块温度约 155 万个样本点，代理模型预测值与参考值的对比情况见图 2 (图 2 中参考值指的是 COPERNIC 程序的计算值)。从图 2 中可以看出绝大多数点聚集在等值线附近，经统计可知：对

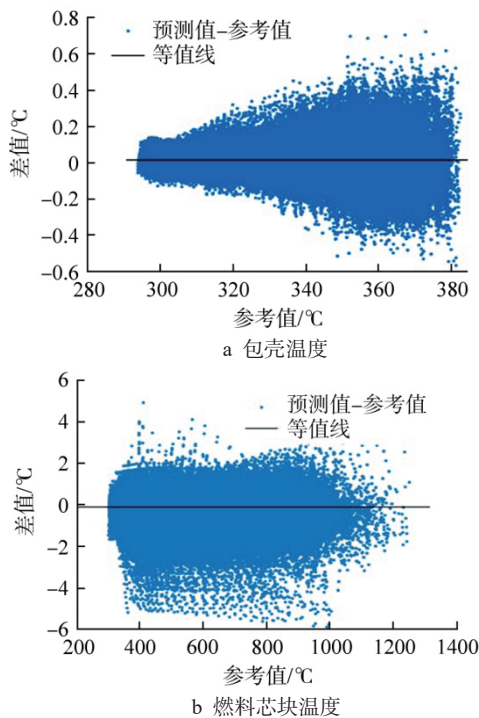


图 2 代理模型预测值与参考值的对比

Fig. 2 Comparison between Predicted Value and Reference Value of Surrogate Model

于包壳温度预测偏差，约 97.16% 的数据落在 $\pm 0.25^\circ\text{C}$ 之间，最大偏差约 $[-0.59^\circ\text{C}, 0.71^\circ\text{C}]$ ，平均偏差约 0.07°C ；对于燃料芯块温度预测偏差，约 99.23% 的数据落在 $\pm 2.00^\circ\text{C}$ 之间，最大偏差约 $[-5.77^\circ\text{C}, 5.04^\circ\text{C}]$ ，平均偏差约 0.44°C 。这些数据表明训练的神经网络代理模型具有较高的准确性。

另外，从图 2 中可以看出，燃料芯块温度预测偏差相比包壳温度预测偏差更大，主要原因有 2 点：①燃料芯块与包壳间隙传热受间隙动态变化、两侧温度、裂变气体组份、内压、接触压力等多种因素的影响，呈现很强的非线性，目前采用的燃料芯块外表面温度预测输入参数只能近似考虑这些效应的影响；②燃料芯块局部燃耗影响热导率，而局部燃耗受燃料棒功率史、径向功率分布形状的影响，目前采用的燃料芯块温度预测输入参数只能近似反映这一关系。

3.2.2 计算时间对比 尽管神经网络训练需要花费较多的时间 (本研究中单次训练花费的时间约 30 min)，一旦训练成功后，神经网络推理花费的时间代价很小。表 2 给出了以整个数据集 (91 个功率史) 为对象，在 CPU 单核下代理模型与燃料棒性能分析程序 COPERNIC 的计算时间对比情况。从表 2 中可以看出，神经网络训练完成后的计算速度要远远快于 COPERNIC 程序的计算速度，相比 COPERNIC 计算速度提升约 204 倍。在 4 个神经网络中，由于燃料芯块径向预测的温度点较多， $\text{NN}_{\text{TPellet}}$ 花费的时间最长。

表 2 计算时间对比

Tab. 2 Comparison of Calculation Time

COPERNIC程序 计算时间/s	代理模型计算时间/s				总计	加速比
	NN_{To}	NN_{Tclad}	NN_{Tpo}	$\text{NN}_{\text{TPellet}}$		
93.964	0.084	0.025	0.023	0.305	0.460	204

4 结论及展望

本研究采用多个神经网络组合的方式，建立了一种高精度的燃料棒温度分布预测代理模型的构建方法，并采用典型的算例对该方法的可行性进行了验证。构建的代理模型能够根据输入的燃料棒功率史信息输出准稳态下不同时刻的燃料芯块和包壳温度分布，相比 COPERNIC 程序计算

速度提升约 204 倍，同时具有较高的精度。

基于本研究方法构建的代理模型，可作为融合机器学习的新燃料棒性能分析的基础部件，用于燃料棒性能分析程序加速、堆芯燃料-物理-热工多专业耦合等，可作为燃料棒热学性能的数字孪生模型，根据输入的燃料棒功率史信息实时反馈热学性能的变化。后续可在本研究基础上，研究力学性能参数、瞬态行为的代理模型构建方法，实现燃料棒辐照-热-力耦合行为的快速预测。

参考文献：

- [1] BONNAUD E, BERNARD C, VAN SCHEL E. COPERNIC: a state-of-the-art fuel rod performance code[J]. Transactions of the American Nuclear Society, 1997, 77: 971125.
- [2] 王东东, 杨红义, 王端, 等. 中国实验快堆热工参数的自适应 BP 神经网络预测方法研究 [J]. 原子能科学技术, 2020, 54(10): 1809-1816.
- [3] 洪亮, 金鑫, 刘焯瀚, 等. 机器学习算法在燃料棒温度性能预测中的应用 [J]. 深圳大学学报: 理工版, 2022, 39(5): 515-520.
- [4] CHE Y F, YURKO J, SEURIN P, et al. Machine learning-assisted surrogate construction for full-core fuel performance analysis[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2022, 168: 108905.
- [5] 阎昌琪, 曹欣荣. 核反应堆工程 [M]. 哈尔滨: 哈尔滨工程大学出版社, 2004: 160.
- [6] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics-informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 378: 686-707.
- [7] PASZKE A, GROSS S, MASSA F, et al. PyTorch: an imperative style, high-performance deep learning library[C]//Proceedings of the 33rd International Conference on Neural Information Processing Systems. Vancouver: Curran Associates Inc, 2019.
- [8] LIU D C, NOCEDAL J. On the limited memory BFGS method for large scale optimization[J]. *Mathematical Programming*, 1989, 45(1-3): 503-528.
- [9] SUN L N, GAO H, PAN S W, et al. Surrogate modeling for fluid flows based on physics-constrained deep learning without simulation data[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 361: 112732.
- [10] PEDREGOSA F, VAROQUAUX G, GRAMFORT A, et al. Scikit-learn: machine learning in python[J]. *The Journal of Machine Learning Research*, 2011, 12: 2825-2830.

(责任编辑: 张明军)