

基于 PINN 的源迭代法求解及加速算法研究

江勇^{1,2}, 安萍^{1,2*}, 刘东^{1,2}, 于洋^{1,2}

1.中国核动力研究设计院, 成都, 610213;

2.核反应堆技术全国重点实验室, 成都, 610213

摘要: 本文将基于物理驱动的人工智能方法和传统源迭代法结合, 建立求解少群扩散方程的新型方法流程, 并采用 Anderson 加速方法对迭代源项进行加速。二维多材料、三维单材料等例题的计算结果显示, PINN 和传统源迭代法相结合, 在保证计算精度的前提下可计算出连续中子通量密度分布, 采用 Anderson 加速可减少迭代次数, 成功实现了少群中子扩散方程的正向求解, 助推了人工智能算法在核领域的应用。

关键词: PINN; Anderson 加速; 源迭代; 扩散方程

中图分类号:

文献标志码: A

Abstract: This paper proposes a new method which combines physics-informed neural networks (PINN) with traditional source iteration method to solve few group neutron diffusion equations. And this paper uses Anderson acceleration method to accelerate the iterative process. The results of numerical examples such as two-dimensional multi material and three-dimensional single material show that the combination of PINN and traditional source iteration method can calculate the continuous neutron flux density distribution while ensuring calculation accuracy. The use of Anderson acceleration method can reduce the number of iterations and successfully achieve the forward solution of the few group neutron diffusion equations, which promotes the application of artificial intelligence algorithms in the nuclear field.

Key words: PINN, Anderson acceleration, Source iteration, Neutron diffusion equation

收稿日期: 2024-09-16

修回日期: 2024-12-22

基金项目: 四川省自然科学基金 (2023NSFSC0066, 2023NSFSC1321) 四川省揭榜挂帅行业共性技术攻关项目 (批准号: 23jBGOV0001)

国家基础性科研院所基础科研稳定支持专项资助项目 (批准号: WDZC-2023-05-03-05)

作者简介: 江勇 (1998—), 男, 硕士, 助理工程师, 从事反应堆智能数值计算、工业软件研究, E-mail: 2229602945@qq.com。*通讯作者: 安萍, E-mail: anpingwork@126.com

0 引言

随着人工智能先进技术的快速发展,深度学习在求解多种复杂的偏微分方程上已取得重大突破,但某些情况下数据的获取成本是较高的,研究者后续提出了一种与数据驱动完全不同的方法,即基于物理驱动的物理信息神经网络(PINN)的方法^[1]。目前关于 PINN 方法已开展了许多研究。文献[2]使用 python 开发了 DeepXDE 库,使用 DeepXDE 库可以快速实现 PINN 相关算法。文献[3]中提出一种深度算子网络(DeepONet),使神经网络逼近非线性连续算子。同时,根据不同问题的特点,研究者们选择了不同的“变种”PINN 来解决,比如 fPINNs^[4]、B-PINNs^[5]、cPINNs^[6]、PPINNs^[7]等。

目前,已有相关研究者利用 PINN 求解核领域的中子扩散方程,文献[8]在方程的数理形式、边界条件、截面参数完整的情况下实现了稳态临界条件下单群扩散方程的求解。文献[9]针对多材料中子扩散问题的解具有不光滑性的特点,引入不同区域交界处的物理量守恒约束(cPINN),使得代理模型可以描述连续不光滑的解。文献[10]采用直接搜索方法求解扩散/输运方程的有效增殖系数,并通过多个多群扩散、单群输运的算例验证了该方法的有效性,为求解中子扩散/输运方程的有效增殖系数(k_{eff})探索出一条新的途径。

同时,在不动点迭代算法中,Anderson 方法是 1962 年 Anderson^[11]在研究一类偏微分方程的数值解时提出的算法,他首次将子空间作为迭代对象,通过最小化加权残差二范数确定数值格式,因此收敛性得到了极大的改善。文献[12,13]在核反应堆堆芯仿真中将 Anderson 算法应用到了临界硼搜索计算和有效增殖因子计算。上述研究说明,针对中子核物理数值计算的不动点问题,相较于传统高斯或 SOR 迭代法,Anderson 算法可有效提升收敛速度和稳定性。

本文将基于物理模型驱动 PINN 方法与传统扩散方程求解源迭代法相结合,并采用 Anderson 算法进行迭代加速,建立一种新型求解扩散方程的数值方法。

1 PINN 求解扩散方程源迭代法

核反应堆工程堆芯中子学采用的稳态两群中子扩散模型的方程形式如下所示:

$$-D_1 \nabla^2 \phi_1(r) + \Sigma_r \phi_1(r) = \frac{1}{k_{\text{eff}}} [\vartheta \Sigma_{f1} \phi_1(r) + \vartheta \Sigma_{f2} \phi_2(r)] \quad (1)$$

$$-D_2 \nabla^2 \phi_2(r) + \Sigma_{a2} \phi_2(r) = \Sigma_{1 \rightarrow 2} \phi_1(r) \quad (2)$$

式中， ∇^2 为拉普拉斯算子； $\phi_1(r)$ 、 $\phi_2(r)$ 分别为快群与热群在 r 位置处的中子注量率； D_1 、 D_2 分别为快群与热群的扩散系数； $\vartheta\Sigma_{f1}$ 、 $\vartheta\Sigma_{f2}$ 分别为快群和热群的中子裂变截面； Σ_r 为快群的移出截面； Σ_{a2} 为热群的吸收截面； $\Sigma_{1\rightarrow 2}$ 为快群到热群的散射截面。

采用全连接深度神经网络，其第 l 层神经网络函数输出形式为：

$$N^l(r) = f^l(w^l f^{l-1}(w^{l-1} f^{l-2}(\dots f^1(w^1(r) + b^1) \dots + b^{l-2}) + b^{l-1}) + b^l) \quad (3)$$

式中， r 表示空间点几何向量； w 为神经元的权重； b 为神经元的偏置； f 为激活函数。

由于方程(1)、(2)都有两个待求通量密度，为联立方程组，因此采用两个网络 N_1 、 N_2 分别表示 ϕ_1 与 ϕ_2 的输出，命名为快群网络和热群网络，令神经网络的输出值不断逼近真实解。

利用 PINN 求解偏微分方程的思想，令式(1)、(2)变形为：

$$g_1 = -D_1 \nabla^2 \phi_1(r) + \Sigma_r \phi_1(r) - \frac{1}{k_{\text{eff}}} [\vartheta\Sigma_{f1} \phi_1(r) + \vartheta\Sigma_{f2} \phi_2(r)] \quad (4)$$

$$g_2 = -D_2 \nabla^2 \phi_2(r) + \Sigma_{a2} \phi_2(r) - \Sigma_{1\rightarrow 2} \phi_1(r) \quad (5)$$

对于快群网络，将神经网络输出值 $N_1(r) = \phi_1(r)$ 代入到式(4)，形成控制方程损失项。边界条件为 ϕ_1 在边界处取值为 $K_{b1}(r_b)$ ， ϕ_2 在边界处取值为 $K_{b2}(r_b)$ ，将 $N_1(r) = \phi_1(r)$ 代入到式(4)形成边界条件损失项，将两个损失项赋予不同权重，形成最后的深度学习加权损失函数：

$$f_{\text{loss}1} = \frac{P_{g1}}{N_g} \sum_{i=1}^{N_g} |g_1[N_1(r_g^i)]|^2 + \frac{P_{b1}}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} |N_1(r_b^i) - K_{b1}(r_b^i)|^2 \quad (6)$$

式中， i 代表第 i 个采样点； r_g^i 、 r_b^i 分别为内部点与边界点的几何描述空间向量； N_g 、 N_b 分别为空间内部离散点与边界离散点数量； P_{g1} 、 P_{b1} 分别为控制方程损失项和边界条件损失项的权重。

对于热群网络是一样的原理，其损失函数为：

$$f_{\text{loss}2} = \frac{P_{g2}}{|N_g|} \sum_{i=1}^{N_g} |g_2[N_2(r_g^i)]|^2 + \frac{P_{b2}}{|N_b|} \sum_{i=1}^{N_b} |N_2(r_b^i) - K_{b2}(r_b^i)|^2 \quad (7)$$

k_{eff} 和两群中子通量均为待求解量，本文采用源迭代与深度学习结合方法

(MSIDL), 同时求解中子通量分布与 k_{eff} 。

源迭代与深度学习方法具体过程如下: 首先设定一个初始的裂变源分布 $Q^{(0)}(r) = \vartheta \Sigma_{f1} \phi_1^{(0)}(r) + \vartheta \Sigma_{f2} \phi_2^{(0)}(r)$, 和一个初始的 $k_{\text{eff}}^{(0)}$ 数值, 同时把 $Q^{(0)}(r)/k_{\text{eff}}^{(0)}$ 作为初始迭代源项, 并将其代入式(1)右端, 将 $\phi_1^{(0)}(r)$ 带入到式(2)右端。这样, 方程(1)、(2)的右端项便是一个已知项, 方程变为一个非齐次方程组, 用深度学习方法去求解这两个方程, 利用 PINN 思想, 则式(4)、(5)变为如下形式:

$$g_1 = -D_1 \nabla^2 \phi_1(r) + \Sigma_r \phi_1(r) - \frac{1}{k_{\text{eff}}^{(0)}} [\vartheta \Sigma_{f1} \phi_1^{(0)}(r) + \vartheta \Sigma_{f2} \phi_2^{(0)}(r)] \quad (8)$$

$$g_2 = -D_2 \nabla^2 \phi_2(r) + \Sigma_{a2} \phi_2(r) - \Sigma_{1 \rightarrow 2} \phi_1^{(0)}(r) \quad (9)$$

对式(8)、(9)构造损失函数进行神经网络训练。将神经网络训练过程作为内迭代环节, 同时为了加快整体迭代流程, 内迭代的网络训练其损失函数不一定会降到极小值, 因此可考虑迭代训练一定次数后即可进入下一次外迭代环节, 一般可取内迭代次数 $M=10 \sim 20$ 。

此时求出的快群中子通量分布为 $\phi_1^{(1)}(r)$, 热群中子通量分布为 $\phi_2^{(1)}(r)$, 则可得第二次迭代裂变中子源分布 $Q^{(1)}(r) = \vartheta \Sigma_{f1} \phi_1^{(1)}(r) + \vartheta \Sigma_{f2} \phi_2^{(1)}(r)$, 并由它来求得有效增殖系数新的估计值 $k_{\text{eff}}^{(1)}$, 如式(12)所示, ……。依次类推, 逐次地迭代下去, 则对于第 n 次迭代计算有:

$$Q^{(n-1)}(r) = \vartheta \Sigma_{f1} \phi_1^{(n-1)}(r) + \vartheta \Sigma_{f2} \phi_2^{(n-1)}(r), \quad (10)$$

根据 k_{eff} 的物理意义可以由式(12)算出 $k_{\text{eff}}^{(n-1)}$ 的估计值:

$$k_{\text{eff}}^{(n-1)} = \frac{\int_V Q^{(n-1)}(r) dV}{\frac{1}{k_{\text{eff}}^{(n-2)}} \int_V Q^{(n-2)}(r) dV} \quad (11)$$

该方法中, 本文采用以下收敛准则:

$$\text{mean}\{\text{abs}[(\phi_i^n - \phi_i^{n-1})/\phi_i^{n-1}]\} < \varepsilon \quad (12)$$

其中 $\text{mean}()$ 为平均值函数, $\text{abs}()$ 为绝对值函数, $i=1, 2$ 。 ϕ_i^n 、 ϕ_i^{n-1} 分别为第 n 、 $n-1$ 次外迭代所求快/热群中子通量数值解。 ε 为预先给定的参数, 一般在程序中可取 $\varepsilon \approx 10^{-2} \sim 10^{-3}$ 。具体流程如图 1 所示。

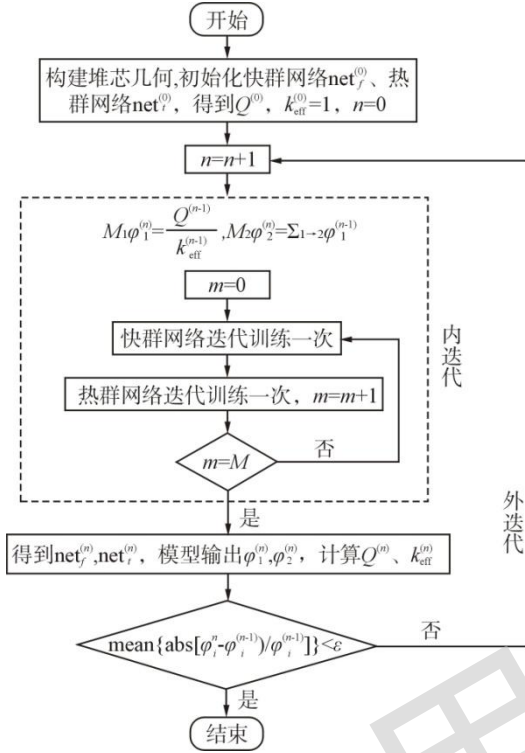


图 1 源迭代与深度学习结合方法流程图

Figure 1 Flow Chart of the Method Combining Source Iteration and Deep Learning

2 PINN 求解扩散方程的加速方法研究

Anderson 加速是一种不动点迭代的加速算法，方法核心是利用前置迭代结果进行加权，得到下一步最优迭代输入值以达到加速效果，加权系数通过最小化加权误差的 2-范数得到。

针对不动点迭代问题 $x = g(x)$ ， m 阶 Anderson 加速算法格式为：

$$x_{k+1} = \sum_{i=0}^m \alpha_i g(x_{k-i}) \quad (13)$$

式中，约束条件为 $\sum_{i=0}^m \alpha_i = 1$ ，并且满足 $\operatorname{argmin} \|\sum_{i=0}^m \alpha_i [g(x_{k-i}) - x_{k-i}]\|^2$ 。

则二阶深度 Anderson 方法应用到式子(12)裂变源收敛条件，可以得到加速公式为：

$$\tilde{Q}^{(n)}(\vec{r}) = \alpha_0 \tilde{Q}^{(n)}(\vec{r}) + \alpha_1 \tilde{Q}^{(n-1)}(\vec{r}) + (1 - \alpha_0 - \alpha_1) \tilde{Q}^{(n-2)}(\vec{r}) \quad (14)$$

式中， \vec{r} 表示位置向量； n 表示迭代次数； $\alpha_i (i = 0,1)$ 为 Anderson 系数。

令 $r_n = Q_n - Q_{n-1} = (f_{n,1}, f_{n,2}, \dots, f_{n,l})^T$ ， $\alpha_i (i = 0,1)$ 的求解过程如下：

$$\begin{aligned}
& \operatorname{argmin} \|\alpha_0 r_n + \alpha_1 r_{n-1} + (1 - \alpha_0 - \alpha_1) r_{n-2}\|_2^2 \\
&= \operatorname{argmin} \|\alpha_0 (r_n - r_{n-2}) + \alpha_1 (r_{n-1} - r_{n-2}) + r_{n-2}\|_2^2 \\
&= \operatorname{argmin} \left\| \alpha_0 \begin{pmatrix} f_{n,1} - f_{n-2,1} \\ f_{n,2} - f_{n-2,2} \\ \vdots \\ f_{n,l} - f_{n-2,l} \end{pmatrix} + \alpha_1 \begin{pmatrix} f_{n-1,1} - f_{n-2,1} \\ f_{n-1,2} - f_{n-2,2} \\ \vdots \\ f_{n-1,l} - f_{n-2,l} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_{n-2,1} \\ f_{n-2,2} \\ \vdots \\ f_{n-2,l} \end{pmatrix} \right\|_2^2 \quad (15) \\
&= \operatorname{argmin} \left\| \begin{pmatrix} f_{n,1} - f_{n-2,1} & f_{n-1,1} - f_{n-2,1} \\ f_{n,2} - f_{n-2,2} & f_{n-1,2} - f_{n-2,2} \\ \vdots & \vdots \\ f_{n,l} - f_{n-2,l} & f_{n-1,l} - f_{n-2,l} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_{n-2,1} \\ f_{n-2,2} \\ \vdots \\ f_{n-2,l} \end{pmatrix} \right\|_2^2 \\
& \quad \stackrel{\text{记作}}{=} \operatorname{argmin} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|
\end{aligned}$$

等价于求解 $\mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$ 的解，其中：

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^l (f_{n,i} - f_{n-2,i})^2 & \sum_{i=1}^l (f_{n,i} - f_{n-2,i})(f_{n-1,i} - f_{n-2,i}) \\ \sum_{i=1}^l (f_{n,i} - f_{n-2,i})(f_{n-1,i} - f_{n-2,i}) & \sum_{i=1}^l (f_{n-1,i} - f_{n-2,i})^2 \end{pmatrix} \quad (16)$$

记作 $\begin{pmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} \\ \mathbf{b} & \mathbf{c} \end{pmatrix}$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{b} = - \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^l (f_{n,i} - f_{n-2,i}) f_{n-2,i} \\ \sum_{i=1}^l (f_{n-1,i} - f_{n-2,i}) f_{n-2,i} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathbf{e} \\ \mathbf{f} \end{pmatrix} \quad (17)$$

得到：

$$\alpha_0 = \frac{\mathbf{c}\mathbf{e} - \mathbf{b}\mathbf{f}}{\mathbf{b}^2 - \mathbf{a}\mathbf{c}} \quad \alpha_1 = \frac{\mathbf{a}\mathbf{f} - \mathbf{b}\mathbf{e}}{\mathbf{b}^2 - \mathbf{a}\mathbf{c}} \quad (18)$$

同理可得一阶深度 Anderson 方法迭代公式为：

$$\tilde{Q}^{(n)}(\vec{\mathbf{r}}) = \alpha_0 \tilde{Q}^{(n)}(\vec{\mathbf{r}}) + (1 - \alpha_0) \tilde{Q}^{(n-1)}(\vec{\mathbf{r}}) \quad (19)$$

其中：

$$\alpha_0 = \frac{\sum_i (f_{k-1,i} - f_{k,i}) f_{k-1,i}}{\sum_i (f_{k-1,i} - f_{k,i})^2} \quad (20)$$

物理模型驱动的 PINN 方法与传统扩散方程求解源迭代法相结合形成 MSIDL 方法思想原理仍然是不动点迭代，因此可用 Anderson 方法进行加速。

3 方法验证

3.1 二维矩形几何多群两材料扩散问题

3.1.1 问题描述：算例划分为 2 个不同的材料区域（见图 2），几何定义域为 $x \in [0, 0.5 \text{ m}]$, $y \in [0, 0.5 \text{ m}]$ ，各区域材料参数见表 1。

表 1 计算区域材料特性

Tab. 1 Material Characteristics of Area

材料号	能群/g	D/cm	Σ_a/cm^{-1}	$\vartheta\Sigma_f/(\text{n} \cdot \text{cm}^{-1})$	$\Sigma_{1 \rightarrow 2}/\text{cm}^{-1}$
1	1	1.2550	0.008252	0.004602	0.02533
	2	0.2110	0.100300	0.109100	
2	1	1.2680	0.007181	0.004609	0.02767
	2	0.1902	0.070470	0.086750	
3	1	1.2590	0.008002	0.004663	0.02617
	2	0.2091	0.083440	0.102100	
4	1	1.2590	0.008002	0.004663	0.02617
	2	0.2091	0.073324	0.102100	

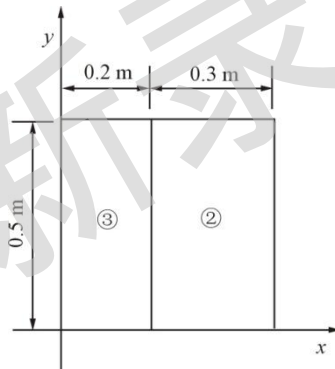


图 2 材料区域几何描述

Fig. 2 Geometric Description of Material Area

由于此问题本身没有解析解，因此本实验将深度学习结果与经过反应堆工程充分验证的堆芯中子学计算软件 CORCA-3D^[14]计算结果进行比较。

3.1.2 各种参数设置

采样点数量：定义域内部采样 4400 个点，边界处采样 600 个点。

初始值设定：深度神经网络采用全连接结构，网络层数 $l = 10$ ，隐藏层每层神经元数量 $n = 30$ ，神经网络参数 w 随机初始化， b 初始化为 0； k 初始值设为 1。源迭代与深度学习结合方法权重初始值设定为： $P_{g1}=1$, $P_{g2}=1$, $P_{b1}=10$, $P_{b2}=10$ ，初始内迭代次数设定为 $M=10$ 。当外迭代次数达到 8 时，将 M 设置为 1。

深度学习算法设定：采用 Adam 算法进行计算，学习率从 0.001 逐步降低到

5×10^{-6} , 学习样本批处理数为 32。依据式(13)的收敛准则, 采用快群收敛准则如下 (也可用热群作为收敛准则):

$$\text{mean}\{\text{abs}[(\phi_1^n - \phi_1^{n-1})/\phi_1^{n-1}]\} < 0.005 \quad (21)$$

加速方法参数设定: 对于一阶深度 Anderson 方法, α_0 初始值设为 1; 对于二阶深度 Anderson 方法, α_0 初始值设为 1, α_1 初始值设为 0。

3.1.3 结果分析: 源迭代与深度学习结合方法对该问题计算结果如表 2、图 3 所示。图 3 中的中子通量分布均经过归一化处理。

表 2 二维两材料计算结果

Tab. 2 Numerical Results of Two-dimensional Examples with Two-material

方法	$k_{\text{eff_net}}$	$k_{\text{eff_cor}}$	k_{eff} 相对误差	外迭代次数	MSE_1	MSE_2	loss1	loss2
MSIDL	0.8273		0.0125	300	7.9462×10^{-4}	6.1047×10^{-4}	0.1912	0.0766
MSIDL+AA1	0.8299	0.8378	0.0094	132	1.1700×10^{-2}	2.7256×10^{-3}	0.3626	0.0826
MSIDL+AA2	0.8294		0.0100	288	8.2466×10^{-4}	4.7734×10^{-4}	0.1376	0.0699

其中 MSIDL+AA1 与 MSIDL+AA2 分别表示使用一阶、二阶深度 Anderson 方法对 MSIDL 方法进行加速; $k_{\text{eff_net}}$ 为深度学习计算方法计算的 k_{eff} ; $k_{\text{eff_cor}}$ 为 CORCA-3D 软件计算的 k_{eff} ; MSE_1 与 MSE_2 分别为训练好的快群网络、热群网络计算结果与 CORCA-3D 软件计算结果的均方误差; loss1、loss2 分别为快群、热群模型训练完成时的损失函数。

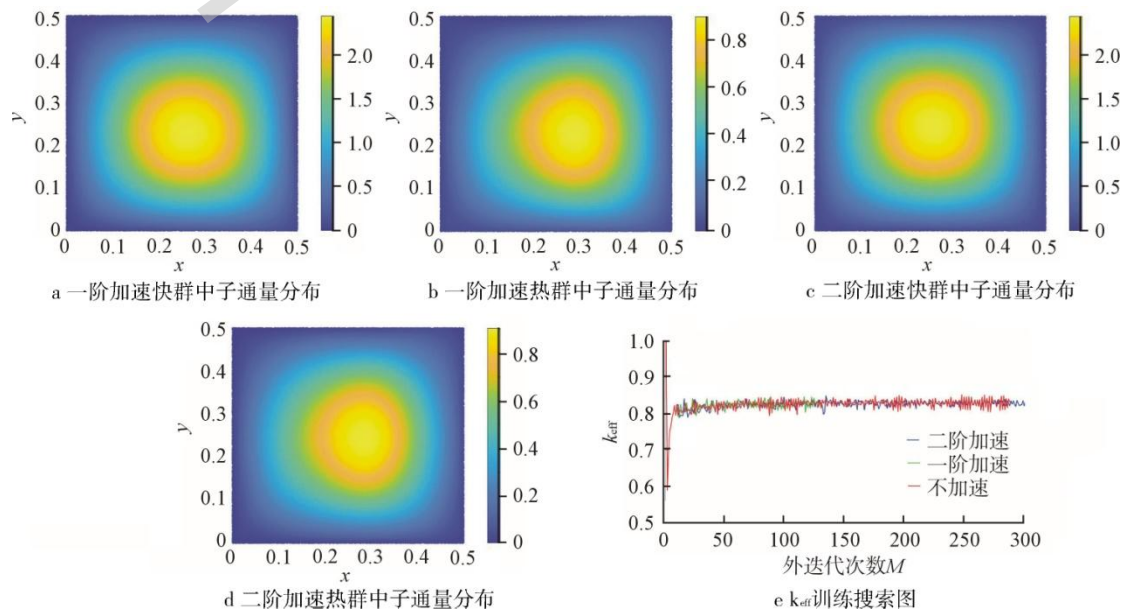


图 3 源迭代与深度学习结合方法验证结果图

Fig. 3 Verification Results of the Combination of Source Iteration and Deep Learning Method

由表 2、图 3 可知，对于两种材料的堆芯布置，MSIDL 方法计算出求解区域快群与热群的连续通量密度值，并且求解出了 k_{eff} ， k_{eff} 误差均在 1%左右。三种方法的快群均方误差 MSE_1 平均值为 4.4398×10^{-3} ，热群均方误差 MSE_2 平均值为 1.2711×10^{-3} ，且一阶加速和二阶加速方法都能加快收敛。一阶加速迭代次数减少了 56.0%，二阶加速迭代次数减少了 0.04%。

3.2 二维矩形几何多群多材料扩散问题

3.2.1 问题描述：将算例划分为 4 个不同的材料区域（见图 4），几何定义域为 $x \in [0, 0.5 \text{ m}]$ ， $y \in [0, 0.5 \text{ m}]$ ，各区域材料参数见表 1。

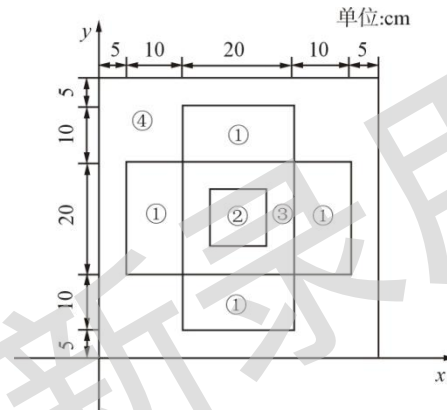


图 4 材料区域几何描述

Fig. 4 Geometric Description of Material Area

3.2.2 各种参数设置：定义域内部采样 6900 个点，边界处采样 600 个点。初始内迭代次数设定为 $M=10$ ，当外迭代次数达到 15 时，将 M 设置为 1。收敛条件为：

$$\text{mean}\{\text{abs}[(\phi_1^n - \phi_1^{n-1})/\phi_1^{n-1}]\} < 0.01 \quad (22)$$

其它参数设置同 3.1 节。

3.2.3 结果分析：源迭代与深度学习结合方法对该问题计算结果如表 3、图 5 所示。

表 3 二维多材料计算结果

Tab. 3 Numerical Results of Two-dimensional Examples with Multi-material

方法	$k_{\text{eff_net}}$	$k_{\text{eff_cor}}$	k_{eff} 相 对误 差	外送 代次 数	$\text{MSE}_1/10^{-3}$	$\text{MSE}_2/10^{-3}$	loss1	loss2
----	-----------------------	-----------------------	-------------------------------	---------------	------------------------	------------------------	-------	-------

MSIDL	0.7854		0.0129	29	4.6841	3.3315	0.3140	0.3340
MSIDL+AA1	0.8001	0.7957	0.0055	16	5.0547	3.5475	0.3270	0.3526
MSIDL+AA2	0.7869		0.0111	18	4.1098	3.4594	0.3236	0.4118

从图 5 可知，对于更多种材料的堆芯布置，MSIDL 方法也可取得较好计算结果，三种方法的快群均方误差 MSE_1 平均值为 4.6162×10^{-3} ，热群均方误差 MSE_2 平均值为 3.4461×10^{-3} ，且一阶加速和二阶加速方法都能加快收敛。一阶加速迭代次数减少了 44.8%，二阶加速迭代次数减少了 37.9%。

3.3 三维立方体几何多群单材料扩散问题

3.3.1 问题描述：针对扩散方程的立方体几何多群单材料区域问题，设立方体的长宽高都为 0.5 m，几何定义域为 $x \in [-0.25 \text{ m}, 0.25 \text{ m}]$ ， $y \in [-0.25 \text{ m}, 0.25 \text{ m}]$ ， $z \in [-0.25 \text{ m}, 0.25 \text{ m}]$ ，材料选择表 1 中的材料 4。

3.3.2 各种参数设置：采样点数量：定义域内部采样 12500 个点，边界处采

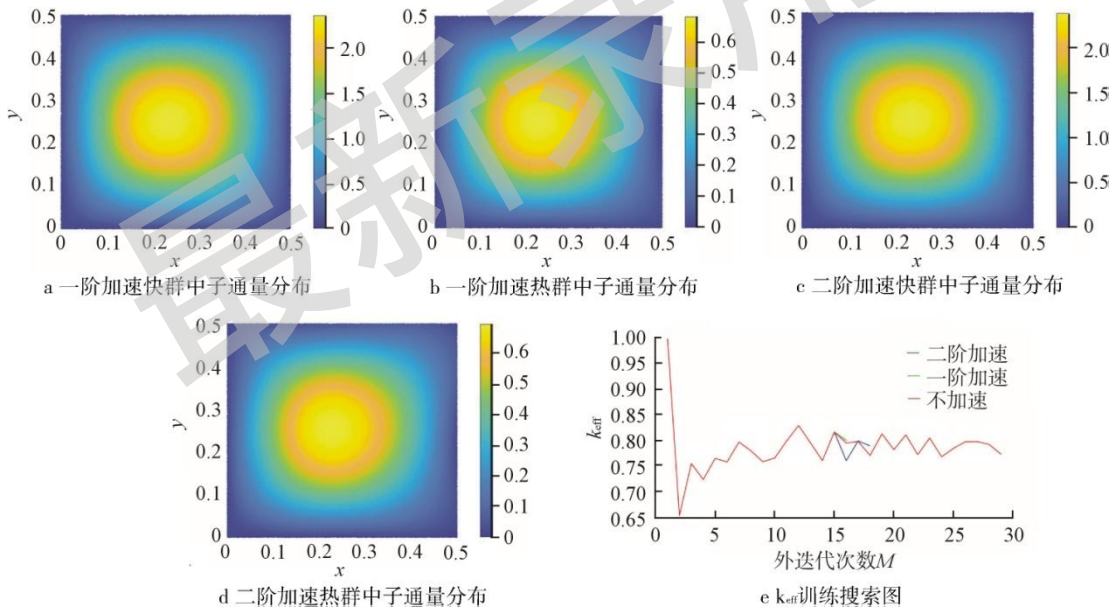


图 5 源迭代与深度学习结合方法验证结果图

Fig. 5 Verification Results of the Combination of Source Iteration and Deep Learning Method

样 6000 个点。批处理大小设置为 64。初始内迭代次数设定为 $M=5$ ，当外迭代次数达到 16 时，将 M 设置为 2。收敛条件为：

$$\text{mean}\{\text{abs}[(\phi_1^n - \phi_1^{n-1})/\phi_1^{n-1}]\} < 0.02 \quad (23)$$

其它参数设置同 3.1 节。

3.3.3 结果分析：源迭代与深度学习结合方法对该问题计算结果如表 4、图 6 所示。

表 4 三维单材料计算结果

Tab. 4 Numerical Results of Three-dimensional Examples with Single-material

方法	$k_{\text{eff_net}}$	$k_{\text{eff_cor}}$	k_{eff} 相对误差	外迭代次数	MSE_1	MSE_2	loss1	loss2
MSIDL	0.7808		0.0398	48	0.0506	0.0100	0.0554	0.0219
MSIDL+AA1	0.7872	0.8132	0.0320	33	0.0821	0.0159	0.0565	0.0241
MSIDL+AA2	0.7962		0.0209	44	0.0528	0.0107	0.0578	0.0201

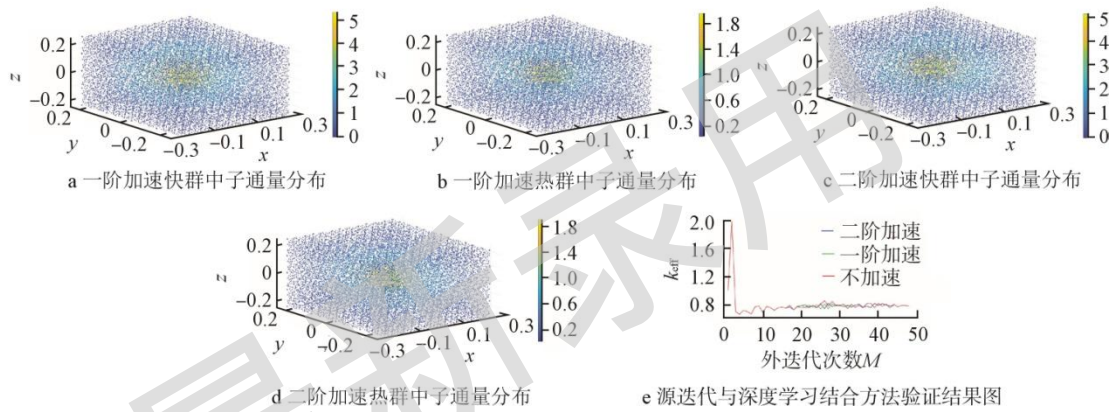


图 6 源迭代与深度学习结合方法验证结果图

Fig. 6 Verification Results of the Combination of Source Iteration and Deep Learning Method

该算例针对三维几何进行求解，三种方法的快群均方误差 MSE_1 平均值为 6.1833×10^{-2} ，热群均方误差 MSE_2 平均值为 1.2200×10^{-2} 。一阶加速迭代次数减少了 31.3%，二阶加速迭代次数减少了 8.3%。

3.4 高精度例题验证

该小节旨在研究利用 MSIDL 获取更高精度解的情况下加速方法是否仍有效果。为此通过增加采样点数量，增加迭代次数，改变收敛条件，使计算结果精度更高，并判断此时加速方法的有效性。

3.4.1 问题描述：算例同 3.1 节。

3.4.2 各种参数设置：定义域内部采样 11500 个点，边界处采样 600 个点。收敛准则改为 $\text{MSE}_{u1} < 1 \times 10^{-3}$ ，即当 ϕ_1 的均方误差小于 1×10^{-3} 时，停止训练。

其它参数设置同 4.1 节。采用一阶深度 Anderson 方法， α_0 初始值设为 1。

3.4.3 结果分析：源迭代与深度学习结合方法对该问题计算结果如表 5 所示。

表 5 二维两材料计算结果

Tab. 5 Numerical Results of Two-dimensional Examples with Two-material

方法	$k_{\text{eff_net}}$	$k_{\text{eff_cor}}$	k_{eff} 相对误差	外迭代次数	$\text{MSE}_1/10^{-4}$	$\text{MSE}_2/10^{-4}$	loss1	loss2
MSIDL	0.8451	0.8378	0.0087	153	9.5664	4.2012	1.3262×10^{-3}	3.9391×10^{-4}
MSIDL+AA1	0.8434		0.0067	127	8.1504	3.4201	9.8246×10^{-4}	3.1263×10^{-4}

与 3.1 节实验相比，本实验中采样点数量较 3.1 节中有所增加，收敛准则由 3.1 节的 $\text{mean}\{\text{abs}[(\phi_1^n - \phi_1^{n-1})/\phi_1^{n-1}]\} < 0.005$ 变化为现在的 $\text{MSE}_{\text{u1}} < 1 \times 10^{-3}$ ，由表 5 可知，此时获取的数值解精度相对较高，不加速方法以及一阶加速方法所得的 k_{eff} 误差均比 3.1 节中小，PINN 源迭代法的 k_{eff} 与参考解相对误差为 8.7%，快、热群 MSE 分别为 9.5664×10^{-4} 、 4.2012×10^{-4} ；采用 Anderson 一阶加速后， k_{eff} 与参考解相对误差为 6.7%，快、热群 MSE 分别为 8.1504×10^{-4} 、 3.4201×10^{-4} ；并且在提高数值解精度的情况下，本实验中一阶加速方法仍比不加速方法迭代次数减少约 17.0%。因此在求解高精度数值解时，Anderson 加速方法也能有效减少迭代次数，表明了该加速方法的有效性。

4 结论

本文将基于物理驱动人工智能 PINN 方法与传统源迭代法结合，建立中子少群扩散方程求解方法 MSIDL，同时采用 Anderson 方法进行迭代加速，使用多个例题对源迭代与深度学习结合方法 MSIDL 及加速效果进行数值验证。经实验结果表明，该方法能计算出连续中子通量密度分布，均方误差在 $10^{-2} \sim 10^{-4}$ 数量级，且该方法在二维多材料、三维单材料问题上对 k_{eff} 的计算可达到百分位至千分位的精度，Anderson 加速方法在保持计算精度的同时，有效减少了迭代次数，采用一阶 Anderson 加速方法迭代次数减少约 30% 以上，采用二阶 Anderson 加速方法迭代次数减少约 10%，表明 Anderson 方法能有效减少迭代次数，提高训练效率；同时一阶加速总体比二阶加速效果更好，原因是深度学习方法固有的随机性能保证其泛化能力，迭代两次之前的结果对本次迭代不一定能起到正向作用。后续将针对更加复杂材料和几何对 MSIDL 方法进行充分验算。

5 参考文献

- [1] 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.
- [2] Lu L, Meng X, Mao Z, et al. DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations[J]. *SIAM review*, 2021, 63(1): 208-228.
- [3] Lu L, Jin P, Pang G, et al. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators[J]. *Nature machine intelligence*, 2021, 3(3): 218-229.
- [4] Pang G, Lu L, Karniadakis G E. fPINNs: Fractional physics-informed neural networks[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2019, 41(4): A2603-A2626.
- [5] Yang L, Meng X, Karniadakis G E. B-PINNs: Bayesian physics-informed neural networks for forward and inverse PDE problems with noisy data[J]. *Journal of Computational Physics*, 2021, 425: 109913.
- [6] Jagtap A D, Kharazmi E, Karniadakis G E. Conservative physics-informed neural networks on discrete domains for conservation laws: Applications to forward and inverse problems[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 365: 113028.
- [7] Meng X, Li Z, Zhang D, et al. PPINN: Parareal physics-informed neural network for time-dependent PDEs[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2020, 370: 113250.
- [8] 刘东, 罗琦, 唐雷, 等. 基于 PINN 深度机器学习技术求解多维中子学扩散方程[J]. *核动力工程*, 2022, 43 (2): 1-8.
- [9] Wang J, Peng X, Chen Z, et al. Surrogate modeling for neutron diffusion problems based on conservative physics-informed neural networks with boundary conditions enforcement[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2022, 176: 109234.
- [10] 刘东, 唐雷, 安萍, 等. 核反应堆有效增殖系数深度学习直接搜索求解方法[J]. *核动力工程*, 2023, 44(05): 6-14.
- [11] Anderson D G. Iterative procedures for nonlinear integral equations[J]. *Journal of the ACM (JACM)*, 1965, 12(4): 547-560.
- [12] Hamilton S, Berrill M, Clarno K, et al. An assessment of coupling algorithms for nuclear reactor core physics simulations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2016, 311: 241-257.
- [13] Pawlowski R P, Salinger A G. On the Performance of Anderson Acceleration for Multiphysics Problems[R]. Sandia National Lab.(SNL-NM), Albuquerque, NM (United States), 2015.
- [14] An Ping, Ma Yong-qiang, Xiao Peng, Guo Feng Chen, Lu Wei, Development and validation of reactor nuclear design code CORCA-3D, *Nuclear Engineering and Technology*, 2019, 51(7): 1721-1728.

(责任编辑: 梁欣)