

PINNuclear-Neutrons 项目笔记

刘洋¹

1. 四川师范大学数学科学学院, 四川成都 610066

E-mail: mathliuyang@163.com

通信作者简介: 刘洋 (1997-), 男, 研究生, 主要研究方向: 偏微分方程与数学物理

摘要 PINNuclear-Neutrons 项目旨在学习和复现核反应堆中子相关问题的解决方法, 使用物理反应神经网络 (PINN) 和深度机器学习技术。我们的主要目标是重新实现刘东老师团队发表的“基于 PINN 深度机器学习技术求解多维中子学扩散方程”, 以更准确地模拟中子传输。鼓励对核能技术和深度学习感兴趣的研究人员和学生参与到这个项目中。在各个子目录中, 您将找到有关每个主题的详细说明和示例。

关键词 基于物理信息指引的神经网络模型; 深度学习; 核反应堆; 中子学扩散方程

引言

物理和工程动力系统可以用普通微分方程 (ODEs) 或偏微分方程 (PDEs) 建模, 可以通过解析方法或数值方法如有限差分法 (FDM) 和有限元法 (FEM) 来求解。然而, 最近出现了一种新的求解微分方程 (DE) 的方法, 涉及使用深度学习神经网络 (DNNs), 可以在专用硬件系统上执行。DNNs 首次用于解微分方程是在 1998 年由 Lagaris 提出的, 后来由 Raissi 和 Karniadakis 进一步发展成为物理信息神经网络 (PINNs)。PINNs 利用神经网络的通用逼近特性来解微分方程, 同时提供了一种不需要域离散化的无网格方法。与传统的数值求解器 (如 FEM 和 FDM) 相比, PINNs 利用自动微分 (AD) 这一优化技术。AD 使用链式法则来计算导数, 而不是依赖于导数的符号表达式。PINNs 通过将控制 ODEs/PDEs 和初始条件 (IC) 以及边界条件 (BC) 整合到损失函数中来整合物理定律。这个过程建立了理论约束和偏见, 以补充测量数据。PINNs 可以应用于监督和无监督学习任务, 以及正向和反向问题。与大多数深度学习方法相比, PINNs 的训练过程需要的数据量要少得多, 因为 PINN 的性能与训练数据的数量没有直接关系。PINNs 吸引了广泛的技术领域的研究人员的兴趣, 包括热传递、结构动力学、流体力学、固体力学和核反应堆动力学等。

1 PINNuclear-Neutrons 项目简介

PINNuclear-Neutrons 项目旨在学习和复现核反应堆中子相关问题的解决方法, 使用物理反应神经网络 (PINN) 和深度机器学习技术。我们的主要目标是重新实现刘东老师团队发表的“基于 PINN

深度机器学习技术求解多维中子学扩散方程”，以更准确地模拟中子传输。鼓励对核能技术和深度学习感兴趣的研究人员和学生参与到这个项目中。在各个子目录中，您将找到有关每个主题的详细说明和示例。

2 PINNuclear-Neutrons 项目的学习笔记

基于 PINN 深度机器学习技术求解多维中子学扩散方程临界条件下稳态扩散方程的验证当系统处于稳态时, 形式为:

$$\nabla^2 \phi(r) + \frac{k_{\infty}/k_{\text{eff}} - 1}{L^2} \phi(r) = 0$$

当系统处于临界状态 ($k_{\text{eff}} = 1$) 时, 为:

$$\nabla^2 \phi(r) + B_g^2 \phi(r) = 0$$

其中, B_g^2 为系统临界时的几何曲率, 与系统的几何特性相关, 临界时等于材料曲率。

为了验证计算结果, 选取针对特定几何有解析解的扩散方程进行数值验证, 相关结论也可供其他形式的方程与几何形式参考。验证计算神经网络架构均采用全连接方式, 激活函数选取具有高阶导数连续特点的双曲正切函数 \tanh , 其形式为 $\tanh(x) = (e^x - e^{-x}) / (e^x + e^{-x})$, 网络初始值权重 $\{\vec{w}, \vec{b}\}$ 采用高斯分布随机采样。平板的解析解为: $C \cdot \cos(x \cdot \pi/a)$; 球的解析解为: $C/r \cdot \sin(\pi \cdot r/R)$;

验证计算神经网络的超参数设定为: 深度 $l = 16$, 中间层隐藏神经元数量 $s = 20$, 边界权重 $P_b = 100$, $C = 0.5$, 几何网格点随机均布, 学习率从 0.001 开始, 训练至损失函数值 f_{Loss} 在 100 次学习内不再下降结束。

```

1     import deepxde as dde
2     import numpy as np
3
4     # 初始化参数
5     k_eff = 1 # 有效增殖系数
6     a = 1 # 平板的宽度
7     B2 = (np.pi / a) ** 2 # 系统临界时的几何曲率
8     l = 16 # 神经网络的深度
9     s = 20 # 神经网络的中间层隐藏神经元数量
10    Pb = 100 # 边界权重
11    C = 0.5 # 解析解参数
12
13
14    # 定义解析解
15    def phi_analytical(x):
16        return C * np.cos(x * np.pi / a)
17
18
19    # 定义几何网格
20    geom = dde.geometry.Interval(-a / 2, a / 2)
21
22
23    # 定义微分方程
24    def pde(x, phi):

```

```

25     dphi_xx = dde.grad.hessian(phi, x, i=0, j=0)
26     return dphi_xx + B2 * phi
27
28
29     # 定义边界条件
30     bc = dde.icbc.DirichletBC(geom, lambda x: 0, lambda _, on_boundary: on_boundary)
31     # 定义数据
32     data = dde.data.PDE(geom, pde, bc, num_domain=898, num_boundary=2, solution=phi_analytical
33         , num_test=100)
34     # 定义神经网络
35     layer_size = [1] + [s] * l + [1]
36     activation = "tanh"
37     # 网络初始值权重采用高斯分布随机采样
38     initializer = "Glorot uniform"
39     net = dde.nn.PFNN(layer_size, activation, initializer)
40     # 定义模型
41     model = dde.Model(data, net)
42     # 定义求解器
43     model.compile("adam", lr=0.001, metrics=["l2 relative error"], loss_weights=[1, Pb])
44     # 训练模型
45     losshistory, train_state = model.train(epochs=3500)
46     # 保存和可视化训练结果
47     dde.saveplot(losshistory, train_state, issave=True, isplot=True)
48
49     # 输出在 x=0 处的值 (即 C)
50     print("Predicted value at x=0:", model.predict(np.array([0])))

```

3 结束语

本文主要介绍了 PINNuclear-Neutrons 项目的学习笔记，主要是对 PINNuclear-Neutrons 项目的学习过程进行了总结，复习了论文中的算例代码，并对项目中的一些关键代码进行了解读，对项目中的一些关键参数进行了调整，以便更好地理解论文中的算法。

参考文献

- 1 Prantikos, K., Chatzidakis, S., Tsoukalas, L.H., Heifetz, A. (2023). Physics-informed neural network with transfer learning (TL-PINN) based on domain similarity measure for prediction of nuclear reactor transients. *Scientific Reports*, 13, 16840.
- 2 Raissi, M., Perdikaris, P., Karniadakis, G.E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686–707.
- 3 任清华 (2022). 基于深度学习的偏微分方程求解方法 (硕士). 山东大学.
- 4 孙靖威 (2023). 基于深度学习求解偏微分方程的研究 (硕士). 天津师范大学.
- 5 曾壬源 (2022). 基于深度神经网络的偏微分方程求解 (硕士). 中国科学技术大学.
- 6 颜怀笑 (2023). 深度学习在工程问题偏微分方程求解中的应用 (硕士). 兰州大学.
- 7 刘东, 唐雷, 安萍, 张斌, 江勇 (n.d.). 核反应堆有效增殖系数深度学习直接搜索求解方法. *核动力工程*, 1–9.
- 8 刘东, 王雪强, 张斌, 俞蔡阳, 宫兆虎, 陈奇隆 (2023). 深度学习方法求解中子输运方程的微分变阶理论. *原子能科学技术*, 57, 946–959.
- 9 刘东, 罗琦, 唐雷, 安萍, 杨帆 (2022). 基于 PINN 深度机器学习技术求解多维中子学扩散方程. *核动力工程*, 43, 1–8.

PINNuclear-Neutrons Project Notes

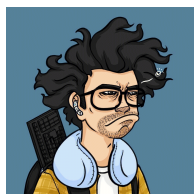
Liu Yang¹

1. *School of Mathematical Sciences, Sichuan Normal University, Chengdu 610068, Sichuan*

E-mail: mathliuyang@163.com

Abstract PINNuclear-Neutrons project aims to learn and reproduce the solution of neutron related problems in nuclear reactor, using physical reaction neural network (PINN) and deep machine learning technology. Our main goal is to re-implement the "Solving Multidimensional Neutron Diffusion Equation Based on PINN Deep Machine Learning Technology" published by Liu Dong's team, so as to simulate neutron transport more accurately.

Keywords PINN; Deep Learning; Nuclear Reactor; Neutron Diffusion Equation



Liu Yang was born in Sichuan in 1997. He is currently a master's student in the School of Mathematical Sciences, Sichuan Normal University. His research interests include partial differential equations and mathematical physics.