

基于MCMC方法的子通道程序模型参数 不确定性量化分析研究

何鑫¹ 宋美琪¹ 刘晓晶^{1,2}

1(上海交通大学 智慧能源创新学院 上海 200240)

2(上海交通大学 核科学与工程学院 上海 200240)

摘要 假定模型参数的不确定性服从正态分布,根据贝叶斯原理,其最可能的分布是结合先验信息和观测信息得到的最大后验概率,马尔科夫链蒙特卡罗(Markov Chain Monte Carlo, MCMC)抽样适用于此类反问题求解。鉴于随机论方法的巨大计算量,本研究利用BP(Back Propagation)神经网络及相对熵最小化来自适应加密训练数据,从而建立替代复杂正向程序的代理模型,并利用开发的不确定性分析程序对影响空泡份额的模型参数不确定性进行量化分析,选用的子通道程序为COBRA-IV。结果表明:在求得模型参数不确定性后,通过不确定性正向传递得到结果的95%置信区间对实验值的包络性较好,利用不确定性均值对模型进行标定得到的结果较基准值更接近实验值。因此,本研究建立的不确定性量化分析方法能较好适用于子通道程序的不确定性分析。

关键词 马尔科夫链蒙特卡罗抽样, 代理模型, 不确定性分析, 空泡份额, 反问题求解

中图分类号 TL99

DOI: 10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.120602

Uncertainty quantification methodology for model parameters in sub-channel codes using MCMC sampling

HE Xin¹ SONG Meiqi¹ LIU Xiaojing^{1,2}

1(College of Smart Energy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

2(School of Nuclear Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract [Background] Traditional safety analysis methods rely on expert advice and user self-evaluation, lacking the ability to quantify output uncertainty. In contrast, the best estimation plus uncertainty (BEPU) methodology can quantify the uncertainty of the output, thereby avoiding unnecessary conservative assumptions and improving the economic viability of nuclear power. It is now widely used in the design and safety analysis of nuclear reactors. However, owing to the cognitive limitations of science and numerical approximation in programs, most thermal-hydraulic programs lack sufficient input uncertainty information related to internal models, often relying on expert advice. [Purpose] This study aims to investigate the uncertainty quantification methodology for model parameters in sub-channel codes using Markov Chain Monte Carlo (MCMC) sampling. [Methods] Firstly, the PSBT void fraction distribution experiments were employed to evaluate the prediction ability of the subchannel program COBRA-IV, and

国家自然科学基金(No.U20B2011)资助

第一作者: 何鑫, 女, 2000年出生, 2021年毕业于哈尔滨工业大学, 现为硕士研究生, 研究领域为子通道程序不确定性分析

通信作者: 刘晓晶, E-mail: xiaojingliu@sjtu.edu.cn; 宋美琪, E-mail: songmeiqi@sjtu.edu.cn

收稿日期: 2023-06-01, 修回日期: 2023-07-01

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.U20B2011)

First author: HE Xin, female, born in 2000, graduated from Harbin Institute of Technology in 2021, master student, focusing on uncertainty analysis of subchannel program

Corresponding author: LIU Xiaojing, E-mail: xiaojingliu@sjtu.edu.cn; SONG Meiqi, E-mail: songmeiqi@sjtu.edu.cn

Received date: 2023-06-01, revised date: 2023-07-01

a Python-based uncertainty analysis methodology was developed to quantitatively analyze the model parameter uncertainties that affect the void fraction. Then, the model parameters were assumed to be independent, with their uncertainties following a normal distribution. Based on the Bayesian principle, the most likely maximum a posteriori probability function (PDF) of the model parameters were obtained by combining the prior and observed information, despite the limited actual uncertainty information. Finally, an MCMC sampling methodology was adopted to solve the Bayesian relation, and the statistical uncertainty information of the model parameters were obtained using a stable a posteriori Markov chain, which requires at least 104 magnitudes to achieve convergence and the corresponding forward program runs. Therefore, to reduce the calculation cost and improve the calculation efficiency, a high-precision adaptive BPNN surrogate model was constructed to replace the complex and time-consuming forward program code. Furthermore, a set of uncertainty quantification methods with Python was developed to simultaneously quantify the uncertainty of the model parameters using a statistical method. During the selection of a slip model we discovered that both the slip ratio and turbulence mixing coefficient significantly affected the void fraction. Therefore, we developed. **[Results]** The results indicate that after obtaining the uncertainty of the model parameters, the 95% confidence interval of the results generated by the forward propagation of input uncertainty enveloped the experimental values well. Furthermore, by incorporating the mean value of the model parameter uncertainties, obtained via uncertainty quantification, the modified model output exhibited a closer agreement with the experimental values than with the reference values. **[Conclusions]** The uncertainty quantification analysis methodology established in this study can be applied to the uncertainty analysis of subchannel program model parameters.

Key words Markov chain Monte Carlo sampling, Surrogate model, Uncertainty quantification, Void fraction, Inverse problem solving

相较于保守性安全分析,最佳估算结合不确定性分析能更加真实准确地模拟反应堆运行状况,更适合核电厂的安全裕度分析与性能评价^[1]。1989年,美国核管理委员会发布了RGL157管理导则,允许在应急堆芯冷却系统(Emergency Core Cooling System, ECCS)分析中使用最佳估算程序,但要对计算结果的不确定性进行评估^[2]。此后,多种与现实性程序相关的不确定性分析方法被开发出来,如著名的程序缩放模拟、应用及不确定性分析(Code Scaling, Applicability and Uncertainty, CSAU)方法^[3]、西屋公司采用的ASTRUM(Advanced Statistical Treatment of Uncertainty Method)方法^[4]、德国开发的GRS(Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit)方法^[5]、意大利开发的UMAE(Uncertainty Method based on Accuracy Extrapolation)方法^[6]等,主要可以分为基于输入的不确定性正向传递和基于输出的不确定性外推,前者的发展更为成熟,应用更加广泛^[7]。这些方法大多要提前给定不确定性来源的分布,但受制于数值模型近似和认知水平局限,大多数热工水力程序并没有提供足够的与内部模型相关的输入不确定性信息,通常由专家评估给出。

近年来,一些代替专家保守评价的分析方法陆续被提出,如利用快速傅里叶变化来评估输入参数

变化范围的FFTBM(Fast Fourier Transformation Based Methods)方法^[8]、通过不断调整参数边界来评估程序计算值对实验数据的覆盖率得到参数的伪累积分布函数的DIPE(Determination of Input Parameters Empirical properties)方法^[9]、基于线性假设通过EM(expectation Maximization)算法评估模型参数不确定性的CIRCÉ(Calcul des Incertitudes Relatives aux Corrélations Élémentaires)方法^[10],以及通过确定性和概率性数据同化方法求解线性和非线性问题的MCDA(Model Calibration through Data Assimilation method)方法^[11]等。Wilks等^[12]利用Metropolis算法实现马尔科夫链蒙特卡罗(Markov Chain Monte Carlo, MCMC)抽样,对收敛到平稳目标分布的马尔科夫链进行抽样统计,从而获得反问题的解。随机论对应着大量的正向计算,因此建立高精度的代理模型来替代复杂的正向程序有着重要意义。李冬等^[13]对MCDA方法的非线性部分进行改进,通过建立高精度的RBF(Radial Basis Function)神经网络代理模型来简化正向计算,并将其应用于再淹没现象中物理模型参数不确定性的评估。Wu等^[14]采用基于高斯过程(Gaussian Process, GP)代理模型的改进模块化贝叶斯方法对TRACE程序的相关物理模型参数进行不确定性分析。

子通道程序是重要的堆芯热工水力安全分析工

具,但由于对热工水力模型的认识仍存在欠缺,在相关的设计和安全分析中会采用一些保守估计,导致程序计算结果存在一定不确定性。而现阶段的不确定性分析大多针对系统程序,有关子通道程序模型参数的不确定性量化分析相对较少。本研究采用随机论方法,利用MCMC抽样构造以模型参数不确定性后验分布为平稳分布的马尔科夫链进行抽样统计,并通过相对熵最小化自适应加密训练数据从而构建高精度BPNN(Back Propagation Neural Network)代理模型代替复杂的系统程序,从而对影响空泡份额的模型参数进行了不确定性量化分析。

1 模型参数的不确定性量化分析方法

不确定性分析是指识别和量化影响输出的所有不确定性因素,特别是不能通过实验直接测量的关键模型参数,并基于不确定性的正向传递得到输出结果总的不确定性分布^[7]。不确定性的来源^[15]有程序模型偏差,数值计算近似,边界条件和初始条件不充分等,其中程序模型对物理现象的近似是不确定

$$p^{\text{post}}(\mathbf{x}|\mathbf{y}_m) = \frac{p^{\text{prior}}(\mathbf{x})L(\mathbf{y}_m|\mathbf{x})}{p(\mathbf{y}_m)} \propto \exp\left\{\left[(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_x^{\text{prior}})^T(\mathbf{C}_x^{\text{prior}})^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_x^{\text{prior}}) + \sum_{j=1}^q \frac{(y_{m_j} - h_j(\mathbf{x}))^2}{\sigma_{\text{exp},j}^2}\right]\right\} \quad (2)$$

本研究通过Metropolis算法实现MCMC抽样求解式(2)。首先,需要构建一个合理的提议函数,并根据接受概率 α 判断是否保留第 t 步的采样点 \mathbf{x}^* , \mathbf{x}^* 在 $\mathbf{x}^* \sim N(\mathbf{x}^{(t-1)}, \mathbf{C}^{(t-1)})$ 中抽样产生,直至通过循环产生的点构成的马尔科夫链可以稳定收敛到后验分布。接受概率表示为式(3)。

$$\alpha = \min\left(1, \frac{p^{\text{post}}(\mathbf{x}^*|\mathbf{y}_m)}{p^{\text{post}}(\mathbf{x}^{(t-1)}|\mathbf{y}_m)}\right) \quad (3)$$

然而,要想得到稳定的马尔科夫链,抽样次数至少达到 10^4 数量级,在求解公式(2)时需要调用相应次数的最佳估算程序,这意味着巨大的计算量。为了提高计算效率,可通过BPNN建立代理模型代替式(2)中的 $\sum_{j=1}^q \frac{(y_{m_j} - h_j(\mathbf{x}))^2}{\sigma_{\text{exp},j}^2}$ 。

1.2 BPNN代理模型构建及训练数据自适应加密

BPNN对非线性函数的拟合性较好,具有收敛速度快,鲁棒性好,适应性强的优点。BPNN是利用误差反向传播算法进行训练的多层前馈神经网络,它将网络输出的误差平方作为目标函数,利用梯度下降法求解目标函数的最小值实现权值的更新。其中输入层的样本点 $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 是在上一步迭代样

性的根本来源。

1.1 模型参数的不确定性量化

不确定性分析需要确定模型参数基准值的无量纲常数 $\mathbf{k}(\mathbf{k} = (k_j)_{j=1..p}, p$ 指模型参数个数),可用 $k_j = e^{x_j}$ 表示^[16]。其中, $\mathbf{x} = (x_j)_{j=1..p}$ 指模型参数的不确定性, $\mathbf{y} = (y_j)_{j=1..q}$ (q 指实验点个数),表示程序响应的不确定性,不确定性在正向程序中的传递关系可简化为 $\mathbf{y} = h(\mathbf{x})$ 。假设参数之间相互独立,可以用正态分布来描述未知模型参数的不确定,即 $\mathbf{x} \sim N(\boldsymbol{\mu}_x, \mathbf{C}_x)$ 。实验测量值 \mathbf{y}^{exp} 与程序预测值 \mathbf{y}^{code} 为真实值 \mathbf{y}^{real} 的求解提供了参考,两者差值 \mathbf{y}_m 可用式(1)表示,其中: \mathbf{e} 指实验误差,且 $\mathbf{e} \sim N(0, \boldsymbol{\sigma}_{\text{exp}})$ 。

$$\mathbf{y}_m = \mathbf{y}^{\text{exp}} - \mathbf{y}^{\text{code}} = (\mathbf{y}^{\text{exp}} - \mathbf{y}^{\text{real}}) + (\mathbf{y}^{\text{real}} - \mathbf{y}^{\text{code}}) = \mathbf{e} + \mathbf{y} \quad (1)$$

根据贝叶斯原理,模型参数的后验概率 $p^{\text{post}}(\mathbf{x}|\mathbf{y}_m)$ 可表示为式(2),其中 $p^{\text{prior}}(\mathbf{x})$ 是模型参数不确定性的先验概率密度, $p(\mathbf{y}_m)$ 指可观测误差的概率,可看作常数。 $L(\mathbf{y}_m|\mathbf{x})$ 指模型参数不确定性 \mathbf{x} 关于可观测误差 \mathbf{y}_m 的似然函数。

本空间中通过随机抽样产生,隐藏层采用sigmoid函数,输出层通过运行外部正向程序得到 \mathbf{x} 对应的 $\sum_{j=1}^q \frac{(y_{m_j} - f_j(\mathbf{x}))^2}{\sigma_{\text{exp},j}^2}$ 构成。

为提高代理模型的精度,训练样本点要尽可能在接近后验概率的空间上取到,可利用相对熵最小化在高后验概率空间自适应加密样本点^[17]。提议空间 $p^{\text{pro}}(\mathbf{x})$ 与后验概率空间 $p^{\text{post}}(\mathbf{x}|\mathbf{y}_m)$ 的差异表示为式(4),其展开式的前一项与 $p^{\text{pro}}(\mathbf{x})$ 无关。因此最小化 $D_{\text{KL}}(p^{\text{post}}||p^{\text{pro}})$ 等同于最大化后一项,记为 $D(\boldsymbol{\theta}^{\text{pro}})$,表示为式(5)。可通过 $\frac{\partial D(\boldsymbol{\theta}^{\text{pro}})}{\partial \mu_{x_j}} = 0$,

$$\frac{\partial D(\boldsymbol{\theta}^{\text{pro}})}{\partial \sigma_{x_j}^{\text{pro}}} = 0$$
来不断更新提议分布的均值与方差,

直至满足收敛要求。在建立满足精度要求的代理模型后,给定随机抽样产生的输入样本点 \mathbf{x} ,就可以利用BPNN代理模型得到对应的输出。

$$\begin{aligned} D_{\text{KL}}(p^{\text{post}}||p^{\text{pro}}) &= \int p^{\text{post}}(\mathbf{x}|\mathbf{y}_m) \ln \frac{p^{\text{post}}(\mathbf{x}|\mathbf{y}_m)}{p^{\text{pro}}(\mathbf{x})} d\mathbf{x} \\ &= \int p^{\text{post}}(\mathbf{x}|\mathbf{y}_m) \ln p^{\text{post}}(\mathbf{x}|\mathbf{y}_m) d\mathbf{x} - \int p^{\text{post}}(\mathbf{x}|\mathbf{y}_m) \ln p^{\text{pro}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (4)$$

$$D(\theta^{\text{pro}}) = \int p^{\text{post}}(\mathbf{x}|\mathbf{y}_m) \ln p^{\text{pro}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (5)$$

1.3 不确定性分析方法验证

本文设置了一个简单算例验证上述方法的准确性,其函数表达式如式(6)所示,其中, x_1 与 x_2 相互独立,可知其最大概率点位于点(3,4),方差分别是0.4和0.3。

$$f(x_1, x_2) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{(x_1 - 3)^2}{0.4^2} + \frac{(x_2 - 4)^2}{0.3^2}\right)\right) \quad (6)$$

按照前面所述方法,建立 $g(\mathbf{x}) = \frac{(x_1 - 3)^2}{0.4^2} + \frac{(x_2 - 4)^2}{0.3^2}$ 的代理模型 $\tilde{g}(\mathbf{x})$,整个不确定性分析方法的流程如图1所示。首先给定 x_1 和 x_2 的先验分布,假设 $x_1^{\text{prior}} \sim N(2, 0.1)$, $x_2^{\text{prior}} \sim N(2, 0.1)$,并通过拉丁超立方抽样在 x_1 和 x_2 的先验空间获取少量样本点,将其输入到外部正向程序获得对应输出,建立初

始BPNN代理模型。利用相对熵最小化方法自适应加密训练样本点从而可以在高后验概率密度空间进行抽样,此处需要利用已建立的BPNN代理模型和蒙特卡罗抽样,使得 $D(\theta^{\text{pro}})$ 最大化。多次迭代,直到满足收敛要求,从而确定最终代理模型,否则,不断重复上述过程,直到满足要求。其中收敛准则^[18]为 $\tilde{g}^{(t)}(\mu_x^{\text{pro}, t}) > \tilde{g}^{(t-1)}(\mu_x^{\text{pro}, t-1})$ 或 $\tilde{g}^{(t)}(\mu_x^{\text{pro}, t}) < \varepsilon$,其中,上标 t 和 $(t-1)$ 分别表示第 t 和 $(t-1)$ 次迭代, ε 代表迭代收敛指标,这里设置为0.001。收敛条件的前一项是为了避免外部正向程序的数值不稳定,当此次迭代的代价函数小于上一次迭代就停止计算;收敛条件的后一项表示代价函数小于给定的数值。表1是自适应加密样本点时每一次迭代的提议参数的变化情况,可以看出最终的提议分布与后验分布很接近。在确立了最终代理模型后,就可以利用MCMC抽样得到参数的不确定性分布,本研究编写不确定分析程序时使用的Python语言。

表1 自适应加密过程中的提议参数
Table 1 Proposed parameters for adaptive encryption

迭代次数 Iteration times	$\mu_{x_1}^{\text{pro}}$	$\mu_{x_2}^{\text{pro}}$	$\sigma_{x_1}^{\text{pro}}$	$\sigma_{x_2}^{\text{pro}}$	$g(\mu_{x_1}^{\text{pro}}, \mu_{x_2}^{\text{pro}})$
0	2	2	0.1	0.1	43.061 8
1	2.060 339 78	2.161 652 62	0.194 794 50	0.183 065 97	24.478 4
2	2.293 104 12	2.613 720 11	0.290 378 64	0.175 015 99	10.389 2
3	2.533 876 10	3.096 206 72	0.443 189 61	0.162 979 61	2.439 26
4	2.913 810 26	3.537 998 59	0.340 335 16	0.132 918 88	0.587 00
5	3.076 087 01	3.778 482 20	0.515 250 26	0.180 676 64	0.002 125
6	3.019 567 73	4.001 705 07	0.404 149 85	0.285 124 67	8.715 76

2 子通道程序不确定性分析

2.1 子通道程序对PSBT空泡份额实验不确定性量化分析

压水堆子通道及管束试验(PWR Sub-channel and Bundle Tests, PSBT)是OECD/NRC发布的一套基准,主要用于验证子通道和管束中空泡份额及偏离泡核沸腾(Departure from Nucleate Boiling, DNB),实验数据包括单相流管束出口的温度分布、稳态和瞬态的空泡份额以及临界功率^[19]。空泡的存在会影响反应堆堆芯棒束的传热效率,所以能否高效准确地预测空泡份额具有重要意义。

本研究通过子通道程序COBRA-IV模拟PSBT基准一阶段稳态空泡份额分布,从而对子通道程序的计算能力和不确定性进行分析。选取PSBT稳态工况的30组空泡份额实验数据,其压力变化范围是7.36~14.71 MPa,质量流量变化范围是1 380.6~2 288.9 kg·(m²·s)⁻¹,加热功率变化范围是1 920~

3 536 kW,入口温度变化范围是173.5~287.8 °C。选取其中的25组,利用开发的不确定性分析程序反向量化对空泡份额有重要影响的模型参数的不确定性,在确定模型参数的不确定性后,基于不确定性正向传递的方法,利用另外5组实验数据对不确定性结果进行评估。

在选用滑移模型作为空泡份额模型时,滑速比和湍流交混系数是影响空泡份额的主要模型参数^[20],其他影响空泡份额的边界条件参数不确定性可认为服从均值为0的正态分布,标准差可通过PSBT实验测量精度确定,并按照3 σ 原则进行处理^[21],结果如表2所示。由于多波束系统测量弦向平均孔隙率的稳态精度为 $\pm 4\%$,可确定实验误差 σ_{exp} 为4%^[21]。

本研究采用滑移模型,其滑速比可以进行设置。滑速比和湍流交混系数根据如下标准进行选取^[22]:根据最小熵增原理可计算14 MPa下的滑速比为1.86,但通常最佳估算程序的计算值要大于实验测

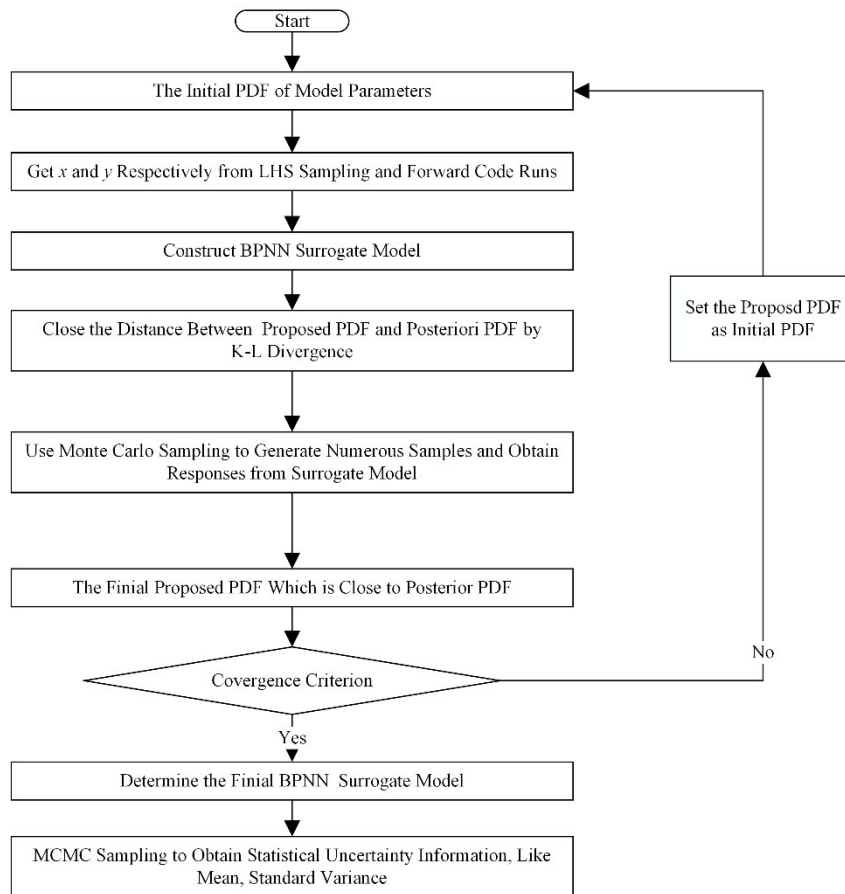


图1 不确定性分析流程图

Fig.1 Flowchart of uncertainty analysis

表2 边界条件参数的不确定性分布

Table 2 Uncertainty distribution of boundary condition parameters

编号 No.	相关参数 Related parameter	均值 Mean value	标准差 Standard deviation / %
1	压力 Pressure	0	0.333
2	入口温度 Inlet temperature	0	0.133
3	质量流量 Mass flow	0	0.5
4	热流密度 Heat flux	0	0.333
5	功率分布 Power distribution	0	1

量值;均相模型是最典型的单向流模型,认为气相和液相之间不存在相对滑移,即滑速比为1,因此,最终将滑速比的基准值设为1.2。Castellana实验与本研究选择的工况相似,因此取湍流交混系数的基准值为0.008。

将滑速比和湍流交混系数设置为选定的基准值进行计算,子通道程序的空泡份额预测值和实验测量值的对比如图2所示,数据点越靠近直线表明程序预测结果与实验结果越接近,两条虚线代表实验误差范围。可以发现整体的预测值要高于实验测量值,尤其是在低空泡份额有很多数据点落在了实验误差范围外,这说明所选用的模型不确定性较大,需要对其进行量化分析。

2.2 模型参数不确定性分析结果

根据图1的不确定性分析流程图,首先需要确定初次迭代的先验分布,这里两个模型参数服从相同的先验分布,即 $s^{\text{prior}} \sim N(0, 0.1)$, $\beta^{\text{prior}} \sim N(0, 0.1)$,其中 s 为滑速比, β 为湍流交混系数。每次迭代的抽样个数为10,选取其中25组实验工况用于模型参数的不确定性分析。将每组工况距离加热底端2 669 mm和3 177 mm的中心子通道空泡份额平均值作为实验测量值,建立 $g(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{50} \frac{(y_{\text{exp},j} - h_j(\mu^{\text{pro}}(s), \mu^{\text{pro}}(\beta)))^2}{\sigma_{\text{exp},j}^2}$ 的代理模型。

利用相对熵最小化原理在自适应加密过程中得到的模型参数的提议分布如表3所示,可以看到,在

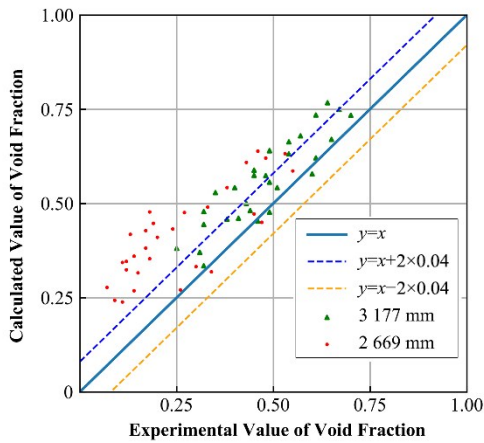


图2 空泡份额实验值与计算值对比图
Fig.2 Comparison between the experimental and calculated void fraction values

三次迭代后满足了收敛准则的前一项条件。由于

表3 自适应加密迭代过程中得到的提议参数
Table 3 Parameters proposed by adaptive algorithm iterations

迭代次数 Iteration times	μ_s^{pro}	μ_β^{pro}	σ_s^{pro}	$\sigma_\beta^{\text{pro}}$	$g(\mu_{x_1}^{\text{pro}}, \mu_{x_2}^{\text{pro}})$
0	0	0	0.1	0.1	267.606
1	0.326 361 55	-0.121 673 84	0.101 055 54	0.146 140 04	230.899
2	0.540 180 39	0.001 248 39	0.153 653 07	0.267 939 87	241.762

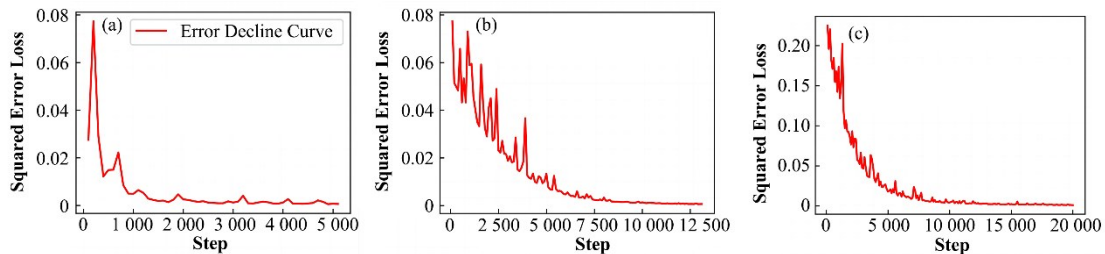


图3 建立BPNN代理模型时的误差下降曲线
Fig.3 Error decline curve when establishing the BPNN surrogate model

表4 模型参数不确定性分布的均值与标准差
Table 4 Uncertainty distribution of the mean and standard variance for the model parameters

模型参数 Model parameter	均值 Mean value	标准差 Standard deviation
滑速比 Slip ratio	0.498 850 36	0.187 062 32
湍流交混系数 Turbulent mixing parameter	0.041 123 49	0.500 499 95

通过上述方法得到模型参数的不确定性后，同时考虑模型参数和边界条件的不确定性，利用另外5组实验数据，基于不确定性的正向传递方法得到计算结果95%的置信区间对实验值的包络性情况。根据 Wilks 公式，需要最少93次抽样才能得到双边容忍限和置信度均为95%的情况^[23]，可通过蒙特卡罗方法进行不确定性的正向传递，运行93次最佳估算程序，将计算结果的最值作为置信区间的上下限。图6为双95%置信区间的上下限包络性检验，可以发现，不确定带对实验值的包络性较好。利用模型

$g(x)$ 表示50个样本点的累计误差，以及在计算中还存在其他的随机误差，模型误差等因素，所以会导致程序计算结果与实验值不会完全重合。采用小批量随机梯度下降法来对BPNN进行训练，在建立BPNN代理模型过程中每次迭代的网络误差下降曲线分别如图3(a~c)所示。本研究尝试了多种不同的初始先验分布以及每次迭代时采用不同的抽样点数，最终得到的提议参数与表3类似。

在得到满足要求的代理模型后，进行MCMC抽样，设置链长为20000。为了避免马尔科夫链前期发散，对第5000~20000个点进行了统计分析，模型参数不确定性的结果如表4所示。利用自适应Metropolis算法得到的滑速比和湍流交混系数的随机样本游走点及频次分布直方图分别如图4和图5所示。

参数不确定性统计均值对参数基准值进行修正，图7为模型修正值和基准值的计算结果和实验数据的对比，可以看出，修正后的模型预测值较原基准值预测结果更加接近实验测量值，其中模型修正值计算结果与实验值的平均绝对误差 (Mean Absolute Error, MAE) 和均方根误差 (Root Mean Square Error, RMSE) 分别为3.356%和4.079%，而基准值计算结果与实验值的MAE与RMSE分别为12.028%和12.695%。

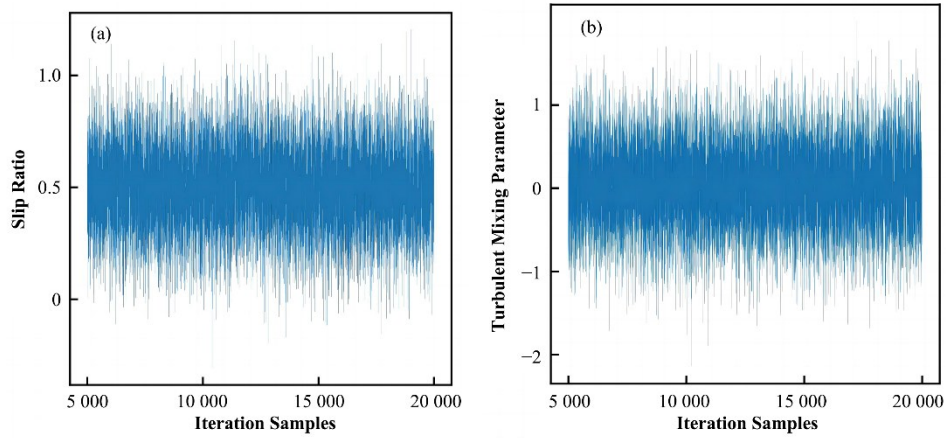


图4 自适应Metropolis 算法产生的样本路径图 (a) s 的样本随机游走, (b) β 的样本随机游走
 Fig.4 Sample path of the adaptive Metropolis algorithm (a) Random-walk samples from s , (b) Random-walk samples from β

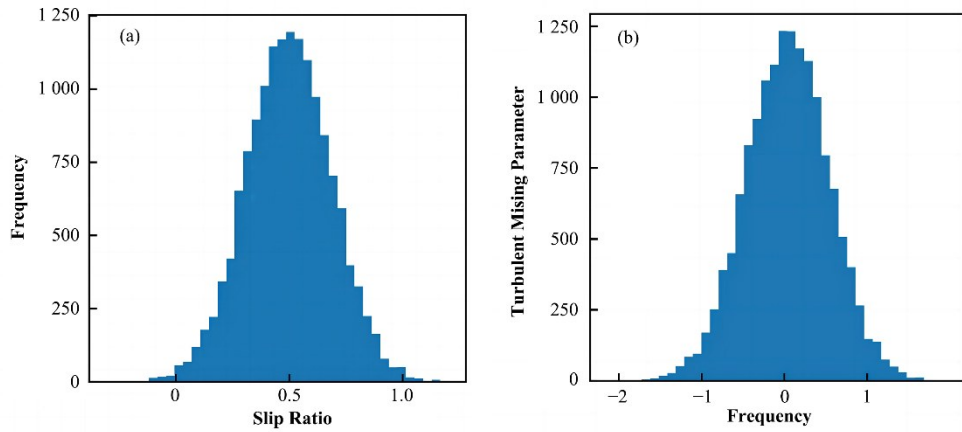


图5 20 000 次迭代样本的频次直方图 (a) s 的频次直方图, (b) β 的频次直方图
 Fig.5 Frequency histogram of 20 000 iteration samples (a) Frequency histogram of s , (b) Frequency histogram of β

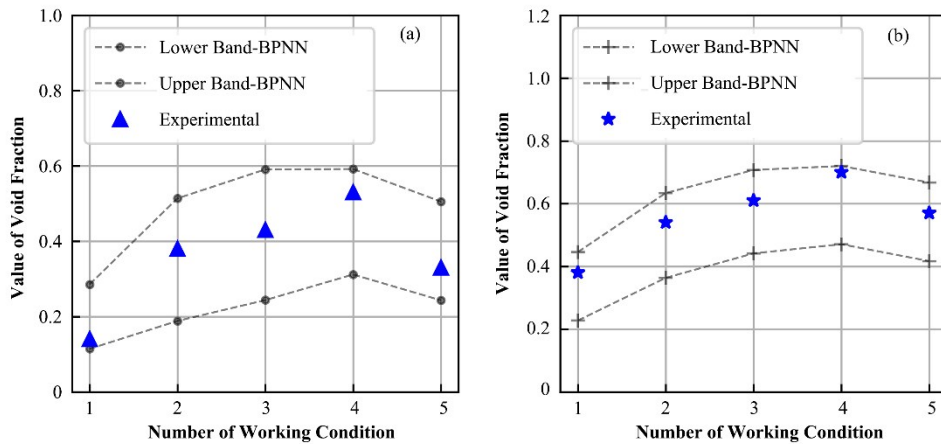


图6 95%置信区间的包容性检验 (a) 2 669 mm 测量点的空泡份额, (b) 3 177 mm 测量点的空泡份额
 Fig.6 Envelop test for 95% confidence interval (a) Void fraction at 2 669 mm, (b) Void fraction at 3 177 mm

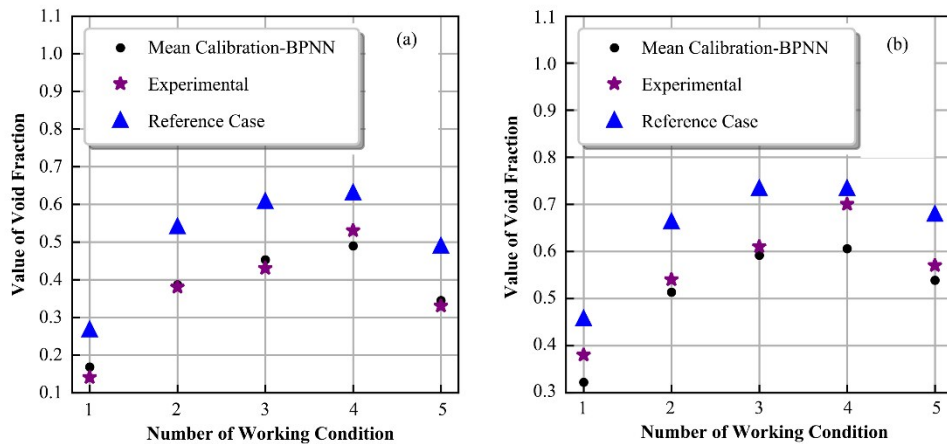


图7 模型参数均值修正后结果 (a) 2 669 mm测量点的空泡份额,(b) 3 177 mm测量点的空泡份额
Fig.7 Calibration resultsof the two modified model parameters (a) Void fraction at 2 669 mm, (b) Void fraction at 3 177 mm

3 结语

本研究利用开发的Python不确定性分析工具同时对多个模型参数不确定性进行分析,得到了滑速比和湍流交混系数的不确定性分布。在所选的计算模型和实验工况范围内,滑速比的不确定性较湍流交混系数更大。得到输入参数不确定性后,基于不确定性正向传递方法,得到了95%置信区间的空泡份额不确定带,并利用模型参数不确定性均值对基准值进行修正,结果表明:

1)原模型基准值预测结果要普遍高于实际测量值,尤其在低空泡份额情况,很多点落在了精度范围外。基于不确定性正向传递方法,包容性检验得到的95%置信区间不确定带对实验值包容性较好。

2)利用模型参数不确定性均值对基准值进行修正,修正后的模型预测结果较基准值预测结果更加接近实验值。因此本研究建立的不确定性量化分析方法能较好适用于子通道程序模型参数不确定性分析,这为后续的子通道程序不确定性研究提供了参考。

作者贡献声明 何鑫负责研究方案设计,论文撰写,实施研究,代码编写,采集数据,分析/解释数据;宋美琪负责研究方案设计,对文章的知识性内容作批评性审阅,论文指导与修改,代码调试,实验结果数据分析;刘晓晶负责研究方案设计,获取研究经费,技术支持,论文指导与修改,实验结果数据分析,支持性贡献等。

参考文献

- 1 D'Auria F, Camargo C, Mazzantini O. Best Estimate Plus Uncertainty (BEPU) approach in licensing current nuclear reactors[J]. Nuclear Engineering and Design, 2012, **248**: 317 - 328. DOI: 10.1016/j.nucengdes.2012.04.002.
- 2 冉旭, 吴丹, 陈炳德, 等. 最佳估算加不确定性分析方法及其应用研究[J]. 核动力工程, 2013, **34**(3): 120 - 123. RAN Xu, WU Dan, CHEN Bingde, *et al.* Best estimate plus uncertainty method and its applications[J]. Nuclear Power Engineering, 2013, **34**(3): 120 - 123.
- 3 Skorek T, de Crécy A, Kovtonyuk A, *et al.* Quantification of the uncertainty of the physical models in the system thermal-hydraulic codes - PREMIUM benchmark[J]. Nuclear Engineering and Design, 2019, **354**: 110199. DOI: 10.1016/j.nucengdes.2019.110199.
- 4 余建辉, 张经瑜, 郑利民. 大破口 LOCA 事故 ASTRUM 最佳估算分析方法优化研究[J]. 核技术, 2014, **37**(9): 090606. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2014.hjs.37.090606. YU Jianhui, ZHANG Jingyu, ZHENG Limin. ASTRUM optimization for large-break LOCA analysis[J]. Nuclear Techniques, 2014, **37**(9): 090606. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2014.hjs.37.090606.
- 5 Glaeser H. GRS method for uncertainty and sensitivity evaluation of code results and applications[J]. Science and Technology of Nuclear Installations, 2008, **2008**: 1 - 7. DOI: 10.1155/2008/798901.
- 6 Borges R C, D'Auria F, Alvim A C M. Independent qualification of the CIAU tool based on the uncertainty estimate in the prediction of Angra 1 NPP inadvertent load rejection transient[C]//Proceedings of 10th International Conference on Nuclear Engineering. April 14-18, 2002, Arlington, Virginia, USA. 2009: 163 - 170. DOI: 10.1115/ICONE10-22135.
- 7 Wu X, Xie Z Y, Alsafadi F, *et al.* A comprehensive survey of the inverse uncertainty quantification of physical model parameters in nuclear system thermal-hydraulics

- codes[J]. Nuclear Engineering and Design, 2021, **384**: 111460. DOI: [10.1016/j.nucengdes.2021.111460](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2021.111460).
- 8 Xu H, Badea A F, Cheng X. Sensitivity analysis of thermal-hydraulic models based on FFTBM-MSM two-layer method for PKL IBLOCA experiment[J]. Annals of Nuclear Energy, 2020, **147**: 107732. DOI: [10.1016/j.anucene.2020.107732](https://doi.org/10.1016/j.anucene.2020.107732).
 - 9 Joucla J, Probst P. DIPE: Determination of input parameter uncertainties methodology applied to CATHARE V_{2.51}[J]. Journal of Power and Energy Systems, 2008, **2**(1): 409 - 420. DOI: [10.1299/jpes.2.409](https://doi.org/10.1299/jpes.2.409).
 - 10 Celeux G, Grimaud A, Lefèvre Y, *et al.* Identifying intrinsic variability in multivariate systems using linearized inverse methods[J]. Inverse Problems in Science and Engineering, 2010, **18**(3): 401 - 415. DOI: [10.1080/17415971003624330](https://doi.org/10.1080/17415971003624330).
 - 11 Wang G S, Chen S L. Evaluation of a soil greenhouse gas emission model based on Bayesian inference and MCMC: model uncertainty[J]. Ecological Modelling, 2013, **253**: 97 - 106. DOI: [10.1016/j.ecolmodel.2012.09.010](https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2012.09.010).
 - 12 Spiegelhalter D J, Best N G, Gilks W R, *et al.* Hepatitis B: a case study using the MCMC methods[J]. Markov Chain Monte Carlo in Practice, 1996, **89**: 575 - 598. DOI: [10.1007/978-1-4899-4485-6](https://doi.org/10.1007/978-1-4899-4485-6).
 - 13 Li D, Liu X J, Yang Y H. Investigation of uncertainty quantification method for BE models using MCMC approach and application to assessment with FEBA data [J]. Annals of Nuclear Energy, 2017, **107**: 62 - 70. DOI: [10.1016/j.anucene.2017.04.020](https://doi.org/10.1016/j.anucene.2017.04.020).
 - 14 Wu X, Kozłowski T, Meidani H, *et al.* Inverse uncertainty quantification using the modular Bayesian approach based on the Gaussian process Part 1: theory[J]. Nuclear Engineering and Design, 2018, **335**: 339 - 355. DOI: [10.1016/j.nucengdes.2018.06.004](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2018.06.004).
 - 15 冉旭, 张晓华, 李捷, 等. 核电厂最佳估算加不确定性分析方法研究综述[J]. 科技视界, 2015(24): 11 - 13, 16. DOI: [10.19694/j.cnki.issn2095-2457.2015.24.003](https://doi.org/10.19694/j.cnki.issn2095-2457.2015.24.003).
RAN Xu, ZHANG Xiaohua, LI Jie, *et al.* Overview of the development of the best estimate plus uncertainty safety analysis[J]. Science & Technology Vision, 2015(24): 11 - 13, 16. DOI: [10.19694/j.cnki.issn2095-2457.2015.24.003](https://doi.org/10.19694/j.cnki.issn2095-2457.2015.24.003).
 - 16 Skorek T, de Crécy A, Kovtonyuk A, *et al.* Quantification of the uncertainty of the physical models in the system thermal-hydraulic codes - PREMIUM benchmark[J]. Nuclear Engineering and Design, 2019, **354**: 110199. DOI: [10.1016/j.nucengdes.2019.110199](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2019.110199).
 - 17 Li J L, Marzouk Y. Adaptive construction of surrogates for the Bayesian solution of inverse problems[J]. SIAM Journal of Scientific Computing, 2014, **36**(3): A1163 - A1186. DOI: [10.1137/130938189](https://doi.org/10.1137/130938189).
 - 18 李冬. 最佳估算模型的不确定性量化方法研究及再淹没模型评估的应用[D]. 上海: 上海交通大学, 2017.
LI Dong. Research on quantification method of uncertainty of optimal estimation model and application of reflooding model evaluation[D]. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University, 2017.
 - 19 Borowiec K, Wang C, Kozłowski T, *et al.* Uncertainty quantification for steady-state PSBT benchmarks using surrogate models[J]. Transactions of the American Nuclear Society, 2017, **117**: 119 - 122.
 - 20 杜芸, 刘晓晶, 程旭. COBRA-IV对8×8棒束计算的不确定性分析[J]. 原子能科学技术, 2014, **48**(4): 622 - 629. DOI: [10.7538/yzk.2014.48.04.0622](https://doi.org/10.7538/yzk.2014.48.04.0622).
DU Yun, LIU Xiaojing, CHENG Xu. Uncertainty analysis of COBRA-IV calculation of 8 × 8 bundle experiment[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2014, **48**(4): 622 - 629. DOI: [10.7538/yzk.2014.48.04.0622](https://doi.org/10.7538/yzk.2014.48.04.0622).
 - 21 Panka I, Keresztúri A. Assessment of the uncertainties of COBRA subchannel calculations using a PWR-type rod bundle and the OECD NEA UAM and the PSBT benchmark data[J]. Kerntechnik, 2014, **79**(4): 359 - 366. DOI: [10.3139/124.110460](https://doi.org/10.3139/124.110460).
 - 22 张俊涛, 刘晓晶, 张腾飞, 等. 子通道程序对PSBT空泡分布实验计算的不确定性量化分析[J]. 上海交通大学学报, 2022, **56**(10): 1420 - 1426. DOI: [10.16183/j.cnki.jsjtu.2021.068](https://doi.org/10.16183/j.cnki.jsjtu.2021.068).
ZHANG Juntao, LIU Xiaojing, ZHANG Tengfei, *et al.* Quantitative analysis of uncertainty in experimental calculation of PSBT cavitation distribution by subchannel program[J]. Journal of Shanghai Jiao Tong University, 2022, **56**(10): 1420 - 1426. DOI: [10.16183/j.cnki.jsjtu.2021.068](https://doi.org/10.16183/j.cnki.jsjtu.2021.068).
 - 23 Wilks S S. Determination of sample sizes for setting tolerance limits[J]. The Annals of Mathematical Statistics, 1941, **12**(1): 91 - 96. DOI: [10.1214/aoms/1177731788](https://doi.org/10.1214/aoms/1177731788).