

基于长短期记忆网络的涉核运输事故后果预测

阮灵盼^{1,2} 陈春花¹ 陈黎伟³ 阮方^{1,2} 李夏娟² 汪建业¹

¹(中国科学院合肥物质科学研究院 合肥 230031)

²(中国科学技术大学 合肥 230026)

³(合肥师范学院 合肥 230026)

摘要 涉核部件在运输过程中, 会因不可抗力因素发生化学爆炸事故, 造成放射性核素的泄漏。在此类源项信息不完整、地形复杂的放射性核素扩散情景下, 实现核素浓度变化的快速预测对于核应急决策具有重要意义。本文以山丘下垫面下含钚炸药运输化学爆炸事故为研究场景, 提出了一种基于堆叠式 LSTM 网络的核运输爆炸事故放射性核素浓度预测方法。本文通过计算流体学(CFD)软件 OpenFOAM 模拟生成放射性核素 Pu-239 的扩散数据, 根据地理特征和人口密度, 选择特定区域的核素浓度和气象时序数据作为堆叠式 LSTM 网络训练和预测的数据集。基于网格搜索寻找局部最优的模型结构, 最终所提出的模型在 150 次迭代内可以稳定地达到平均绝对百分比误差(MAPE)低于 5% 的 Pu-239 核素浓度预测效果。该模型具有较好的预测效率, 在突发核应急场景中具有较高的实用价值。

关键词 核应急, 化学爆炸事故, 涉核运输, 放射性核素

中图分类号 TL73, TL91

DOI: 10.11889/j.1000-3436.2023-0016

引用该文:

阮灵盼, 陈春花, 陈黎伟, 等. 基于长短期记忆网络的涉核运输事故后果预测[J]. 辐射研究与辐射工艺学报, 2023, 41(4): 040601. DOI: 10.11889/j.1000-3436.2023-0016.

RUAN Lingpan, CHEN Chunhua, CHEN Liwei, *et al.* Consequence prediction in nuclear transport explosion accident using long short-term memory network[J]. Journal of Radiation Research and Radiation Processing, 2023, 41(4): 040601. DOI: 10.11889/j.1000-3436.2023-0016.



Consequence prediction in nuclear transport explosion accident using long short-term memory network

RUAN Lingpan^{1,2} CHEN Chunhua¹ CHEN Liwei³ RUAN Fang^{1,2} LI Xiajuan² WANG Jianye¹

¹(Hefei Institutes of Physical Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

²(University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

³(Hefei Normal University, Hefei 230026, China)

基金资助: 安徽省高校优秀青年人才支持计划一般项目(gxyq2022060)资助

第一作者: 阮灵盼, 男, 1998 年 2 月出生, 2020 年毕业于浙江工业大学并获得理学学士学位, 现为能源动力硕士研究生, 从事核素扩散模拟技术研究

通信作者: 陈春花, 博士, 副研究员, E-mail: chunhua.chen@inest.cas.cn

收稿日期: 初稿 2023-03-01; 修回 2023-03-21

Supported by Outstanding Talent Support Program in University of Anhui Province (gxyq2022060)

First author: RUAN Lingpan (male) was born in February 1998, and graduated from Zhejiang University of Technology with a bachelor's degree in science in 2020. Now he is a graduate student of energy and power, engaged in nuclear diffusion simulation technical support research

Corresponding author: CHEN Chunhua, doctoral degree, associate professor, E-mail: chunhua.chen@inest.cas.cn

Received 01 March 2023; accepted 21 March 2023

ABSTRACT During the transportation of components related to nuclear materials, accidental chemical explosions may occur, resulting in the release of radionuclides. Effective decision-making during nuclear transport accidents, especially in cases with incomplete source information and a complex terrain, requires the rapid prediction of changes in radionuclide concentration. This paper proposes a method for predicting the concentration of radionuclides resulting from nuclear transport explosion accidents based on stacked long short-term memory (LSTM) networks. Specifically, this study considered plutonium-containing explosive transport and chemical explosion accidents under the pad surface of a hill as a research scenario. The diffusion data of radionuclide Pu-239 were simulated using the computational fluid dynamics (CFD) software OpenFOAM. Nuclide concentration and meteorological time series data of a specific area were selected for stacked LSTM network training and prediction based on geographical characteristics and population density. The proposed model, optimized using grid search, can stably achieve a mean absolute percentage error (MAPE) of less than 5% within 150 iterations for Pu-239 nuclide concentration prediction. The model is highly efficient and has significant practical value for use in nuclear emergencies.

KEYWORDS Nuclear emergency, Chemical explosion accident, Nuclear transport, Radionuclide concentration prediction

CLC TL73, TL91

涉核部件在运输过程中,会因不可抗力因素发生化学爆炸事故,造成了放射性核素的泄漏。按照美国国防部1990年9月颁布的《Nuclear weapon accident response procedures》,核武器事故的起因大致分为7类,其中第四类为核武器化学爆炸引起的放射性污染事故^[1]。1950年至1968年间,美国至少发生了22起因地面交通事故引起的核武器事故,其中大部分起因为化学爆炸^[2-3]。Pu-239是核武器中重要的裂变材料之一,在化学爆炸带来的高温高压环境下,Pu-239很容易以气溶胶形式泄漏^[4],其通过内照射很容易在人体骨髓脏器等器官和组织中富集,对人体生命健康具有长期危害影响^[5-6]。

目前,核素扩散的主流研究方法主要有大气示踪实验、风洞实验和数值模拟^[7-8]。大气示踪和风洞实验方法虽然真实性高,但所需花费的时间和经济成本相对较高。另一种更有效的研究核素扩散的方法是通过高斯、拉格朗日、欧拉和计算流体力学等数值模型来实现对不同的事故场景的建模和分析^[9-12]。其中,计算流体力学方法在求解复杂地形下大气污染物的扩散分布时尤为有效^[13-14]。这类方法模拟精度高,被广泛应用于复杂场景,但缺点是其对输入源项信息、气象信息、地理信息等边界条件依赖性大,对预置参数精度要求很高^[15]。然而,在发生核运输化学爆炸事故时,源项信息往往难以直接获取,且此类事故具有随机性特点。地理位置、气候多变、地理条件复杂等特点,使得传统主流核素扩散模拟方法难以及时应对。因此,对源项信

息不完备、下垫面复杂场景下的核素扩散预测研究具有重要意义。

长短期记忆网络是循环神经网络的改进算法,由Hochreiter于1997年首先提出^[16]。基于堆叠式长短期记忆(Long short-term memory, LSTM)的网络模型已证明其在环境科学研究中记忆长程依赖性的出色能力。Zhao等^[17]提出了一种基于LSTM空气污染预测模型,利用历史空气质量数据、气象数据和天气预报数据来预测特定空气质量监测站48 h内的PM_{2.5}污染情况。Yang等^[18]提出了一种集成了贝叶斯优化、经验分解和LSTM的混合模型,实现了CO₂浓度的长期预测。LYU等^[19]提出了一种基于LSTM的编码器-解码器模型,实现了气体浓度的短期预测。本文基于场景相似性,将LSTM网络应用于放射性核素预测研究。

本文提出了一种基于堆叠式LSTM网络方法来预测源项信息不完备情况下的放射性核素浓度变化。以山丘下垫面含钚炸药运输化学爆炸事故为研究案例,通过获取爆炸后特定区域放射性核素Pu-239的浓度值和气象时序数据,预测未来放射性核素浓度变化。本研究可为核应急决策提供数据参考,有利于降低核应急成本。

1 方法

本研究的总体技术路线如图1所示,主要包括数据集准备和LSTM预测两部分。在预测放射性核素浓度分布变化过程中考虑了化学爆炸事故后的

气象因素。由于真实的放射性核素浓度数据难以获取,本文通过选取基于课题组前期研究已得验证的CFD仿真模型来模拟核素扩散过程^[20-21],以此得到核素扩散的原始时序数据。将原始数据经过图1右侧所示的一系列流程处理,转化为可供网络模型

训练与预测的数据集。最后,通过对比模型预测值与CFD模拟值的相对误差来验证本研究的有效性,通过展示网络模型的收敛速度来证明模型的实用性。

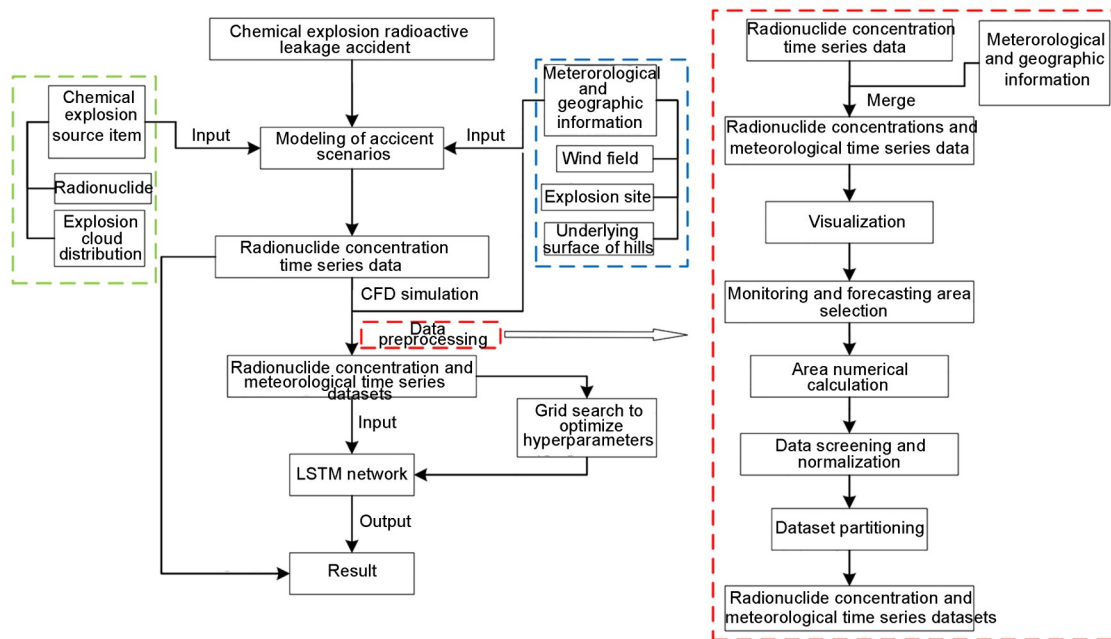


图1 总体技术路线
Fig.1 Technical route

1.1 计算流体力学方法

CFD方法在模拟复杂条件下核素扩散场景中被广泛应用。常用于计算模型内部或周围的流体流动,是一种多物理场耦合的解决方法。此方法的计算涉及多种现象的相互作用,包括流体力学和热力学。其基本原理是对连续的流体偏微分方程求数值解,以离散的数值解来近似模拟流体运动。

本文利用CFD软件OpenFOAM模拟含钚炸药运输化学爆炸事故下的放射性核素分散过程,主要包括流场模拟和放射性核素浓度模拟^[20-21]。

1.1.1 流场模拟

流场的质量守恒方程与动量守恒方程见式(1)、(2)。

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho \overline{u'_i u'_j} \right) \quad (2)$$

式中: ρ 为放射性气溶胶密度, kg/m^3 ; t 为时间, s ; u 为速度, m/s ; μ 为动力黏度, $\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$ 。

1.1.2 放射性核素浓度模拟

放射性核素浓度变化还须考虑其在扩散中发生的衰变和沉积作用,因此,放射性核素浓度方程由式(3)给出。

$$\rho \frac{\partial C}{\partial t} + \rho \frac{\partial(u_i C)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_c \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) + S_c + R + D \quad (3)$$

式中: C 表示放射性核素的浓度, Bq/m^3 ; Γ_c 表示湍流扩散系数, m^2/s ; u_i 则表示在三维方向上的流体速度, m/s ; S_c 表示放射性核素泄漏的源, $\text{Bq}/(\text{m}^3\cdot\text{s})$; R 和 D 表示因核素衰变和沉积而产生的汇, $\text{Bq}/(\text{m}^3\cdot\text{s})$ 。

1.2 长短期记忆网络(LSTM)

长短期记忆网络(LSTM)是一个同时拥有长时期记忆和短时期记忆的循环神经网络。其单元结构如图2所示。

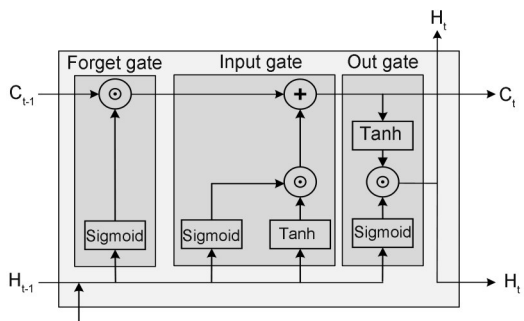


图2 LSTM单元结构图(“ \odot ”表示哈达玛积,“+”表示矩阵加法)

Fig.2 LSTM unit (" \odot " denotes the hadamard product, "+" denotes the matrix addition)

LSTM单元包含3种状态和3种特殊的门结构。存储单元状态(C)保留时间序列中的隐藏信息,以便LSTM单元保持长期依赖关系;输出状态(H)保留当前时刻LSTM单元的隐藏信息;输入状态(X)是当前时刻的输入信息。三种特殊的门结构分别为遗忘门、输入门和输出门,本质上是不同状态之间的组合操作。遗忘门借助Sigmoid激活函数为先前状态分配介于0与1之间的值,通过与先前状态

相乘的方式来控制长期记忆的遗忘程度,其中,1代表完全保留,0代表完全遗忘;输入门通过Sigmoid和Tanh激活函数来控制当前时刻下输入信息在长期状态的嵌入程度;输出门则通过Sigmoid激活函数控制当前状态下的信息输出程度,即短期记忆的传播。

最初的LSTM网络模型是由一个隐含的LSTM层和一个标准的前馈输出层组成。随着深度神经网络的提出,越来越多的研究显示,通过增加额外的隐含层和神经元,可以使得神经网络有更大的特征抽取能力^[22-24]。深度神经网络可以视为一个处理通道,每一层都会解决一部分问题,每一层的输出作为特征抽象的Embedding,再将其传递给下一层,直至输出最后结果。堆叠的LSTM网络具有多个隐含的LSTM层,其中每个层包含多个LSTM单元。由于LSTM网络是对时序数据进行处理操作,意味着随着时间的推移,隐含层的增加可以提升模型对输入的抽象提取能力,不同的隐含层从不同的时间尺度上对输入进行观察^[23]。堆叠式LSTM网络结构如图3所示。

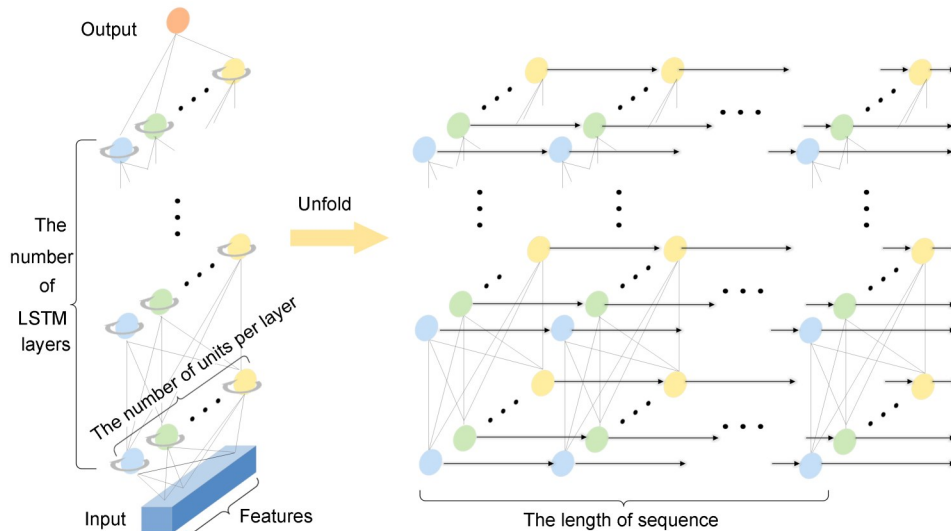


图3 堆叠式LSTM网络结构图

Fig.3 Stacked LSTM network

2 案例研究

2.1 场景源项介绍

美国“Roller Coaster”^[25]实验曾对含钚炸药进行了爆轰实验,得到了不同爆炸质量、不同炸药容器

和爆炸烟云高度、顺风方向下不同爆炸物不同位置的气溶胶浓度、沉积活性和放射性活度的分布规律。基于历史实验数据^[26-27],得到TNT炸药质量与爆炸烟云高度和半径之间的经验公式如式(4)所示。

$$\begin{cases} H_{\text{TNT}} = 61.54W^{\frac{1}{4}} \\ R_{\text{TNT}} = 13.13W^{\frac{1}{4}} \end{cases} \quad (4)$$

式中： H_{TNT} 表示 TNT 爆炸产生的柱状烟云的高度，m； R_{TNT} 表示 TNT 爆炸产生的柱状烟云的半径，m； W 表示 TNT 的质量，kg。

依据典型的运输事故情景和爆炸烟云经验公式，本研究将含钚炸药在运输过程中的化学爆炸事故设定为研究场景。设置爆炸初始柱状烟云高度范围为 0~249 m，半径为 53 m。选择放射性核素 Pu-239 作为源项，初始源强度设置为 $1 \times 10^9 \text{ Bq/m}^3$ ，东北方向风速设置为 1.4 m/s。爆炸烟云扩散的下垫面设置为 3 km×3 km 的山丘地形，下垫面模型如图 4 所示。

在地形和植被等复杂条件的影下，近地表气流容易产生湍流。为了准确模拟泄漏核素的分布，本文引入标准 $k-\varepsilon$ 湍流模型^[13]，综合考虑核素衰变和

$$\begin{cases} \frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}}{\partial x_i} \right) \right] + \rho g + S_{\bar{u}_i} \\ S_{\bar{u}_i} = -\lambda \left(\frac{1}{2} \rho \bar{u}_j |\bar{u}_i| \right) \end{cases} \quad (6)$$

式中： μ_t 表示湍流黏度， $\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$ ； $S_{\bar{u}_i}$ 表示动量源损失， $\text{Bq}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ ； λ 表示压力损失系数， m^{-1} 。

泄漏的放射性核素会受衰变和沉积的影响，因此浓度方程(式(3))也需要针对沉积和核素衰变进行修正^[20,28]。目前，化学爆炸事故中放射性气溶胶源的相关实证数据表明，钚材料化所需的能量为

$$\begin{cases} \frac{\partial(\rho C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_i C)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma_c \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) + S_c - (\lambda_d + v_d) C \\ \lambda_d = \frac{0.693}{T_{1/2}} \end{cases} \quad (7)$$

式中： λ_d 表示核素衰变因子； v_d 表示核素沉积因子； $T_{1/2}(d)$ 表示核素半衰期。

2.2 数据处理

数据预处理流程图如图 1 中的红色虚线框所示，其中包括：扩散数据的可视化、预测区域的选择、预测区域的数值计算、数据筛选和标准化以及

动量源损失，并建立了基于 CFD 方法的改进模型，模拟事故条件下放射性核素的扩散过程。

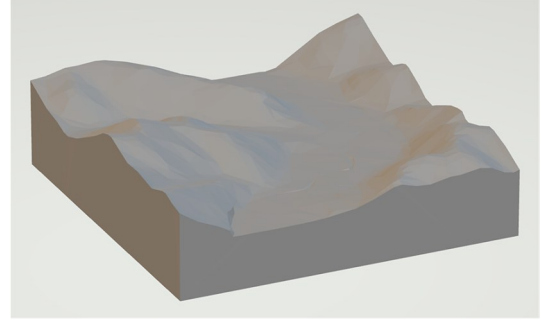


图4 山丘下垫面模型
Fig.4 Underlying surface model

简化后的质量守恒方程与动量守恒方程如式(5)、(6)所示。

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (5)$$

2 MJ/kg，炸药化学爆炸中提供的能量一般大于此值^[29]。因此，约 95% 的钚材料在化学爆炸中会被雾化，80% 的气溶胶颗粒的粒径小于 1 μm ，10% 的粒径介于 10~20 μm ，10% 的粒径大于 20 μm ^[30]。因此，本文将沉积因子设置为 1×10^2 。

修正后的放射性核素浓度方程可写为式(7)。

数据集分区。

步骤 1: 扩散数据的可视化。根据 §2.1 中设置的源项，从 OpenFOAM 获得 Pu-239 的扩散数据，扩散数据时间步长为 5 s，总扩散时间为 80 min。图 5 展示了 Pu-239 扩散分布在 200 m 高度的浓度变化图，其中 $\ln(C)$ 为浓度的自然对数，白色区域为山丘的部分。

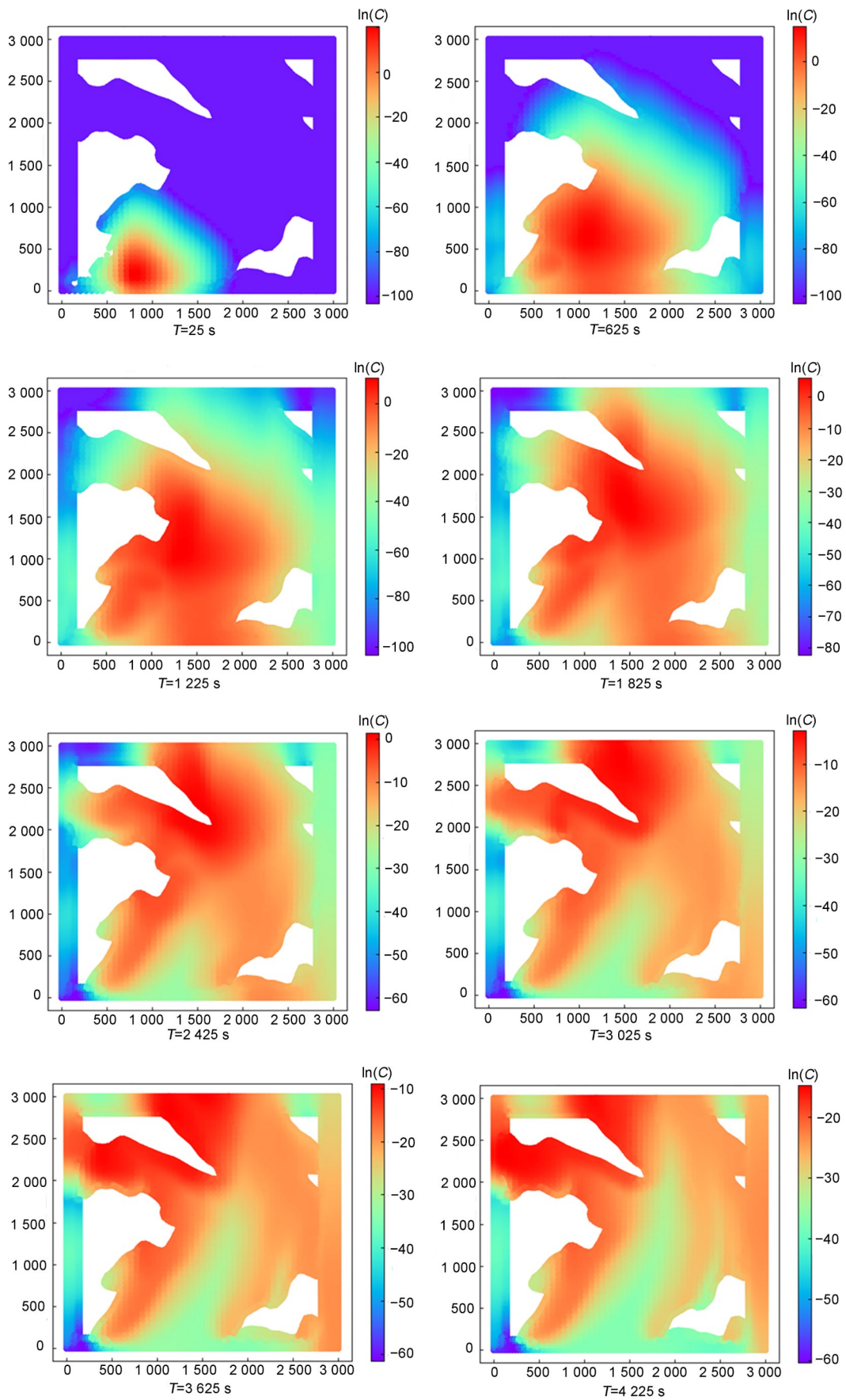


图5 Pu-239浓度在不同时间的水平分布($Z=200$ m)(彩色见网络版)

Fig.5 Horizontal distribution of Pu-239 concentration at different time (in the XY plane where $Z=200$ m) (color online)

步骤2: 选择预测区域。根据地理位置的特殊性和人动密度, 选择了两个放射性核素监测和预报区域, 即:

- 区域 A: $X(1\ 600\ \text{m}, 1\ 700\ \text{m}), Y(1\ 300\ \text{m}, 1\ 400\ \text{m})$
- 区域 B: $X(930\ \text{m}, 1\ 030\ \text{m}), Y(1\ 100\ \text{m}, 1\ 200\ \text{m})$

图6中的矩形表示所选区域。

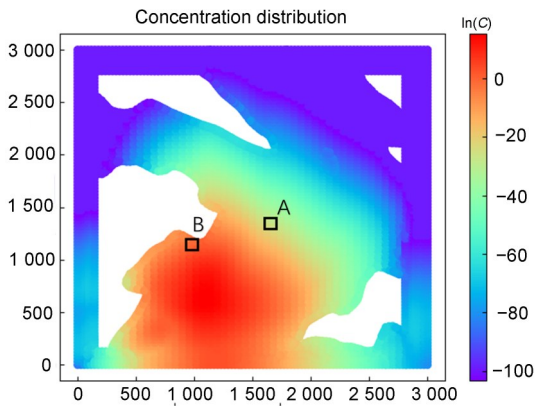


图6 Pu-239浓度在10 min时的水平分布($Z=200\ \text{m}$)
Fig.6 Horizontal distribution of Pu-239 concentration at 10 min (in the XY plane where $Z=200\ \text{m}$)

步骤3: 预测区域的数值计算。计算选定区域各数据在每个时间步长的平均值, 得到该区域的960个代表性数据, 作为初步放射性核素扩散时间序列数据集。表1显示了数据集的一部分, 其中数据集的特征包括放射性核素浓度、相对压强和三维风速。

步骤4: 数据筛选和标准化。放射性核素浓度小于 1×10^{-6} 的数据由监测设备的最小范围过滤掉。为了减小数值量级差异对神经网络预测精度的影响, 通过z-score方法对数据进行归一化。z-score公式见式(8)。

$$x' = \frac{x - \mu}{\sigma} \tag{8}$$

式中: μ 表示数值平均数; σ 表示数值标准差; x 表示原始数据; x' 表示标准化后的数据。

步骤5: 数据集划分。考虑到研究场景的特殊性, 数据以9:1的比例分为训练集和测试集。

表1 区域A处780 s至815 s的原始数据
Table 1 Preliminary data from 780 s to 815 s in area A

时间 / s	浓度 / ($\text{Bq} \cdot \text{m}^{-3}$)	相对压强 / Pa	X轴风速 / ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	Y轴风速 / ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	Z轴风速 / ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)
Time	Concentration	Relative pressure	Wind speed-X	Wind speed-Y	Wind speed-Z
780	19.187 11	0.3369 06	0.300 333	1.239 889	0.040 355
785	20.816 61	0.3372 67	0.300 599	1.239 967	0.040 489
790	22.555 58	0.3376 52	0.300 872	1.240 033	0.040 625
795	24.408 33	0.3379 43	0.301 149	1.240 111	0.040 765
800	26.379 01	0.3381 82	0.301 429	1.240 167	0.040 907
805	28.471 60	0.3384 76	0.301 714	1.240 178	0.041 052
810	30.689 79	0.3386 63	0.301 996	1.240 189	0.041 199
815	33.036 92	0.3387 99	0.302 280	1.240 167	0.041 349

2.3 基于堆叠式LSTM网络的预测模型

2.3.1 输入数据特征

一旦发生化学爆炸事故, 监测设备立即赶到目标区域, 监测获取 N 条数据。根据核应急救援要求, 对应设置输入数据参数 M 和 P 值, 其中, M 值表示预测需要输入数据的时间长度, P 值表示预测预期的未来时刻。假设 $M=10$ 且 $P=3$, LSTM网络的意义是根据当前时刻前10个时间步的数据, 预测当前时刻未来第3个时间步的放射性核素浓度。输入数据格式如图7所示。

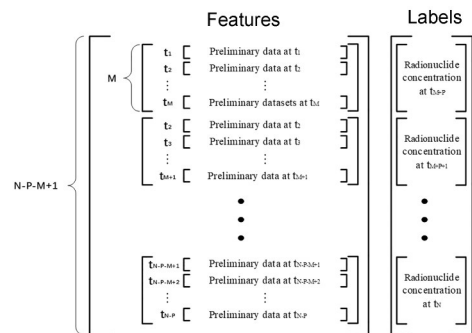


图7 输入数据格式
Fig.7 Input data format

2.3.2 优化器

Adam 优化器在训练复杂的神经网络时有着较快的收敛速度并能达到较好的训练结果。本文选取 Adam 优化器来训练 LSTM 网络。Adam 本质上是一种随机优化算法，它基于梯度的一阶矩估计和二阶矩估计来计算不同参数的相应自适应学习率。简单来说，Adam 算法计算梯度的滑动平均，并通过超参数 β_1 和 β_2 控制滑动平均的衰减率。参数更新过程如式(9)所示^[31-32]。

$$\begin{cases} m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t \\ v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2 \\ m'_t = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t} \\ v'_t = \frac{v_t}{1 - \beta_2^t} \\ \theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{v'_t} + \epsilon} m'_t \end{cases} \quad (9)$$

式中： t 表示时间； m_t 和 v_t 分别表示梯度 g_t 的一阶矩估计和二阶矩估计； m'_t 和 v'_t 是修正后的 m_t 和 v_t ； θ_t 表示需要被更新的参数； η 表示初始学习率； ϵ 、 β_1 和 β_2 分别是要被设置的超参数；在本文中，使用 Adam 优化器默认超参数，它们分别为 10^{-3} 、 10^{-8} 、0.9 和 0.999。

2.3.3 损失函数和评价指标

放射性核素浓度的预测问题属于机器学习中的回归问题。选择合适的损失函数和评价标准对网络训练的收敛速度和预测的准确性具有重要影响。考虑到不同时间放射性核素浓度的大小变化较为剧烈，因而选择平均绝对误差(MAE)作为损失函数，选择平均绝对百分比误差(MAPE)作为评

价指标。MAE 和 MAPE 公式如式 (10) 所示。

$$\begin{cases} \text{MAPE} = \frac{100\%}{n} \sum_{t=1}^n \left| \frac{\hat{Y}_t - Y_t}{Y_t} \right| \\ \text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n |\hat{Y}_t - Y_t| \end{cases} \quad (10)$$

式中： n 表示样本数量； \hat{Y}_t 表示预测值； Y_t 表示真实值。

2.3.4 模型网络结构

模型网络层包括输入层、LSTM 层、全连接层和输出层。各功能层的深度、各层神经元的数量以及连各层的激活函数都深刻影响着网络模型的精度和收敛速度。

本文使用网格搜索的方法优化网络结构，对于需要设置的超参数：LSTM 层数、密集层数、每层单元数预先给定一个范围，形成参数空间。通过遍历参数空间中的参数组合，依据时间和精度，选取性能最佳的参数组合。

通过网格搜索得到的模型性能对比结果和模型运行时间对比结果如表 2 和表 3 所示。网格搜索比较 200 次迭代中所有参数组合的最小 MAE 和 MAPE，当 LSTM 层数为 8、密集层数为 2、单元数为 16 时，模型性能最佳。将 MAE 和 MAPE 与 4、8、16 和 32 个单元进行比较，发现每层中的单元越多，模型性能越好。但当单元数增加到 64 个时，模型性能并没有显著变化，而运行时间却显著增加。

基于模型性能和模型运行时间，本文最终选取的网络结构为 LSTM 层数设置为 8，密集层数设置为 2，隐藏层单元数设置为 16。

表 2 基于网格搜索的模型性能对比
Table 2 Model performance comparison based on grid search

	全连接层数 Dense layers	平均绝对误差 / (Bq·m ⁻³) MAE				平均绝对百分比误差 / (Bq·m ⁻³) MAPE			
		2	4	6	8	2	4	6	8
LSTM 层数									
LSTM layers									
单元数=4 Units = 4	1	20.348 7	31.069 5	36.874 2	38.786 3	16.607 5	26.246 5	29.982 8	31.631
	2	23.620 7	19.986 6	29.247	40.358 3	19.562 9	16.609 6	25.029 4	33.310 1
	3	12.362	4.045 3	4.029	15.346 5	10.433 4	3.514 1	3.283 4	12.756 7
单元数=8 Units = 8	1	10.047 4	29.505	7.370 4	12.775 6	8.583 1	24.929 6	6.314 8	10.769 6
	2	13.893 8	6.885 7	8.254 3	18.402 9	11.856 8	5.804 6	7.172 1	15.239 7
	3	17.251 5	18.299	11.066 9	27.215 3	15.028 9	15.568 3	9.002	23.059 8

续表

	全连接层数 Dense layers	平均绝对误差 / (Bq·m ⁻³)				平均绝对百分比误差 / (Bq·m ⁻³)			
		MAE				MAPE			
单元数=16 Units = 16	1	5.618 7	8.727 5	4.187 9	9.550 3	4.755 7	7.639 3	3.576 9	9.994 5
	2	3.481 4	5.687 8	5.962 6	1.812 9	2.949 7	4.923 5	3.998 8	1.561 6
	3	4.682 3	9.550 5	6.833 6	4.498 1	3.921 5	8.271 7	5.713 7	5.238 3
单元数=32 Units = 32	1	10.564 5	5.629 7	9.15	7.836 8	9.292	4.905 7	8.067 8	6.929 4
	2	7.204 4	3.873 1	9.700 5	6.573 2	5.929	3.357 6	8.520 6	5.676 6
	3	8.945	11.334 5	3.335 7	10.249 5	7.743 9	9.892 5	2.789 8	8.959 6
单元数=64 Units = 16	1	4.863 7	8.404 5	7.964 3	5.635 5	4.080 8	7.281 2	6.771 9	4.728
	2	6.128	7.228 8	7.526	5.033 1	5.131 6	6.311 5	6.345 9	4.352 6
	3	6.610 4	10.830 3	9.958 9	3.846 1	5.643 3	9.118 4	8.681 9	2.523 4

表3 基于网格搜索的模型计算时间对比
Table 3 Model running time comparison based on grid search

LSTM层数 LSTM layers	全连接层数 Dense layers	时间 / ms Time			
		2	4	6	8
单元数=4 Units = 4	1	2 886	4 645	6 284	8 990
	2	3 049	4 697	6 216	8 952
	3	2 971	4 663	6 326	8 779
单元数=8 Units = 8	1	3 005	4 813	6 411	9 167
	2	3 070	4 812	6 543	9 231
	3	3 05 4	4 871	6 617	9 277
单元数=16 Units = 16	1	3 464	5 673	7 718	16 380
	2	3 396	5 655	7 781	18 768
	3	3 349	5 685	9 670	17 667
单元数=32 Units = 32	1	162 171	225 290	247 738	436 999
	2	184 227	206 015	254 425	438 195
	3	197 060	210 831	263 081	425 058
单元数=64 Units = 64	1	208 019	214 643	420 245	427 670
	2	204 623	215 532	421 523	431 274
	3	210 504	215 880	419 631	433 215

2.4 预测

图8展示了§3.1数据预处理部分选择的两个目标区域中放射性核素浓度的变化。其中，区域A位于山谷中，地势相对平坦，靠近烟云中心的扩散路径，区域B位于山脊上，靠近烟云爆炸地点。

本文假设化学爆炸事故发生 10 min 后，监测设备到达每个目标区域并开始监测核素浓度。在对放射性核素浓度数据集进行标准化和划分后，将其输入到§3.2中的LSTM网络中进行训练和预测。预测结果如图9所示。

在区域A的预测中，以1 150~1 615 s的数据作为训练集，1 620~1 670 s的数据作为测试集；在区域B的预测中，以600~1 065 s的数据作为训练集，

1 070~1 120 s的数据作为测试集。

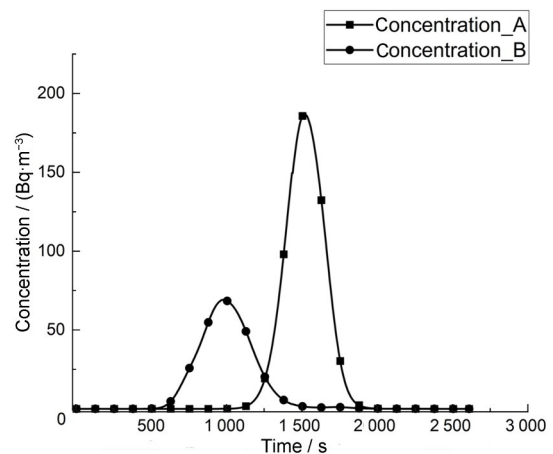


图8 区域A与区域B的核素浓度变化
Fig.8 Nuclide concentration in area A and area B

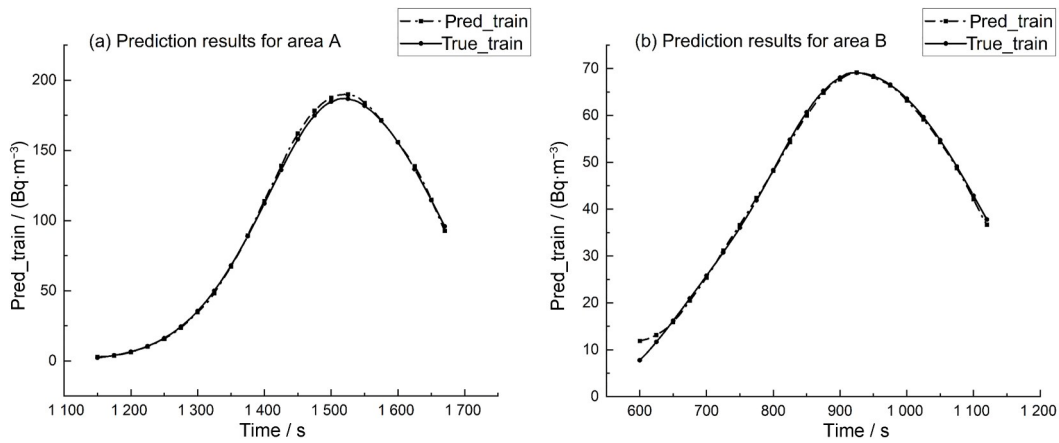


图9 区域A与区域B的核素浓度预测对比
Fig.9 Comparison of prediction results in area A and area B

区域A和区域B的测试集预测结果比较如图10所示，具体数值如表4所示。可以看出，本研究

提出的网络模型在放射性核素浓度预测的准确性方面取得了较好的效果。

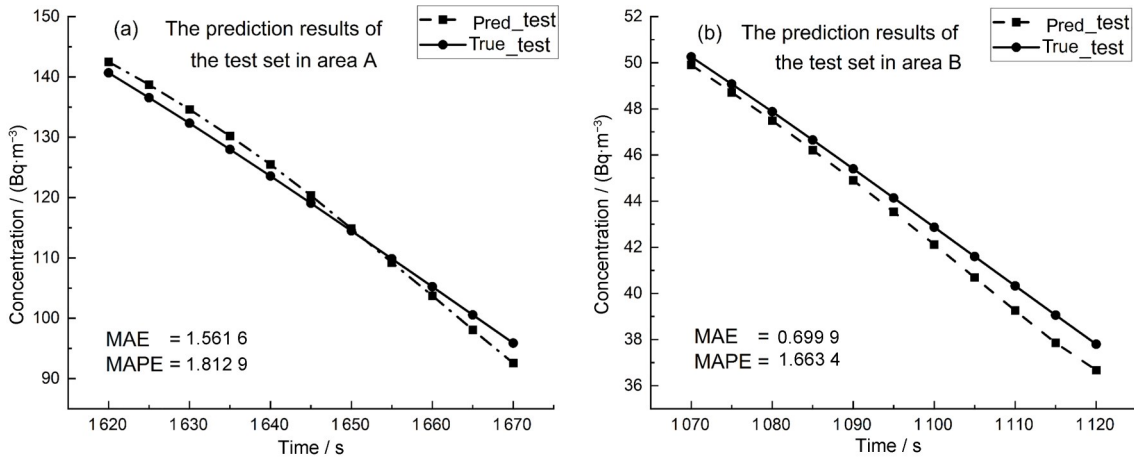


图10 区域A与区域B的测试集核素浓度预测对比
Fig.10 Comparison of test set prediction results in area A and area B

表4 区域A和区域B测试集预测结果和真值的具体值
Table 4 Specific values of test set prediction results and true values in area A and area B

区域A Area A				区域B Area B			
时间 / s	预测值 / (Bq·m ⁻³)	CFD模拟值 / (Bq·m ⁻³)	相对误差 / %	时间 / s	预测值 / (Bq·m ⁻³)	CFD模拟值 / (Bq·m ⁻³)	相对误差 / %
Time	Prediction	CFD simulation	Relative error	Time	Prediction	CFD simulation	Relative error
1 620	142.495	140.667	1.30	380	49.901 9	50.252 4	0.70
1 625	138.726	136.552	1.59	385	48.715	49.076 1	0.74
1 630	134.597	132.323	1.72	390	47.487 3	47.875 6	0.81
1 635	130.188	127.99	1.72	395	46.211 5	46.648 9	0.94
1 640	125.486	123.565	1.55	400	44.899 5	45.401 2	1.11
1 645	120.343	119.061	1.08	405	43.535 3	44.139 5	1.37
1 650	114.843	114.492	0.31	410	42.123 8	42.870 4	1.74
1 655	109.237	109.875	0.58	415	40.691 3	41.598 7	2.18
1 660	103.74	105.223	1.41	420	39.255 2	40.327 2	2.66
1 665	98.089	100.557	2.45	425	37.858 8	39.060 2	3.08
1 670	92.5631	95.8882	3.47	430	36.672 5	37.801 1	2.99

图 11 展示了损失函数与 LSTM 网络分别针对 A 和 B 区域训练时的迭代周期之间的关系。在 Epoch=150 个迭代周期内(实际运行时间约为

20 s), 损失函数 MAPE 可以收敛到 5% 以下, 这表明本文所提出的网络模型易于收敛。

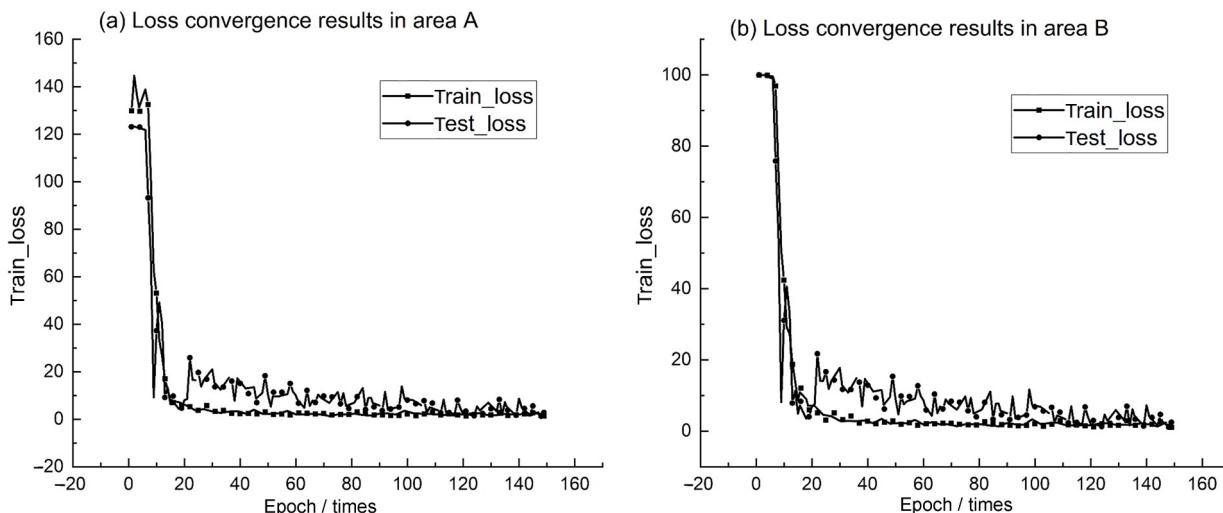


图 11 区域 A 与区域 B 的网络收敛结果对比
Fig.11 Comparison of loss convergence results in area A and area B

3 结论

本文将 CFD 模拟的 Pu-239 浓度分布作为预测实验的初始数据。通过一系列数据处理方法, 将其输入 LSTM 网络进行训练和预测, 并通过预测值与 CFD 模拟值的对比验证了该方法的可行性。本工作提出的基于 LSTM 的放射性核素预测方法, 可以在源项信息不完整时, 结合实时气象信息与事故情景下垫面信息, 快速预测未来放射性核素浓度的变化。

未来的工作将分为两个方向, 分别是更新数据集和网络模型。在数据集方面, 将考虑扩展数据特征以应用于更复杂的场景; 在网络模型方面, 探索一些新提出的网络模型, 如 transformer 和图神经网络, 在放射性核素浓度预测问题上的可行性。

致谢 衷心感谢中国科学院合肥物质科学研究院核能安全技术研究所公共技术中心为本文工作提供的专业技术支持。

作者贡献声明 阮灵盼论文初稿撰写, 论文审阅与修订, 实验; 陈春花研究内容总体设计; 陈黎伟 CFD 模拟仿真; 阮方实际调查研究; 李夏娟研究项目管理; 汪建业研究方法指导。

参考文献

- 1 Scarlett H. Nuclear weapon accident response overview [R]. United States: Los Alamos Nation Laboray, 2020. DOI: 10.2172/1638614.
- 2 Niezing J. Broken arrows and bent spears: towards a social theory of nuclear weapon accidents[J]. Bulletin of Peace Proposals, 1980, **11**(1): 71-78. DOI: 10.1177/096701068001100107.
- 3 Wang W, Bai C, Huo Y, *et al.* Research of American nuclear weapon accident and response procedures[J]. International Core Journal of Engineering, 2022, **8**(1): 648-655. DOI: 10.6919/ICJE.202201_8(1).0091.
- 4 Mian Z, Ramana M V, Rajaraman R. Plutonium dispersal and health hazards from nuclear weapon accidents[J]. Current Science, 2001, **80**(10): 1275-1284.
- 5 古晓娜, 王仲文, 刘占旗, 等. 钚作业人群流行病学研究进展[J]. 辐射防护, 2021, **41**(4): 289-294. GU Xiaona, WANG Zhongwen, LIU Zhanqi, *et al.* Research progress of epidemiology on plutonium workers [J]. Radiation Protection, 2021, **41**(4): 289-294.
- 6 Kreisheimer M, Koshurnikova N A, Nekolla E, *et al.* Lung cancer mortality among male nuclear workers of the Mayak facilities in the former Soviet Union[J]. Radiation Research, 2000, **154**(1): 3-11. DOI: 10.1667/0033-7587(2000)154[0003:LCMAMN]2.0.CO;2.

- 7 Leelőssy Á, Lagzi I, Kovács A, *et al.* A review of numerical models to predict the atmospheric dispersion of radionuclides[J]. *Journal of Environmental Radioactivity*, 2018, **182**: 20-33. DOI: 10.1016/j.jenvrad.2017.11.009.
- 8 Leelőssy Á, Molnár F, Izsák F, *et al.* Dispersion modeling of air pollutants in the atmosphere: a review[J]. *Central European Journal of Geosciences*, 2014, **6**(3): 257-278. DOI: 10.2478/s13533-012-0188-6.
- 9 Jeong H, Park M, Jeong H, *et al.* Terrain and building effects on the transport of radioactive material at a nuclear site[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2014, **68**: 157-162. DOI: 10.1016/j.anucene.2014.01.004.
- 10 Leelőssy Á, Mészáros R, Kovács A, *et al.* Numerical simulations of atmospheric dispersion of iodine-131 by different models[J]. *PLoS One*, 2017, **12**(2): e0172312. DOI: 10.1371/journal.pone.0172312.
- 11 Vach M, Duong V M. Numerical modeling of flow fields and dispersion of passive pollutants in the vicinity of the temelin nuclear power plant[J]. *Environmental Modeling & Assessment*, 2011, **16**(2): 135-143. DOI: 10.1007/s10666-010-9239-x.
- 12 Vervecken L, Camps J, Meyers J. Dynamic dose assessment by Large Eddy Simulation of the near-range atmospheric dispersion[J]. *Journal of Radiological Protection*, 2015, **35**(1): 165-178. DOI: 10.1088/0952-4746/35/1/165.
- 13 Ferziger J H, Perić M, Street R L. Computational methods for fluid dynamics[M]. 3rd ed. New York: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2002. DOI: 10.1007/978-3-642-56026-2.
- 14 Mazzoldi A, Hill T, Colls J J. CFD and Gaussian atmospheric dispersion models: a comparison for leak from carbon dioxide transportation and storage facilities [J]. *Atmospheric Environment*, 2008, **42**(34): 8046-8054. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2008.06.038.
- 15 Fabritius B, Tabor G. Improving the quality of finite volume meshes through genetic optimisation[J]. *Engineering with Computers*, 2016, **32**(3): 425-440. DOI: 10.1007/s00366-015-0423-0.
- 16 Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory [J]. *Neural Computation*, 1997, **9**(8): 1735-1780. DOI: 10.1162/neco.1997.9.8.1735.
- 17 Zhao J C, Deng F, Cai Y Y, *et al.* Long short-term memory - Fully connected (LSTM-FC) neural network for PM_{2.5} concentration prediction[J]. *Chemosphere*, 2019, **220**: 486-492. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2018.12.128.
- 18 Yang G F, Yuan E B, Wu W J. Predicting the long-term CO₂ concentration in classrooms based on the BO-EMD-LSTM model[J]. *Building and Environment*, 2022, **224**: 109568. DOI: 10.1016/j.buildenv.2022.109568.
- 19 Lyu P Y, Chen N, Mao S J, *et al.* LSTM based encoder-decoder for short-term predictions of gas concentration using multi-sensor fusion[J]. *Process Safety and Environmental Protection*, 2020, **137**: 93-105. DOI: 10.1016/j.psep.2020.02.021.
- 20 陈黎伟, 陶龙龙, 周百昌, 等. 乏燃料公路运输事故条件下放射性核素弥散模型研究[J]. *核科学与工程*, 2020, **40**(2): 233-243. DOI: 10.3969/j.issn.0258-0918.2020.02.009.
- CHEN Liwei, TAO Longlong, ZHOU Baichang, *et al.* Radionuclide dispersion model for accident condition of spent fuel highway transport[J]. *Nuclear Science and Engineering*, 2020, **40**(2): 233-243. DOI: 10.3969/j.issn.0258-0918.2020.02.009.
- 21 Guo D Q, Wang J K, Ge D C, *et al.* Oceanic radionuclide dispersion method investigation for nonfixed source from marine reactor accident[J]. *Science and Technology of Nuclear Installations*, 2022, **2022**: 2822857. DOI: 10.1155/2022/2822857.
- 22 Hermans M, Schrauwen B. Training and analyzing deep recurrent neural networks[C]. *Proceedings of the 26th International Conference on Neural Information Processing Systems - Volume 1*. New York: ACM, 2013: 190-198. DOI: 10.5555/2999611.2999633.
- 23 Pascanu R, Gulcehre C, Cho K, *et al.* How to construct deep recurrent neural networks[EB/OL]. (2014-04-24) [2023-01-17]. <https://arxiv.org/abs/1312.6026>.
- 24 Graves A, Mohamed A R, Hinton G. Speech recognition with deep recurrent neural networks[C]. *2013 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing*. Vancouver BC, Canada: IEEE, 2013: 6645-6649. DOI: 10.1109/ICASSP.2013.6638947.
- 25 Steele C M, Wald T L, Chanin D I. Plutonium explosive dispersal modeling using the MACCS₂ computer code [R]. United States: Los Alamos Nation Lab, 1998. DOI: 10.2172/677008.
- 26 Stephens D R. Source terms for plutonium aerosolization from nuclear weapon accidents[R]. United States: Lawrence Livermore National Laborator, 1995. DOI: 10.2172/109677.

- 27 唐秀欢, 杨宁, 包利红, 等. 核武器运输炸药爆炸事故气溶胶扩散数值模拟[J]. 安全与环境学报, 2014, **14**(1): 142-148. DOI: 10.13637/j.issn.1009-6094.2014.01.034.
TANG Xiuhuan, YANG Ning, BAO Lihong, *et al.* Numerical simulation of aerosol dispersion with the explosive's detonation in the process of nuclear weapon transportation[J]. Journal of Safety and Environment, 2014, **14**(1): 142-148. DOI: 10.13637/j.issn.1009-6094.2014.01.034.
- 28 Ghasemian M, Amini S, Princevac M. The influence of roadside solid and vegetation barriers on near-road air quality[J]. Atmospheric Environment, 2017, **170**: 108-117. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2017.09.028.
- 29 谢朝阳, 罗景润. 炸药爆炸条件下钚气溶胶扩散研究综述[J]. 安全与环境工程, 2007, **14**(1): 122-126. DOI: 10.3969/j.issn.1671-1556.2007.01.033.
XIE Chaoyang, LUO Jingrun. The review of plutonium aerosol dispersal by explosive detonation[J]. Safety and Environmental Engineering, 2007, **14**(1): 122-126. DOI: 10.3969/j.issn.1671-1556.2007.01.033.
- 30 刘文杰, 马庆鹏, 田立智, 等. 炸药化学爆炸环境中模拟钚气溶胶源项实验研究[J]. 兵工学报, 2016, **37**(3): 447-454. DOI: 10.3969/j.issn.1000-1093.2016.03.009.
LIU Wenjie, MA Qingpeng, TIAN Lizhi, *et al.* Experimental simulation of aerosol source term of surrogate plutonium produced by high-explosive detonation[J]. Acta Armamentarii, 2016, **37**(3): 447-454. DOI: 10.3969/j.issn.1000-1093.2016.03.009.
- 31 Kingma D P, Ba J. Adam: a method for stochastic optimization[EB/OL]. (2017-01-30)[2023-01-17]. <https://arxiv.org/abs/1412.6980>.
- 32 Ruder S. An overview of gradient descent optimization algorithms[EB/OL]. (2017-06-15) [2023-01-17]. <https://arxiv.org/abs/1609.04747>.