

ОЦЕНКА КАЧЕСТВА РЕШЕНИЙ В ЗАДАЧАХ АССИМИЛЯЦИИ НЕЙТРОННО-ФИЗИЧЕСКИХ ДАННЫХ: ОБЗОР ПОДХОДОВ И РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ИХ ПРИМЕНЕНИЮ¹

Андрианов А. А.², Андрианова О. Н.³
(Обнинский институт атомной энергетики
НИЯУ МИФИ, Обнинск)

Приводится обзор современных подходов к диагностике и оценке качества результатов ассимиляции данных в задачах моделирования нейтронно-физических процессов в объектах использования атомной энергии. Несмотря на широкое применение методов ассимиляции нейтронно-физических данных в последнее время, вопросам диагностики и оценки качества, достоверности и надежности результатов ассимиляции не уделяется должного внимания. В работе систематизированы и описаны все известные метрики и подходы к оценке качества используемых ковариационных данных, показатели информативности и подобия реакторно-физических экспериментов друг другу и в отношении целевого объекта, способы выявления противоречивых экспериментов и диагностики качества решений на основе различных статистических показателей. Обсуждаются области применения различных метрик и подходов, их преимущества и недостатки, а также авторское видение места каждого из показателей и возможная последовательность их применения при реализации процедур ассимиляции в рассматриваемой предметной области. В работе также приводятся рекомендации, направленные на то, чтобы избежать нефизических решений, минимизировать компенсаторные эффекты при корректировке модельных параметров, включая нейтронные константы и технологические параметры, обеспечить возможность вовлечь в анализ эксперименты, носящие противоречивый характер.

Ключевые слова: ассимиляция данных, машинное обучение, анализ неопределенности, нейтронно-физическое моделирование, объекты использования атомной энергии, реакторно-физические эксперименты.

¹ Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-10154.

² Андрей Алексеевич Андрианов, к.т.н., доцент (andreyandrianov@yandex.ru).

³ Ольга Николаевна Андрианова, к.т.н. (o.n.andrianova@yandex.ru).

1. Введение

Ассимиляция данных – процедура корректировки параметров расчетной модели¹ в соответствии с данными наблюдений/измерений [1]. Соответствующие процедуры, позволяющие уточнять расчетные модели и тем самым создавать предпосылки для эффективного практического использования математических методов, являются важным элементом при решении прикладных задач в разных предметных областях, где предъявляются высокие требования к качеству расчетных предсказаний. Данный класс методов активно развивается начиная с 50-х годов XX века, когда возник острый запрос со стороны прикладных наук [4, 6]. На текущий момент создана широкая палитра разнообразных подходов, которые позволяют осуществить [17–20]:

- уточнение параметров моделей на основе результатов наблюдений/измерений;
- численные прогнозы физических характеристик исследуемой системы и определение точностей их расчетного предсказания;
- определение требований к точности параметров модели, необходимых для достижения целевых точностей прогнозов физических характеристик исследуемой системы;
- уточнение условий измерений и снижение их неопределённостей;
- восполнение данных разреженных измерений;
- планирование недостающих измерений на экспериментальных установках, структурно подобных исследуемой системе.

Цель алгоритмов ассимиляции данных состоит в том, чтобы скорректировать исходные параметры модели x , приблизив их

¹ Здесь и далее под термином «модель» будем понимать также совокупность или систему моделей, в которых могут присутствовать как общие, так и различные параметры, требующие уточнения по результатам сопоставления результатов расчетов с экспериментальными данными.

к истинным значениям $\mathbf{x}_{\text{ист}}$, используя два источника информации: априорную оценку параметров $\mathbf{x}_{\text{исх}}$ и измеренные/наблюдаемые значения характеристик \mathbf{E} [16].

Методы вариационной ассимиляции данных, обсуждаемые в настоящей работе, направлены на поиск оптимально-взвешенного компромисса между исходными параметрами \mathbf{x} и результирующими характеристиками \mathbf{E} посредством минимизации целевой функции J , определяемой следующим образом [6]:

$$J(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^T \mathbf{M}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + (\mathbf{E} - \mathbf{C}(\mathbf{x}))^T (\mathbf{W}^T \mathbf{M}_E \mathbf{W})^{-1} (\mathbf{E} - \mathbf{C}(\mathbf{x})),$$

где \mathbf{x}_0 – вектор исходных значений параметров модели; \mathbf{W} – диагональная матрица весов экспериментов (в классической постановке задачи принимается равной единичной матрице); \mathbf{M}_x и \mathbf{M}_E – ковариационные матрицы модельных параметров и измерений соответственно ($M_{ii} = d_i$ (дисперсия) для $i = j$; $M_{ij} = \text{cov}(x_i, x_j)$ для $i \neq j$).

Таким образом, процедура ассимиляции данных сводится к оптимизационной задаче (предполагается, что модель корректно отражает особенности предметной области и необходимо только уточнить ее параметры). Решение оптимизационной задачи – скорректированный набор исходных модельных параметров. При решении прикладных задач важными этапами являются подготовка исходных данных и оценка качества результата. Если результат ассимиляции неудовлетворительный, необходимо скорректировать постановку задачи и/или ее параметры и повторить ассимиляцию. На рис. 1 представлена общая схема процедуры ассимиляции данных.

Несмотря на тот факт, что методы ассимиляции данных достаточно активно применяются в последнее время во всем мире в различных предметных областях, в том числе при моделировании нейтронно-физических процессов в объектах использования атомной энергии (ОИАЭ) [13, 16, 19], вопросам оценки качества результатов ассимиляции экспериментальных нейтронно-физических данных должного внимания не уделяется.

В настоящей работе описаны наиболее популярные метрики и подходы к оценке качества используемых ковариационных данных, показатели информативности и подобия реакторно-физических экспериментов друг другу и в отношении целевого объекта,

способы выявления противоречивых экспериментов и диагностики качества решения, основанные на различных статистических показателях. Отмечены области применения различных метрик и подходов, их достоинства и недостатки, даны рекомендации по их применению. Настоящая работа представляет собой продолжение статьи [1], в которой обсуждается текущее состояние и перспективы развития методов ассимиляции данных в задачах моделирования нейтронно-физических процессов в ОИАЭ.



Рис. 1. Общая схема процедуры ассимиляции данных

2. Ассимиляция нейтронно-физических данных

Первоочередной категорией параметров нейтронно-физических моделей, для уточнения которых применяются процедуры ассимиляции, являются нейтронные данные: нейтронные сечения, параметры описания анизотропии рассеяния, спектр нейтронов деления и т.п. [13] Нейтронные данные оцениваются по результатам многочисленных измерений, каждое из которых характеризуется определённой погрешностью [10]. Погрешности возникают из-за наличия различных факторов: метод измерения (разрешение, фон, и пр.), способ нормировки, согласованность

различных циклов измерений, способ параметризации энергетической зависимости и т.д. (см. Приложение 1) Как следствие, приписываемая нейтронным данным погрешность такова, что неопределенность нейтронно-физических расчетов на их основе остается достаточно высокой и не удовлетворяет прикладным запросам, что, в свою очередь, актуализирует задачу по уточнению нейтронных данных в пределах их погрешностей определения по результатам реакторно-физических измерений [2].

При решении прикладных задач могут возникать ситуации, когда расхождения между расчетными и экспериментальными значениями не могут быть устранены корректировкой одних только нейтронных констант в пределах их погрешностей измерения. Возможно, в таких случаях расчетно-экспериментальные расхождения могли быть вызваны другими факторами (например неадекватностью расчётной модели, большими погрешностями технологических параметров и пр.), поэтому минимизация этих расхождений исключительно уточнением нейтронных констант может приводить к нефизичным решениям. В случаях, если надежность экспериментальных данных не вызывает сомнений, возможно выполнить калибровку расчетной модели экспериментов путем корректировки технологических параметров в пределах их погрешностей определения.

Под технологическими параметрами понимают исходные данные расчетной модели реакторно-физического эксперимента или проектируемого объекта, которыми описывают структурные элементы конструкций активной зоны, экранов, отражателей, радиационной защиты [4]. Для случая стационарных задач переноса нейтронов – это геометрические размеры, материальные составы, температуры материалов. Для задач нуклидной кинетики помимо причисленных параметров важную роль играют режимы облучения топлива (длительность облучения и выдержки, тепловая мощность и пр.). В отличие от нейтронных констант, которые являются общими входными данными для расчётных моделей различных объектов (экспериментов, проектируемых реакторных систем, систем внешнего топливного цикла), технологические параметры в общем случае будут отличаться: каждый объект будет описываться своим набором технологических парамет-

ров. В ситуациях, когда влияние неопределённостей технологических параметров на погрешности расчета нейтронно-физического функционала сравнимо по величине с влиянием неопределённостей от нейтронных констант, технологические параметры наряду с нейтронными константами могут считаться дополнительными неизвестными при ассимиляции.

Одна из главных трудностей, с которыми приходится сталкиваться при практическом применении процедуры ассимиляции нейтронно-физических данных, – проблема нехватки экспериментальных данных по измерениям нейтронно-физических характеристик на установках, структурно подобных целевым объектам (из-за высокой стоимости соответствующих реакторно-физических экспериментов) [16]. Эта проблема приводит к необходимости вовлечения в процедуру ассимиляции нейтронно-физических данных всей доступной экспериментальной информации, полученной в рамках альтернативных экспериментальных программ. В этой связи возникает задача анализа разноплановых измерений, которые зачастую могут характеризоваться большими неопределённостями и оказаться противоречивыми друг другу. Противоречивость экспериментальных данных проявляется в том, что рассмотрение таких экспериментальных данных по отдельности приводит к противоположным тенденциям в смещениях $S(x)$ и параметрах x для разных измерений [6].

Также при решении прикладных задач в условиях ограниченности экспериментальной информации могут проявляться так называемые эффекты компенсации [14, 15]. Суть этих эффектов состоит в том, что происходит «избыточная» корректировка определенных модельных параметров для компенсации влияния других параметров, которые были либо некорректно учтены, либо вообще исключены из рассмотрения при составлении расчетной модели. Исключение определенных параметров модели из списка корректируемых может происходить на этапе формулирования оптимизационной задачи из-за того, что влияние этих параметров на конкретный измеряемый реакторно-физический функционал мало по сравнению с влиянием других параметров, а другие типы измерений, чувствительные к данным параметрам, не были включены в рассмотрение. Еще одной причиной возник-

новения эффектов компенсации может явиться ситуация, в которой связи или корреляции одних параметров модели с другими либо не были учтены, либо были учтены некорректно.

Одним из примеров, демонстрирующим ситуацию, в которой возможно проявление эффектов компенсации, является эксперимент по измерению так называемых спектральных индексов (отношений скоростей реакций – свёрток нейтронного потока с соответствующими нейтронными сечениями). При анализе таких экспериментов могут проявиться эффекты компенсации (ввиду дробно-линейного характера измеряемого реакторно-физического функционала): например, при корректировке нейтронных сечений на экспериментах по измерению спектрального индекса C8/F9 сечение радиационного захвата ^{238}U может компенсировать сечение деления ^{239}Pu [15]. В общем случае при рассмотрении большого числа параметров причины возникновения эффектов компенсации являются трудно диагностируемыми. Наличие эффектов компенсации в ряде случаев можно определить на основе анализа рекомендуемых смещений в уточняемых модельных параметрах.

Выявление взаимодополняющих, информативных, и, напротив, противоречивых экспериментов, а также наличия эффектов компенсации требует проведения проверки корректности и физичности используемых исходных данных и конечных результатов корректировки модельных параметров. Для этого предложены разнообразные метрики оценки информативности и подобия реакторно-физических экспериментов друг другу и в отношении целевого объекта, а также методики выявления противоречивых экспериментов, оценки и диагностики качества решения в задачах ассимиляции экспериментальных нейтронно-физических данных.

3. Требования к исходным данным для обеспечения эффективной корректировки

Поскольку ковариационные матрицы погрешностей нейтронных констант и реакторно-физических экспериментов (обусловлены общими технологическими параметрами, см. При-

ложение 1) являются крайне важной категорией данных при решении задач ассимиляции нейтронно-физических данных, то проверка всех входных данных процедуры на согласованность и непротиворечивость является важным и ответственным этапом.

Анализ непротиворечивости нейтронных констант и экспериментальных данных основан на следующих приближениях и предположениях, невыполнение которых может приводить к рассогласованности входных данных между собой и некорректным результатам:

– Погрешности нейтронных данных распределены в соответствии с заданным многомерным (как правило, нормальным или логнормальным) распределением: принятые значения нейтронных констант являются адекватными (в пределах погрешностей) оценками математических ожиданий соответствующих величин, диагональные элементы ковариационной матрицы являются достаточно точными оценками дисперсий этих величин, а недиагональные элементы корректно описывают взаимозависимость возможных отклонений разных констант от их математических ожиданий.

– В случае, когда корректируются исключительно нейтронные константы, расчетно-экспериментальные расхождения (см. Приложение 2) анализируемого набора экспериментов должны быть обусловлены только неточностью констант и погрешностями измерений.

– Реакторно-физические эксперименты адекватно описываются разработанными для них расчетными бенчмарк-моделями: погрешность результата расчета, связанная с неточностью используемой бенчмарк-моделью, существенно меньше суммарной расчетной и экспериментальной погрешности.

– Погрешности результатов расчета, обусловленные неточным знанием условий выполнения эксперимента, и погрешности результатов измерений распределены по известным законам, полностью определяющимися расчетными значениями измерявшихся величин и их ковариационной матрицей, а также экспериментальными значениями этих величин и их ковариационной матрицей.

Отмеченные предположения накладывают определенные требования к реакторно-физическим экспериментам и матрицам погрешностей нейтронных констант и технологических параметров. К числу наиболее значимых требований следует отнести следующие группы требований. Общие требования к матрицам погрешностей [8]:

– Значения погрешностей нейтронных данных должны соответствовать их погрешностям измерений, не иметь неоправданно высоких или низких значений, резких скачков (более чем в 8 раз). Аномально высокие («в разы» превышающие 100%) и аномально низкие (нулевые значения погрешностей для небольших, но ненулевых значений параметров) значения погрешностей должны быть скорректированы или отфильтрованы [10], иначе такие погрешности невозможно интерпретировать в качестве характеристик многомерных распределений (нормального или логнормального)¹.

– Ковариационные матрицы погрешностей по определению должны быть симметричны, значения коэффициентов корреляции должны лежать в пределах от -1 до $+1$, а на диагонали – строго равны единице.

– Ковариационные матрицы погрешностей должны быть положительно (полуположительно) определены (данное требование может не выполняться, когда при записи ковариационных матриц происходит округление значений ковариаций либо вследствие возникновения ошибок при их определении).

Требования к реакторно-физическим экспериментам:

¹ Например, для групповых нейтронных констант существует ряд маркеров, выявляющих нефизичность оценок их погрешностей. Нереалистичные (заниженные) значения погрешностей нейтронных констант, которые не соответствуют возможностям измерительной техники: для сечений нейтронных реакций – погрешность полного сечения $< 1\%$, упругого рассеяния $< 2\%$, захвата $< 2\%$, неупругого рассеяния $< 3\%$, деления $< 0,7\%$, $\nu < 0,7\%$, реакция $(n, 2n) < 3\%$, другие $< 3\%$. Небольшие погрешности малых значений нейтронных сечений, измерение которых с высокой точностью нереализуемо (например, нейтронное сечение < 3 мбарн, а погрешность $< 25\%$) или нулевые значения погрешностей для ненулевых значений сечений.

– Реакторно-физические эксперименты должны иметь простую геометрию и хорошо известный состав. Все неопределенности, влияющие на результат, должны быть минимизированы и оценены (например, посредством уточнения значений технологических параметров). Расчетная модель должна быть полна и адекватна условиям проведения эксперимента.

– Должна быть выполнена корректная оценка экспериментальной погрешности, а в случае серии экспериментов – определена ковариационная матрица погрешностей.

– Перед процедурой корректировки должен быть выполнен анализ экспериментов на их информативность применительно к целевой установке, а также оценены коэффициенты подобия экспериментов друг другу (эксперименты должны быть информативными, взаимодополнительными и непротиворечивыми).

– Должна быть продемонстрирована непротиворечивость набора экспериментов (как для всей совокупности экспериментов, так и для их отдельных групп): в результате корректировки должны возникать смещения в уточняемых модельных параметрах одного знака.

4. Способы диагностики и оценка качества результатов ассимиляции нейтронно-физических данных

Для обеспечения физически приемлемого и корректного уточнения параметров нейтронно-физических моделей рекомендуется оценивать разнообразные диагностические метрики как до, так и после применения формальных процедур ассимиляции данных. Оценка до корректировки помогает выявить и устранить противоречия в экспериментальных данных и сформулировать оптимизационную задачу, оценка после корректировки с опорой на ее результаты характеризует качество полученного решения. На практике соответствующие оценки проводятся неоднократно: пересматривается набор экспериментов, анализируется, как те или иные изменения в формальной постановке оптимизационной задачи влияют на уточняемые модельные параметры. В резуль-

тате реализации нескольких таких циклов получается найти сбалансированное физически корректное решение, а также сформировать понимание основных факторов, определяющих решение, и тем самым объяснить результаты/механизм корректировки.

4.1. МЕТРИКИ ИНФОРМАТИВНОСТИ И НЕПРОТИВОРЕЧИВОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Анализ всей имеющейся экспериментальной информации перед корректировкой необходим как для отбора информативных, так и выявления взаимодополняющих и противоречивых реакторно-физических экспериментов. Ниже указаны основные рекомендуемые метрики, которые можно использовать для этих целей [15].

Для формирования набора информативных экспериментов вычисляют коэффициенты корреляции между каждым экспериментом и целевой системой и между различными экспериментами. Коэффициент корреляции между двумя системами i и j может быть вычислен по формуле [6]

$$\rho_{ij} = \frac{(\mathbf{S}_i^T \mathbf{M}_x \mathbf{S}_j)}{[(\mathbf{S}_i^T \mathbf{M}_x \mathbf{S}_i)(\mathbf{S}_j^T \mathbf{M}_x \mathbf{S}_j)]^{1/2}},$$

где \mathbf{M}_x – ковариационная матрица общих параметров расчетных моделей, \mathbf{S} – коэффициенты чувствительности к этим параметрам реакторных функционалов. С математической точки зрения этот коэффициент представляет собой корреляцию Пирсона (значение изменяется в пределах от -1 до 1). Таким образом в качестве количественной характеристики меры подобия измеряемых и предсказываемых величин выбрана безразмерная величина, определяемая сверткой коэффициентов чувствительностей измеряемых и предсказываемых характеристик к общим для обеих систем параметрам (эксперимент i и j или эксперимент и целевая система) с ковариационной матрицей этих параметров.

Коэффициент корреляции между экспериментом и целевой системой иногда также называют коэффициентом информативности, или подобия, эксперимента целевой системе: чем выше его значение и ближе к 1 , тем большей информативностью/подобием

обладает рассмотренный эксперимент в отношении целевой системы. На практике рекомендуется исключать из рассмотрения эксперименты с коэффициентом подобия к целевой системе ниже 0,3.

Анализируя значения коэффициентов корреляции между экспериментами и целевой системой можно выявить комплементарные (или взаимодополняющие) эксперименты. Если коэффициент корреляции между экспериментами много меньше единицы, но при этом коэффициенты подобия обоих экспериментов высоки (более 0,3), существует сильная взаимодополняемость этих экспериментов с точки зрения их вклада в уточнение модельных параметров целевой системы. В этом случае оба эксперимента полезны для корректировки и должны быть использованы при реализации процедур ассимиляции данных.

Для выявления противоречивости в экспериментальных данных рассматривают различные статистические показатели χ^2 . Второе слагаемое оптимизируемой целевой функции J представляет собой квадратичную форму и имеет распределение χ^2 с n степенями свободы, которое при достаточно больших значениях n будет стремиться к нормальному распределению с параметрами $N(n, \sqrt{2n})$ (см. Приложение 2):

$$\chi^2 = (\mathbf{E} - \mathbf{C}(\mathbf{x}))^T (\mathbf{W}^T \mathbf{M}_{EC} \mathbf{W})^{-1} (\mathbf{E} - \mathbf{C}(\mathbf{x})),$$

где $\mathbf{M}_{EC} = \mathbf{M}_E + \mathbf{M}_C$ – сумма ковариационных матриц, обусловленных погрешностью измерений и расчета рассматриваемого реакторного функционала.

Данное наблюдение используют для предварительной оценки согласованности экспериментальных данных. С помощью χ^2 -тестов можно определить качество соответствия между наблюдаемыми \mathbf{E} и определяемыми с помощью расчетной модели результатами $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ (см. Приложение 2).

Поскольку при реализации методов ассимиляции данных допускается, что расчетно-экспериментальные расхождения могут выходить за пределы экспериментальной погрешности, но при этом эти расхождения лежат в пределах погрешности расчетов, обусловленной неопределённостью параметров модели, то рассмотренные ниже показатели помогают выявить такие эксперименты, для которых нарушается это условие.

Для выявления несогласованности в расчетных и экспериментальных данных определяют «индивидуальное» значение χ каждого эксперимента, измеряемое в сигмах:

$$\chi_{ind,i} = \frac{(E_i - C_i)}{\sqrt{\mathbf{S}_i^T \mathbf{M}_x \mathbf{S}_i + \mathbf{M}_{EC}}}$$

Это значение соответствует отношению расчетно-экспериментального отклонения к неопределенности, обусловленной погрешностью измерений, точностью выполнения расчетов и неопределенностью всех параметров модели.

Показатель $\chi_{diag,i}$ также выявляет несоответствие в ковариационных и экспериментальных данных (если $\chi_{diag,i} \gg 1$) и представляет собой значение отношения расчетно-экспериментального отклонения к диагональным значениям полной ковариационной матрицы, измеряемое в сигмах:

$$\chi_{diag,i} = \frac{|E_i - C_i|}{\sqrt{(\mathbf{S}^T \mathbf{M}_x \mathbf{S} + \mathbf{M}_{EC})_{ii}^{-1}}}$$

где под $\sqrt{(\mathbf{S}^T \mathbf{M}_x \mathbf{S} + \mathbf{M}_{EC})_{ii}^{-1}}$ понимается квадратный корень из диагонального элемента ii обратной матрицы $\mathbf{S}^T \mathbf{M}_x \mathbf{S} + \mathbf{M}_{EC}$.

Если индивидуальное или диагональное значения χ существенно превышают единицу, то это может указывать на наличие несоответствия между расчетно-экспериментальным расхождением и ковариационными матрицами $\mathbf{S}^T \mathbf{M}_x \mathbf{S}$, \mathbf{M}_E и \mathbf{M}_C . Другими словами, в этом случае расчетно-экспериментальное расхождение не может быть обусловлено только неопределенностью в параметрах модели и погрешностью экспериментов, а значит эксперименты, для которых эти показатели имеют большие значения, должны быть пересмотрены/переоценены.

Также может быть рассмотрен вклад каждого эксперимента в минимизируемый функционал J :

$$\chi_{con,i} = \frac{(\mathbf{E} - \mathbf{C})^T (\mathbf{S}^T \mathbf{M}_x \mathbf{S} + \mathbf{M}_{EC})_{ii}^{-1} (E_i - C_i)}{n}$$

Если соответствующий вклад конкретного эксперимента в функционал J меньше 0, то этот эксперимент крайне важен для

процедуры ассимиляции данных, поскольку его включение позволит значительно снизить расчетно-экспериментальные расходы.

Следующий показатель – так называемый фактор Ишикавы – позволяет выявить эксперименты, рассмотрение которых не приводит к корректировке параметров модели:

$$IS_i = \frac{\mathbf{S}_i^T \mathbf{M}_x \mathbf{S}_i}{\mathbf{M}_{ECi}}$$

В случае, когда фактор Ишикавы принимает очень маленькие значения $IS_i \ll 1$, это означает, что в процессе ассимиляции данных откорректированные параметры и их погрешности останутся неизменными ($\mathbf{x}' \approx \mathbf{x}$ и $\mathbf{S}_i^T \mathbf{M}_x' \mathbf{S}_i \approx \mathbf{S}_i^T \mathbf{M}_x \mathbf{S}_i$). Такая ситуация может возникать, если эксперимент имеет очень плохую точность измерений, в этом случае стоит пересмотреть оценку погрешности измерений. В случае, когда фактор Ишикавы $IS_i \gg 1$, апостериорная погрешность расчета станет равной погрешности измерений ($\mathbf{S}_i^T \mathbf{M}_x' \mathbf{S}_i \approx \mathbf{M}_{ECi}$), а значит, такой эксперимент крайне важен для процедуры ассимиляции данных. Если фактор Ишикавы $IS_i \approx 1$, это означает, что апостериорная погрешность расчета снизится примерно вдвое ($\mathbf{S}_i^T \mathbf{M}_x' \mathbf{S}_i \approx \mathbf{S}_i^T \mathbf{M}_x \mathbf{S}_i / 2$).

4.2. МЕТРИКИ ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА РЕШЕНИЙ

После получения формального решения оптимизационной задачи рекомендуется проанализировать результаты на предмет корректности решения. Решение считается неприемлемым, если:

- полученное смещение значения корректируемого параметра превышает априорную погрешность определения этого параметра;
- значения откорректированных параметров перестают иметь физический смысл (отрицательные, слишком большие или слишком маленькие значения);
- наблюдаются аномально большие изменения в параметрах, имеющих небольшую чувствительность к рассмотренным расчетным функционалам;
- смещения в параметрах значительные, но при этом изменение апостериорной погрешности невелики.

Если после корректировки минимизируемый функционал J снизился незначительно по сравнению с начальным значением, вычисленным для неоткорректированных параметров, следует вернуться к этапу анализа показателей χ^2 и выполнить корректировку с уменьшением веса тех экспериментов, которые эти показатели выявили как малоинформативные. Другими словами, вычисление показателей χ^2 позволяет приоритизировать набор экспериментов и выявить те эксперименты, включение которых в процедуру ассимиляции данных заведомо может приводить к некорректным смещениям в модельных параметрах.

Для отслеживания улучшений результатов корректировки вследствие исключения или введения матрицы весов для малоинформативных и/или противоречивых экспериментальных данных используют так называемый показатель Кука, определяемый следующей формулой [14]:

$$D_i = (\mathbf{x}'_i - \mathbf{x}')^T \mathbf{M}'_x{}^{-1} (\mathbf{x}'_i - \mathbf{x}'),$$

где \mathbf{x}' – набор откорректированных параметров на всей рассмотренной совокупности экспериментальных данных; \mathbf{x}'_i – набор откорректированных параметров, полученных при условии, что эксперимент i был исключен из процедуры корректировки или его вес был изменен; \mathbf{M}'_x – апостериорная ковариационная матрица параметров \mathbf{x} .

Небольшое значение показателя Кука (D_i) свидетельствует о незначительном влиянии эксперимента i на результат корректировки. Большое значение D_i говорит о высокой информативности рассматриваемого эксперимента. Таким образом, коэффициент Кука устанавливает взаимосвязь между весом эксперимента и смещением в параметрах модели и является альтернативным способом проверки согласованности и корректности всей совокупности данных, необходимых для проведения процедуры уточнения модельных параметров.

4.3. ПОКАЗАТЕЛИ, ВЫЯВЛЯЮЩИЕ ЭФФЕКТЫ КОМПЕНСАЦИИ

Для выявления возможных эффектов компенсации предложены три метрики [15].

1. *Мобильность* параметра i при корректировке определяется соотношением:

$$mob_i = \text{sgn}(\mathbf{M}_{x,i} \mathbf{I}) \sqrt{|\mathbf{M}_{x,i} \mathbf{I}|},$$

где \mathbf{I} – единичный вектор, $\mathbf{M}_{x,i}$ – ковариационная матрица характеристики x в отношении параметра i , $\text{sgn}(x) = x/|x|$. Данная метрика показывает потенциально возможную величину смещения корректируемого параметра с учетом его корреляций с другими параметрами. В случае, когда ковариационная матрица имеет диагональный вид \mathbf{M}_x (т.е. все недиагональные элементы матрицы – ковариации – равны нулю), mob_i представляет собой стандартное отклонение параметра x_i . Смещение параметра x_i в процессе корректировки не должно превышать mob_i . Если смещение параметра значительно выше этого показателя, то это может свидетельствовать о наличии эффектов компенсации.

2. *Показатель силы корректировки* для эксперимента i и рассматриваемого типа j параметров (например, один тип нейтронных реакций) определяется как

$$\mathbf{F}_{i,j} = \|(\Delta x/x)_{i,j}\| / \|\mathbf{I}\| \cos(\theta),$$

$$(\Delta x/x)_{i,j} = \mathbf{M}_{\sigma,j} \mathbf{S}_{i,j} (\mathbf{S}^T \mathbf{M}_x \mathbf{S} + \mathbf{M}_{EC})_{i,j}^{-1} (1 - C_i/E_i),$$

$$\cos(\theta) = (\Delta x/x)_{i,j} \cdot \mathbf{I} / \|(\Delta x/x)\| \cdot \|\mathbf{I}\|.$$

Здесь $\|\cdot\|$ – евклидова норма матрицы; $(\Delta x/x)_{i,j}$ представляет собой вектор относительных смещений набора параметров \mathbf{x} при корректировке, в результате которой только один тип j параметров скорректирован с использованием только одного реакторно-физического измерения. Для нейтронных реакций показатель силы корректировки представляет собой среднее значение изменения сечения взаимодействия нейтронов с ядрами вещества по всем энергетическим группам. Используя этот показатель, можно проранжировать эксперименты по степени влияния на результаты корректировки конкретного типа параметров и определить эксперимент, который оказывает наибольшее влияние на соответствующий параметр. Тем самым в случае обнаружения сильных смещений параметров этот показатель позволяет определить

причину этих смещений – выявить эксперименты, включение которых в процедуру ассимиляции данных приводит к эффектам компенсации.

3. *Потенциал корректировки* рассчитывается по формуле, аналогичной формуле расчета показателя силы корректировки, путем замены C_i/E_i на $\langle C_{ni} \rangle / \langle E_{ni} \rangle$, где под $\langle \rangle$ понимают усреднение по серии аналогичных измерений n_i .

Данный показатель позволяет выявить наличие эффектов компенсации. Если более двух экспериментов имеют большие значения потенциала корректировки, но при этом они имеют противоположные значения показателя силы корректировки, то это может свидетельствовать о том, что рассмотренный параметр не будет корректироваться, однако при этом другие параметры будут корректироваться сильно (иметь большие смещения). Причина может заключаться в том, что коэффициенты чувствительности к рассмотренному параметру для этих двух экспериментов имеют противоположный знак. В этом случае набор реакторно-физических экспериментов, использованных для корректировки, следует пересмотреть: добавить независимые измерения или изменить веса экспериментов.

4.4. СПОСОБЫ НИВЕЛИРОВАНИЯ ЭФФЕКТОВ КОМПЕНСАЦИИ

Можно выделить следующие основные причины, приводящие к эффектам компенсации при корректировке исходных параметров нейтронно-физических моделей с использованием процедур ассимиляции нейтронно-физических данных:

- исключение из рассмотрения важных параметров, влияющих на результат расчетного моделирования реакторно-физических экспериментов;
- рассмотрение ограниченного (небольшого) числа экспериментов с типовыми измерениями, выполненных на одной экспериментальной установке и/или с использованием одной экспериментальной методики (результаты измерений сильно коррелируют между собой);

– некорректное установление функциональных связей между уточняемыми параметрами и рассматриваемыми измерениями (отсутствие учета важных корреляций и/или неправильное определение сильных корреляций).

Минимизировать вероятность возникновения эффектов компенсации можно следующими способами:

- расширение числа уточняемых параметров модели;
- вовлечение в процедуру корректировки большего числа разноплановых, взаимодополняющих экспериментов, различных типов измерений, экспериментов, выполненных на различных установках и/или независимыми группами экспериментаторов;
- пересмотр оценок ковариационных матриц параметров и экспериментов: выявление и устранение некорректностей в функциональных связях между уточняемыми модельными параметрами и экспериментальными данными.

5. *Ассимиляция нейтронно-физических данных с учетом требований к качеству уточняемых параметров*

Несмотря на многообразие существующих апробированных и хорошо себя зарекомендовавших реализаций процедуры ассимиляции нейтронно-физических данных, сохраняется потребность в их дальнейшем развитии и совершенствовании [11]. Описанные выше приемы оценки качества решения в задачах по уточнению исходных модельных параметров применимы ко всем из них и могут быть использованы как на предварительном этапе при формулировании соответствующей задачи на поиск экстремума целевой функции, так и на этапе постобработки результатов корректировки.

Вместе с тем реализуются попытки развития таких методов ассимиляции нейтронно-физических данных, в которые были бы изначально встроены механизмы учета требований к качеству корректируемых данных, что позволяло бы минимизировать усилия эксперта при формулировании соответствующей оптимизационной задачи. Основная цель таких усилий состоит в том,

чтобы справиться прежде всего с наиболее опасными при решении практических задач ситуациями, в которых в выборках присутствует даже небольшое число резко выделяющихся наблюдений (выбросов). Наличие таких выбросов способно сильно повлиять на результат корректировки, например, применение классического подхода к ассимиляции данных на основе метода максимального правдоподобия приводит к тому, что значения уточненных исходных данных могут перестать нести в себе какой-либо смысл. Для исключения влияния таких выбросов предлагаются различные выбросоустойчивые (робастные) методы ассимиляции, позволяющие либо снизить влияние «плохих» наблюдений, либо полностью их исключить. Эти методы делают возможным отличить объективно «плохие» или «противоречивые» наблюдения от тех наблюдений, в которых содержится значимая и не дублируемая в других наблюдениях информация.

Учет дополнительных требований к качеству результатов ассимиляции нейтронно-физических данных может быть выполнен посредством перехода к решению задачи на поиск условного минимума как в рамках детерминистического, так и стохастического подходов. Характерная особенность детерминистических методов – необходимость расчета коэффициентов чувствительности, что позволяет свести задачу по ассимиляции нейтронно-физических данных к задаче квадратичного программирования. Вводя дополнительный набор ограничений, отражающий требования к корректируемому данным, осуществляется переход к задаче на условный минимум [9].

Стохастические методы не требуют расчета коэффициентов чувствительности, но сопряжены с многовариантными расчетами [12, 17, 20]. В рамках стохастического подхода веса, используемые для определения параметров апостериорного распределения, могут быть определены на основе комбинации метода BFMC (Backward-Forward Monte-Carlo) с методом формирования выборки с отклонением [20]. Такая комбинация представляется эффективным вариантом для решения задач ассимиляции нейтронно-физических данных, где имеется значительная неопределенность входных данных и присутствуют выбросы в результатах отдельных наблюдений.

Еще одной возможной модификацией процедуры ассимиляции нейтронно-физических данных является формулировка этой задачи как задачи многоцелевой оптимизации. В этом случае вместо объединения нескольких составляющих обобщенного χ^2 в один показатель их можно рассматривать независимо. Таким образом, возникает задача многоцелевой оптимизации, где каждую составляющую обобщенного χ^2 требуется минимизировать. Поскольку решение многоцелевой задачи оптимизации подразумевает поиск недоминируемых или Парето-эффективных решений (под которыми понимают такие допустимые решения, для которых не существует никакого другого допустимого решения, имеющего по всем критериям одновременно не худшие оценки и хотя бы по одному критерию – строго лучшие), то в результате применения соответствующих вычислительных алгоритмов можно получить целый спектр решений, каждое из которых будет обладать определенными преимуществами над другими.

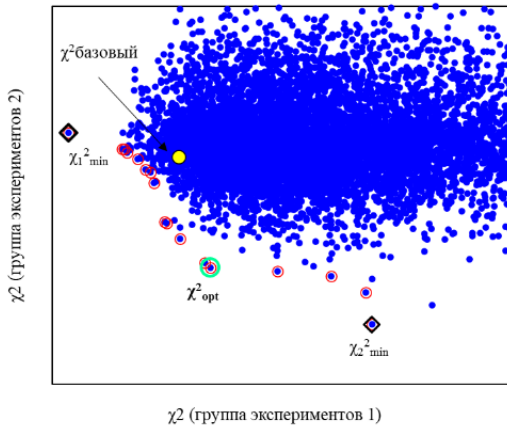


Рис. 2. Иллюстрация множества недоминируемых решений в пространстве двух критериев применительно к задачам ассимиляции нейтронно-физических данных¹

¹ Иллюстрация рассогласованности измерений изотопного состава и масс элементов в облучательных экспериментах [3]: уменьшение χ^2 одного типа измерений по определению массовых долей топливных изотопов $^{234-238}_{92}\text{U}$, $^{238-242}_{94}\text{Pu}$

Выбор наиболее приемлемого решения из набора недоминируемых может быть выполнен экспертным образом или с применением тех или иных формальных методов поддержки принятия решений в условиях многокритериальной оценки. Например, множество недоминируемых решений в пространстве двух критериев, каждый из которых необходимо минимизировать, будет представлять собой юго-западную границу множества допустимых решений (см. рис.2).

Применение описанного подхода целесообразно в тех случаях, когда наблюдается большой разброс в диапазонах изменения отдельных составляющих обобщенного χ^2 , что приводит к тому, что классическая реализация процедуры, оперирующая обобщенным χ^2 , становится малоинформативной с прикладной точки зрения.

6. Заключение

Все исходные параметры, вовлекаемые в процедуру ассимиляции нейтронно-физических данных, включая нейтронные константы, технологические параметры, результаты реакторно-физических измерений, взаимосвязаны. Соответствующие функциональные взаимосвязи описываются априорными ковариационными матрицами, которые в значительной степени определяют результаты корректировки параметров нейтронно-физических моделей. По этой причине необходима проверка корректности и согласованности всех вовлекаемых в процедуру ассимиляции априорных ковариационных матриц.

В результате применения процедуры ассимиляции уточняются значения модельных параметров, характеризующие их погрешности снижаются, корректируются ковариационные матрицы. Установление новых взаимосвязей между параметрами в результате ассимиляции приводит к повышению точности расчетного предсказания характеристик целевых систем.

и др., приводит к увеличению χ^2 для другого типа измерений – масс топливных элементов (уран, плутоний и др.). Оптимальный вариант корректировки выбирается из вариантов, отмеченных красными окружностями на рисунке, с учетом физичности смещений в параметрах расчетной модели.

Для оценки качества решений в задачах ассимиляции экспериментальных нейтронно-физических данных предложены разнообразные диагностические метрики. Эти метрики учитывают изменения как значений параметров, так и появление новых взаимосвязей между всеми корректируемыми параметрами. На этой основе оказывается возможным выполнить проверку корректности и физичности значений уточненных модельных параметров и связанных с ними апостериорных ковариационных матриц.

Рассмотренные в настоящей работе метрики и практики диагностики и оценки качества решений используются специалистами при решении прикладных задач, тем не менее их нельзя считать исчерпывающими и достаточными. Есть все основания полагать, что со временем будут появляться дополнительные показатели и альтернативные подходы, содействующие получению надежных, качественных, физически приемлемых и обоснованных решений. Приоритетными задачами остаются: дальнейшее повышение эффективности вовлечения в анализ наличествующей экспериментальной информации (выявление информативных и комплементарных экспериментов, снижение рисков потери информативности в случае вовлечения в анализ взаимно противоречивых экспериментов), раскрытие и разъяснение механизмов корректировки, нивелирование возможных компенсаторных эффектов.

Тем не менее в условиях применения классических парадигм ассимиляции нейтронно-физических данных дальнейший рост разнообразия метрик и подходов к оценке качества решений повлечет за собой дополнительную нагрузку на выполняющих анализ специалистов. Отмеченное обстоятельство актуализирует задачу разработки альтернативных подходов к ассимиляции нейтронно-физических данных, в которые должны быть интегрированы механизмы автоматического учета набора формулируемых специалистом требований к качеству решения.

Литература

1. АНДРИАНОВ А.А., АНДРИАНОВА О.Н. *Ассимиляция данных в задачах моделирования нейтронно-физических процес-*

- сов в объектах использования атомной энергии: текущее состояние и перспективы развития // Управление большими системами: сборник трудов. – 2023. – №104. – С. 118–134. – DOI 10.25728/ubs.2023.104.5.
2. АНДРИАНОВ А.А., АНДРИАНОВА О.Н., ГОЛОВКО Ю.Е. *Методика оценки интегральных экспериментов для использования в задаче оценки точности нейтронно-физических расчетов* // Депонированная рукопись. – №68-B2021. – 2021. – 58 с.
 3. АНДРИАНОВ А.А., АНДРИАНОВА О.Н., КОРОВИН Ю.А. и др. *Программный комплекс оптимизации параметров нейтронно-физических моделей с учетом результатов интегральных экспериментов* // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2023. – №2. – С. 148–161.
 4. ВАНЬКОВ А.А., ВОРОПАЕВ А.И., ЮРОВА Л.Н. *Анализ реакторно-физического эксперимента*. – М.: Атомиздат, 1977. – 88 с.
 5. МАНТУРОВ Г.Н. *Методическое – константное и программное обеспечение нейтронно-физических расчетов быстрых реакторов и оценки погрешностей расчетных предсказаний*. – Дисс. д-ра тех. наук. – М.: НИЦ «КИ», 2017. – 202 с.
 6. УСАЧЕВ Л.Н., БОБКОВ Ю.Г. *Теория возмущений и планирование эксперимента в проблеме ядерных данных для реакторов*. – М.: Атомиздат, 1980. – 88 с.
 7. ХУДСОН Д. *Статистика для физиков*. – М.: Мир, 1970. – 295 с.
 8. *Assessment of Existing Nuclear Data Adjustment Methodologies (2011) Working Party on International Evaluation Co-Operation* // Intermediate Report of the WPEC Subgroup 33. Report/NEA/OECD. Paris, 152 pp.
 9. CACUCI D.G., BUJOR M. *Sensitivity and uncertainty analysis, data assimilation, and predictive best-estimate model calibration* // Handbook of Nuclear Engineering. Springer, Boston. – 2010. – DOI: https://doi.org/10.1007/978-0-387-98149-9_17 (дата обращения: 18.03.2023).
 10. *NEA (2010) Covariance Data in the Fast Neutron Region* // Final report of WPEC subgroup 24, NEA/NSC/WPEC/DOC(2010)427, OECD, Paris.

11. GRECHANUK P., RISING M.E., PALMER T.S. *Using machine learning methods to predict bias in nuclear criticality safety* // Journal of Computational and Theoretical Transport. – 2019. – Vol. 47. – P. 552–565.
12. HOEFER A., BUSS O. *Assessing and improving model fitness in MOCABA data assimilation* // Ann. Nucl. Energy. – 2021. – Vol. 162. – P. 10–21.
13. IVANOV E., SAINT-JEAN C., SOBES V. *Nuclear data assimilation, scientific basis and current status* // EPJ Nuclear Sci. Technol. – 2021. – DOI: <https://doi.org/10.1051/epjn/2021008> (дата обращения: 18.03.2023).
14. *NEA (2013) Methods and Issues for the Combined Use of Integral Experiments and Covariance Data* // A report by the Working Party on International Nuclear Data Evaluation Co-operation of the NEA Nuclear Science Committee, NEA/NSC/WPEC/DOC(2013)445, OECD, Paris.
15. *NEA/NSC/R (2016) 6 (2017) Methods and Approaches to Provide Feedback from Nuclear and Covariance Data Adjustment for Improvement of Nuclear Data Files* // Intermediate Report. Nuclear Science NEA/OECD. Paris. – 43 p.
16. PALMIOTTI G., SALVATORES M. *The role of experiments and of sensitivity analysis in simulation validation strategies with emphasis on reactor physics* // Ann. Nucl. Energy. – 2013. – Vol. 52. – P. 10–21.
17. DRAGT J.B. *Statistical considerations on techniques for adjustment* // RCN-122. – Reactor Centrum Nederland. – 1970. – P. 85–105.
18. ROCHMAN D., SCIOLLA C.M. *Nuclear data uncertainty propagation for a typical PWR fuel assembly with burnup* // Nuclear Engineering and Technology. – 2014. – Vol. 46, No. 3. – P. 353–362.
19. ROWLANDS J.L., MACDOUGALL L.D. *The use of integral measurements to adjust cross-sections and predicted reactor properties* // Proc. of the Int. Conf. on Fast Critical Experiments and their Analysis. – ANL-7320. – 1966.
20. SIEFMAN D., HURSIN M., ROCHMAN D. et.al. *Stochastic vs. sensitivity-based integral parameter and nuclear data adjustments* // Eur. Phys. J. Plus. – 2018. – Vol. 133, No. 12. – P. 429–438.

Приложение 1. Оценка экспериментальных и расчетных погрешностей реакторно-физических измерений

Оценка экспериментальной погрешности реакторно-физических измерений осуществляется следующим образом. Характеристики R_j , измеряемые в реакторно-физических экспериментах ($k_{эф}$, отношения сечений и т.д.), можно представить в виде функции от многих параметров: $R_j = f_j(x_i)$. Часть параметров x_i может быть измерена, например, отношения скоростей счета, период разгона реактора, масса образца и т.п. Другие параметры x_i – константы (опорные сечения взаимодействия, массы ядер и т.д.). Некоторые параметры x_i являются поправочными коэффициентами и определяются расчетным или экспериментальным путем (влияние штанг измерительных устройств, влияние степени подкритичности реактора на спектр нейтронов и т.д.). Все параметры имеют погрешности, которыми определяется погрешность измеряемых величин R_j . Условия проведения эксперимента также известны с определенной погрешностью (размеры критических сборок, концентрация ядер различных материалов). Корреляционные связи между параметрами x_i возникают по нескольким причинам. Во-первых, погрешности x_i могут быть связаны между собой (например, опорные сечения). Во-вторых, измеряемые функционалы R_j могут зависеть от общих параметров x_i . Ковариационная матрица \mathbf{M}_{E,R_j} погрешностей набора экспериментальных данных определяется следующим образом:

$$\mathbf{M}_{E,R_j} = \sum_i S_{ij}^T D_i S_{ij} + D_j^{cm}$$

где $S_{ij} = (\partial R_j / \partial x_i)$ – коэффициенты чувствительности измеряемой характеристики R_j к параметрам x_i ; D_i – ковариационная матрица погрешностей параметров x_i ; D_j^{cm} – матрица статистических погрешностей.

При оценке расчетной погрешности реакторно-физических измерений предполагается, что каждый из параметров расчетной модели (нейтронные константы и технологические параметры) можно охарактеризовать средним значением и среднеквадратичным отклонением. Расчетное значение измеряемого реакторного параметра R в общем случае можно представить функцией $f_R(x_i)$

от нейтронных констант и технологических параметров x_i . Предполагается, что функция f_R слабо меняется в области изменения ее аргументов, ограниченной среднеквадратичными отклонениями ее аргументов от их средних значений. В этом случае применимо представление f_R в виде разложения в ряд Тейлора в окрестности средних значений параметров с точностью до членов первого порядка и дисперсия σ_R параметра R может быть определена следующим образом:

$$\sigma_R = \mathbf{S}^T \mathbf{M}_x \mathbf{S},$$

где \mathbf{S} – вектор с элементами $\partial f_R / \partial x_i$, \mathbf{M}_x – ковариационная матрица погрешности констант, которая имеет следующий вид:

$$\mathbf{M}_x = \begin{pmatrix} \sigma_x^1 \sigma_x^1 & \sigma_x^1 \sigma_x^2 \rho_{12} & \dots & \sigma_x^1 \sigma_x^n \rho_{1n} \\ \sigma_x^1 \sigma_x^2 \rho_{12} & \sigma_x^2 \sigma_x^2 & \dots & \sigma_x^2 \sigma_x^n \rho_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sigma_x^1 \sigma_x^n \rho_{1n} & \sigma_x^2 \sigma_x^n \rho_{2n} & \dots & \sigma_x^n \sigma_x^n \end{pmatrix},$$

где ρ_{ij} – коэффициент корреляции между i и j параметрами расчётной модели.

Приложение 2. Классическая постановка задачи ассимиляции нейтронно-физических данных

В качестве классических методов ассимиляции данных в различных предметных областях используют широко распространённые методы оценки неизвестных параметров регрессионных моделей по выборочным данным: обобщенный метод наименьших квадратов (МНК) и метод максимального правдоподобия (ММП). Применительно к задачам ассимиляции экспериментальных нейтронно-физических данных для использования этих двух методов необходимо линеаризировать зависимость определяемого в реакторно-физическом эксперименте нейтронно-физического функционала от модельных параметров. Реакторные функционалы $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ в общем случае нелинейным образом зависят от набора параметров \mathbf{x} . Вместе с тем предполагается, что соответствующая функция слабо меняется в области изменения ее аргументов, ограниченной среднеквадратичными отклонениями ее аргументов от их средних значений. В этом случае $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ можно

разложить в ряд Тейлора для функции нескольких переменных с точностью до членов первого порядка. В матричном виде можно записать следующее соотношение:

$$C(\mathbf{x}) \approx C(\mathbf{x}_0) + \mathbf{S}^T \Delta \mathbf{x},$$

где $\Delta \mathbf{x}$ – вектор смещений параметров, а $S_{ij} = \partial C_i(x_j)/\partial x_j$ – матрица коэффициентов чувствительности результата i -го реакторно-физического эксперимента к j -му параметру.

Обобщенный МНК основан на минимизации суммы квадратов расчётно-экспериментальных расхождений [7]:

$$J_{\text{МНК}} = (\mathbf{Q} - \mathbf{S}^T \Delta \mathbf{x})^T \mathbf{M}_E^{-1} (\mathbf{Q} - \mathbf{S}^T \Delta \mathbf{x}),$$

где \mathbf{E} – результаты измерения, представляющие собой вектор из n различных величин E_1, \dots, E_n , $\mathbf{Q} = \mathbf{E} - C(\mathbf{x}_0)$ – вектор расчётно-экспериментальных смещений, \mathbf{M}_E – ковариационная матрица погрешностей экспериментов.

Если ввести предположение о том, что ошибки измерений имеют нормальное распределение, то в этом случае $J_{\text{МНК}}$ имеет распределение χ^2 с n степенями свободы. При достаточно больших значениях n плотность вероятности распределения $J_{\text{МНК}}$ будет стремиться к нормальному распределению с параметрами $N(n, \sqrt{2n})$ [7]. Данное наблюдение используют для статистической проверки гипотез и предварительной оценки согласованности экспериментальных данных.

Поскольку параметры физических моделей являются измеримыми физическими величинами и они содержат случайные ошибки этих измерений, то предполагается, что их величины имеют многомерное нормальное распределение с математическим ожиданием \mathbf{x}_0 и ковариационной матрицей погрешностей \mathbf{M}_x . Кроме того, немаловажным является требование к величинам смещений параметров $\Delta \mathbf{x}$, которые не должны превышать погрешности их определения. Эти обстоятельства учитываются в ММП и в стохастических подходах к ассимиляции данных, основанных на теореме Байеса. В обоих случаях минимизируемый функционал имеет следующий вид [6]:

$$\begin{aligned} J_{\text{ММП}} &= \Delta \mathbf{x}^T \mathbf{M}_x^{-1} \Delta \mathbf{x} + (\mathbf{Q} - \mathbf{S}^T \Delta \mathbf{x})^T \mathbf{M}_E^{-1} (\mathbf{Q} - \mathbf{S}^T \Delta \mathbf{x}) = \\ &= \Delta \mathbf{x}^T \mathbf{M}_x^{-1} \Delta \mathbf{x} + J_{\text{МНК}}. \end{aligned}$$

Задача ассимиляции данных в такой постановке сводится к безусловной минимизации функции $J_{\text{ММП}}$ от смещений

в нейтронных константах $\Delta \mathbf{x}$. Условие, состоящее в том, что уточненные значения параметров должны лежать в пределах ошибок их измерений (заданных ковариационной матрицей \mathbf{M}_x), является нежестким и записывается в минимизируемый функционал $J_{\text{ММП}}$ в виде слагаемого $\Delta \mathbf{x}^T \mathbf{M}_x^{-1} \Delta \mathbf{x}$.

При $x_j = x_{0j}$ получаем начальное значение функции J_0 для неотректированных модельных параметров:

$$J_0 = J_{\text{ММП}} = J_{\text{МНК}} = \mathbf{Q}^T \mathbf{M}_E^{-1} \mathbf{Q} = [\mathbf{E} - \mathbf{C}(\mathbf{x}_0)]^T \mathbf{M}_E^{-1} [\mathbf{E} - \mathbf{C}(\mathbf{x}_0)].$$

Соотношение для минимального значения $J_{\text{мин}}$, которое определяется путем подстановки в уравнение для функции $J_{\text{ММП}}$ выражения для смещений $\Delta \mathbf{x}_{\text{мин}}$, безусловно минимизирующих функцию $J_{\text{ММП}}$, определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{x}_{\text{мин}} &= \mathbf{M}_x \mathbf{S} (\mathbf{M}_E + \mathbf{S}^T \mathbf{M}_x \mathbf{S})^{-1} [\mathbf{E} - \mathbf{C}(\mathbf{x}_0)], \\ J_{\text{мин}} &= [\mathbf{E} - \mathbf{C}(\mathbf{x}_0)]^T (\mathbf{M}_E + \mathbf{S}^T \mathbf{M}_x \mathbf{S})^{-1} [\mathbf{E} - \mathbf{C}(\mathbf{x}_0)]. \end{aligned}$$

Фактически данное соотношение означает, что в случае когда параметры модели являются физическими величинами и известны их погрешности (заданные ковариационной матрицей \mathbf{M}_x), погрешность расчетно-экспериментального отклонения $\mathbf{E} - \mathbf{C}(\mathbf{x}_0)$ есть сумма погрешностей измерений (определяемых ковариационной матрицей \mathbf{M}_E) и расчетов (обусловленной погрешностями параметров и определяемой ковариационной матрицей $\mathbf{S}^T \mathbf{M}_x \mathbf{S}$). Соотношения для J_0 и $J_{\text{мин}}$ полезны для статистической проверки гипотез при помощи критерия согласия χ^2 о нормальности распределений ошибок экспериментов и параметров модели (нейтронных данных и/или технологических параметров) до и после выполнения процедуры ассимиляции данных.

ASSESSING THE QUALITY OF NEUTRONICS PARAMETERS ADJUSTMENT: AN OVERVIEW OF APPROACHES AND RECOMMENDATIONS FOR THEIR USE

Andrei Andrianov, Obninsk Institute for Nuclear Power Engineering
NRNU MEPhI, Obninsk, Ph.D., Associate Professor
(andreyandrianov@yandex.ru)

Olga Andrianova, Obninsk Institute for Nuclear Power Engineering
NRNU MEPhI, Obninsk, Ph.D. (o.n.andrianova@yandex.ru).

Abstract: The article presents a comprehensive review of state-of-the-art approaches to diagnosing and assessing the quality of data assimilation results in neutronics modeling problems. Despite the widespread use of data assimilation procedures worldwide to refine the parameters of neutronics models based on reactor experiment results there is a lack of attention given to the issues of diagnostics and quality assessment in this specific area. This stage is crucial in ensuring the reliability and accuracy of assimilation results. By adhering to relevant recommendations, it is possible to avoid obtaining non-physical solutions, minimize compensatory effects when adjusting initial data, and include contradictory experiments in the analysis. The article discusses the most popular metrics and approaches for assessing the quality of covariance data, as well as indicators of informativeness and similarity between reactor physics experiments and the target object. It also covers methods for identifying contradictory experiments and diagnosing the quality of the solution using various statistical indicators. The article highlights the areas of application for different metrics and approaches, as well as their advantages and disadvantages, providing recommendations for their use.

Keywords: data assimilation, machine learning, uncertainty analysis, neutronics modelling, nuclear facilities, reactor experiments.

УДК 621.039.51

ББК 31.4

DOI: 10.25728/ubs.2024.110.10

*Статья представлена к публикации
членом редакционной коллегии Н.А. Коргиным.*

Поступила в редакцию 10.01.2024.

Опубликована 31.07.2024.