MAINFORMATICS

KHU

Estimation of Xenon Oscillation with Physics-informed Neural Network

2022.10.20

발표자 : 경희대학교 임준석

저자 : 경희대학교 임준석, 허균영

00 ABOUT SPEAKER

- 이름 : 임준석
- 소속 : 경희대학교 원자력공학과 석사 2기
- 연구 분야 : PINN을 이용한 원자력발전소 이상상태 진단
- email address : 2016101043@khu.ac.kr

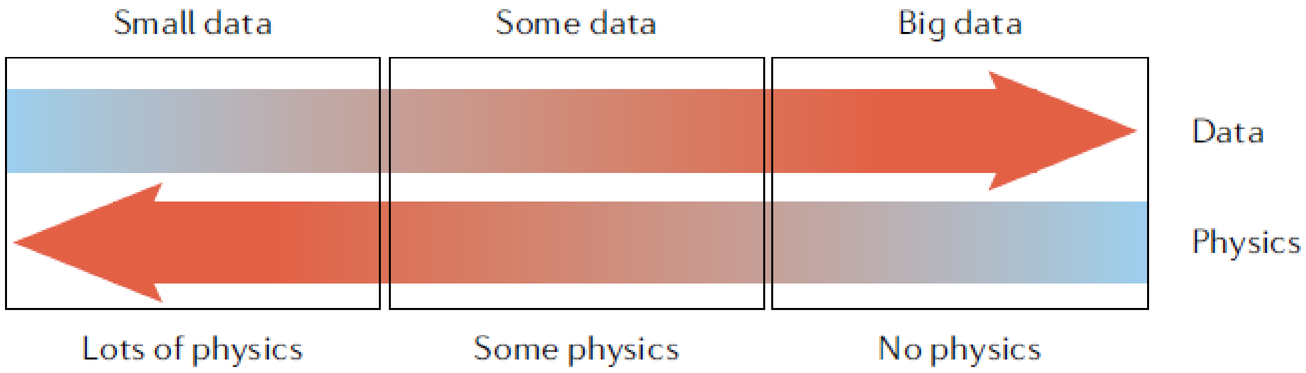
00 CONTENTS

01 PURPOSE

- 연구 목적

  - 과제명 : 원자력 비상대응 전략 시뮬레이션을 위한 행위자기반 플랫폼과 학습기반 최적화 방법 개발 연구
  - 방사능 확산 및 주민 소개에 PINN 적용을 검토 중.
  - PINN에 대한 이론 및 기술들을 획득 필요.
  - 이번 연구는 위의 목적을 달성하기 위한 예시로 수행.

- 기존의 수치적 방법(유한 차분, 유한 요소, …)
  - 현실적인 문제를 풀려고 할수록 기하급수적으로 비용이 증가.
    - ✓ mesh 개수 증가.
    - ✓ 변수 개수 증가.
- 머신러닝
  - 데이터를 기반으로 하여 비교적 낮은 비용으로 방대한 공간을 탐색 가능.
    - ✓ 여러 사진들의 패턴을 학습.
  - 하지만 잘못된 일반화, 관찰 편향 등으로 인해 물리적으로 잘못된 예측을 할 가능성 있음.



Karniadakis, G. E., Kevrekidis, I. G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., & Yang, L. (2021). Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, *3*(6), 422-440.

KHU

- PINN
  - 2017년 Raissi, M. et.al 이 개발.
  - 물리 법칙과 기존 데이터를 통합할 수 있는 신경망.
  - 물리 법칙에 위배되는 솔루션은 즉각 폐기시키므로 hidden layer 개수, node 개수가 많지 않아도 충분.

- 단점
  - Multiscale, Multiphysics 문제를 한번에 풀 수 없음.
  - 여러 항들을 갖는 손실함수는 non-convex인 경우가 많아 결론적으로 global minimum을 찾기 어려움.
  - PINN은 경험적으로 성공했지만 그것의 능력과 한계가 이론적으로 엄밀히 증명되지 않았음.

Karniadakis, G. E., Kevrekidis, I. G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., & Yang, L. (2021). Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, *3*(6), 422-440.

KHU

- 활용사례 in 원자력
  - System Reliability Assessment
    - ✓ Zhou, T., Droguett, E. L., & Mosleh, A. (2021). Physics-Informed Deep Learning: A Promising Technique for System Reliability Assessment. arXiv preprint arXiv:2108.10828.
    - ✓ FT 정량화에 PINN을 적용하여 Top event 확률 계산.
  - Point Kinetics equation
    - ✓ Schiassi, E., De Florio, M., Ganapol, B. D., Picca, P., & Furfaro, R. (2022). Physics-informed neural networks for the point kinetics equations for nuclear reactor dynamics. Annals of Nuclear Energy, 167, 108833.
    - ✓ Temperature Feedback이 있을 경우 PKE를 PINN에 기반한 프레임워크로 솔루션 도출.
  - Radioactive Material Diffusion
    - ✓ Kim, G., & Heo, G. Radioactive Material Dispersion Modeling using Physics Informed Neural Network. KNS 2020.
    - ✓ Air Dispersion Equation을 가정 없이 풀기 위해 PINN을 활용.
  - etc.

- 물리 법칙
  - 일반적인 미분방정식, $f = 0$
  - $f = u(x,t) + N_x[u] = 0, x \in \Omega, t \in [0,T]$
    - ✓ $u(x,t)$: Latent (hidden) solution
    - ✓ $N_x[u]$: Nonlinear differential operator
    - ✓ Ω : x 범위 (파이프 길이, 직경 등)
    - ✓ $[0,T]$: 시간 범위
  - 초기, 경계 조건
    - ✓ $f(x,0) = 1$
    - ✓ $f(\infty,t) = 0$
    - ✓ etc.

- 이 논문의 물리 법칙

- $$f = \begin{cases} \frac{dI}{dt} - \left(\gamma_I \Sigma_f \phi_T - \lambda_I I\right) \\ \frac{dX}{dt} - \left(\gamma_X \Sigma_f \phi_T + \lambda_I I - \sigma_{a2}^X \phi_T X - \lambda_X X\right) \end{cases}$$

- 초기조건
  - $I(0) = 10^{15}\ \#/cm^3, X(0) = 10^{14}\ \#/cm^3$

Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational physics*, *378*, 686-707.

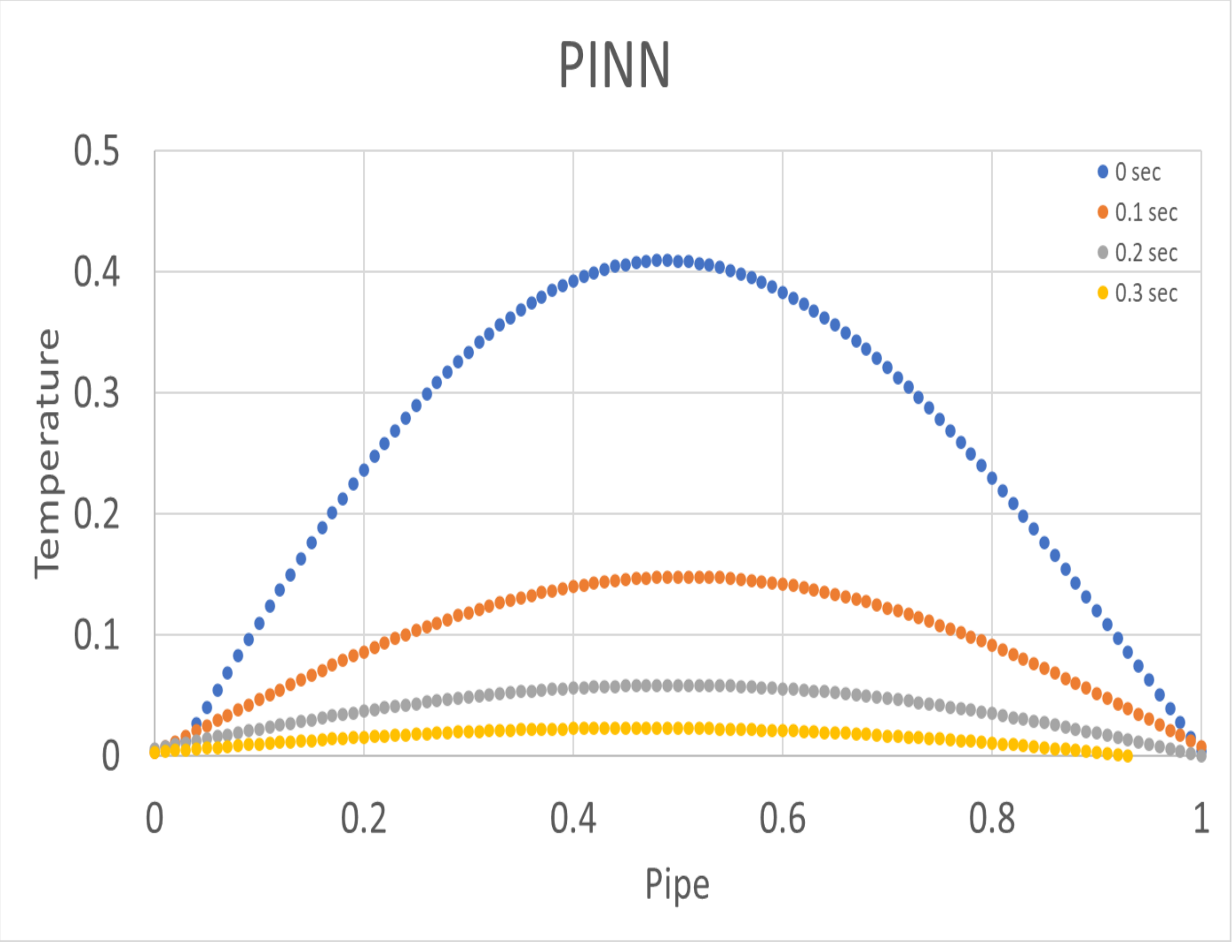
KHU

- Total loss function, L_{MSE}
  - $L_{MSE} = L^{u}_{MSE} + W \cdot L^{f}_{MSE}$, where, W is weight of L^{f}_{MSE}
- Loss function about initial or boundary condition, L^{u}_{MSE}
  - $L^{u}_{MSE} = \frac{1}{N_u}\sum_{i=1}^{N_u}[u_{NN}(t_u^i, x_u^i; \theta) - u^i]^2$
    - ✓ N_u : $u(x,t)$에 의해 생성된 point의 개수
    - ✓ $u_{NN}(t_u^i, x_u^i; \theta)$: 각 point(초기, 경계 조건)에 대해서 신경망이 예측한 값
    - ✓ u^i : 각 point(초기, 경계 조건)에 대한 참값
- Loss function about differential equation, L^{f}_{MSE} >> 물리법칙이 적용되는 부분
  - $L^{f}_{MSE} = \frac{1}{N_f}\sum_{i=1}^{N_f}[f(t_f^i, x_f^i)]^2 = \frac{1}{N_f}\sum_{i=1}^{N_f}[f(t_f^i, x_f^i) - 0]^2$
    - ✓ N_f :$f(t_f^i, x_f^i)$에 의해 생성된 point의 개수
    - ✓ $f(t_f^i, x_f^i)$: 각 point에 대해서 신경망이 예측한 값
    - ✓ 0 : 각 point에 대한 참값

Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational physics, 378, 686-707.

KHU

- 열전도 방정식
  - $\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}$, $\alpha = 1, L = 1$ 인 경우.
  - 초기조건
    - ✓ $u(x,0) = \begin{cases} x, & 0 < x < 0.5 \\ 1 - x, & 0.5 \leq x < 1 \end{cases}$
  - 경계조건
    - ✓ $u(0,t) = u(1,t) = 0$



```python
def physics_net(self, xt):
    x = xt[:, 0:1]
    t = xt[:, 1:2]

    with tf.GradientTape(persistent=True) as tape:
        tape.watch(t)
        tape.watch(x)
        xt_t = tf.concat([x,t], axis=1)
        u = self.nn(xt_t)
        u_x = tape.gradient(u, x)
    u_xx = tape.gradient(u_x, x)
    u_t = tape.gradient(u, t)
    del tape

    return u_t - u_xx
```

미분 term

물리법칙, $f = 0$

```python
def learn(self, xt_col, xt_bnd, tu_bnd):
    with tf.GradientTape() as tape:
        f = self.physics_net(xt_col)
        loss_col = tf.reduce_mean(tf.square(f))

        tu_bnd_hat = self.nn(xt_bnd)
        loss_bnd = tf.reduce_mean(tf.square(tu_bnd_hat-tu_bnd))

        loss = loss_col + loss_bnd

    grads = tape.gradient(loss, self.nn.trainable_variables)
    self.opt.apply_gradients(zip(grads, self.nn.trainable_variables))

    return loss
```

$$L_{MSE}^{f} = \frac{1}{N_f}\sum_{i=1}^{N_f}[f(t_f^i)]^2$$

$$L_{MSE}^{u} = \frac{1}{N_u}\sum_{i=1}^{N_u}[u_{NN}(t_u^i;\theta) - u^i]^2$$

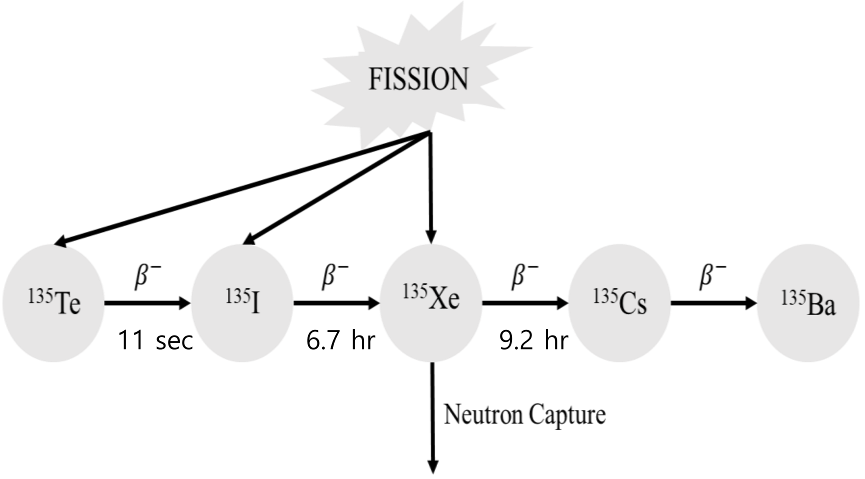
$$L_{MSE} = L_{MSE}^{u} + W \cdot L_{MSE}^{f}$$

03 ABOUT XENON-135

- Xenon-135 (^{135}Xe)
  - 원자로에 대표적인 **독 물질** 중 하나로서 큰 열중성자 흡수 단면적을 가지고 있음.
  - 이 때문에 원자로 운전, 정지 상태 모두 악영향을 끼침.
  - 증배계수 (K_{eff})가 1을 유지하기 어렵게 만듦.
  - 원자로 정지 후 재가동 시, 누적된 ^{135}Xe 때문에 제어봉의 반응도보다 더 큰 부반응도가 생겨 재가동을 하지 못하게 함. >> Reactor Dead Time
  - etc.

Lamarsh, J. R., & Baratta, A. J. (2001). *Introduction to nuclear engineering* (Vol. 3, p. 783). Upper Saddle River, NJ: Prentice hall.

- Production of Xenon-135
  - ^{135}Xe의 생성 경로는 두 가지로 ^{135}I 가 β붕괴 또는 ^{235}U 의 핵분열임.
  - 그러므로 ^{135}I의 양 또한 파악해야 함.
  - ^{135}I의 생성 경로는 엄밀하게는 두 가지로 ^{135}Te의 β붕괴 또는 ^{235}U 의 핵분열임. 하지만 ^{135}Te의 반감기가 매우 짧기 때문에 ^{235}U 의 핵분열만으로 생성된다고 해도 무방함.
  - ^{135}I의 소멸 경로는 한 가지로 β붕괴임.



- Destruction of Xenon-135
  - ^{135}Xe의 소멸 경로는 두 가지로 중성자를 흡수하거나 β붕괴하는 경우임.

$$\begin{cases} \dfrac{dI}{dt} = \gamma_I \Sigma_f \phi_T - \lambda_I I \\ \dfrac{dX}{dt} = \gamma_X \Sigma_f \phi_T + \lambda_I I - \sigma_{a2}^X \phi_T X - \lambda_X X \end{cases}$$

Lamarsh, J. R., & Baratta, A. J. (2001). *Introduction to nuclear engineering* (Vol. 3, p. 783). Upper Saddle River, NJ: Prentice hall.

KHU

- INPUT
  - t_u^i: 초기 조건 $I(0) = 10^{15}\ \#/cm^3, X(0) = 10^{14}\ \#/cm^3$ 의 input인 0을 입력.
  - u^i : 초기 조건의 output인 $10^{15}\ \#/cm^3, 10^{14}\ \#/cm^3$ 을 입력.
  - t_f^i : 0~400 hour 범위에서 한 iteration 마다 랜덤(uniform distribution)으로 10,000 개씩 입력.
  - $\phi_T = \begin{cases} 10^{14}\ \#/cm^2 \cdot h & : t < 200h \\ 0.5 \times 10^{14}\ \#/cm^2 \cdot h & : t \geq 200h \end{cases}$ 을 적용하기 위해 t에 따라 ϕ_T 를 다르게 입력.
  - 기타 상수들을 입력.

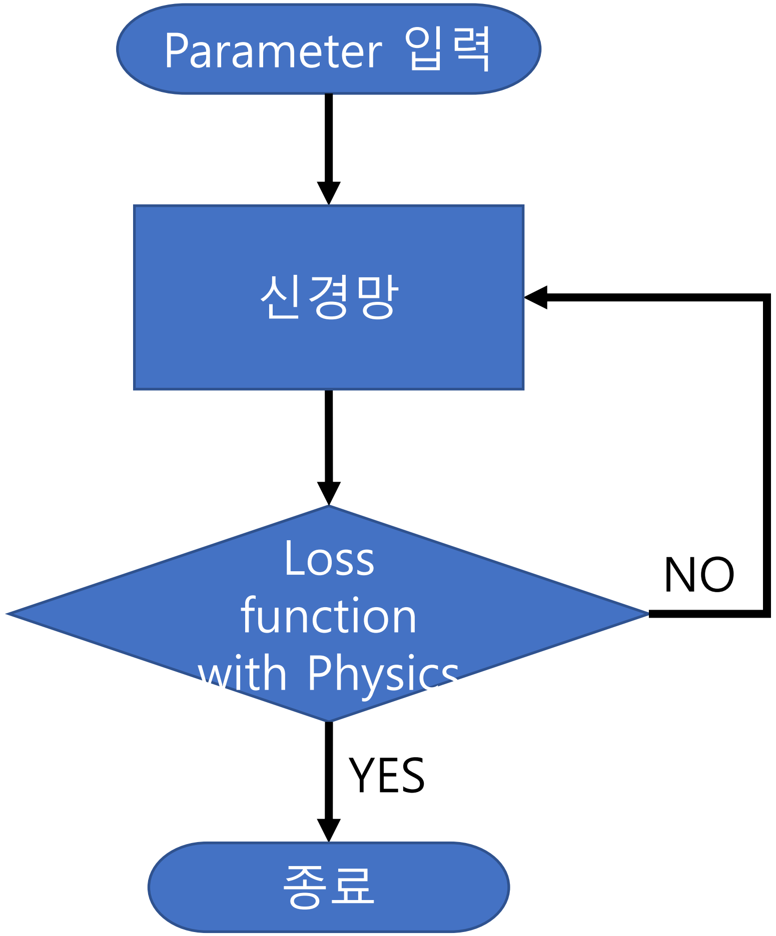
KHU

- OUTPUT
  - $u_{NN}(t_u^i; \theta)$: 각 point(초기, 경계 조건)에 대해서 신경망이 예측한 값
  - $f(t_f^i)$: 각 point에 대해서 신경망이 예측한 값을 미분방정식에 대입한 값

✓ $$\begin{cases} \dfrac{dI}{dt} - (\gamma_I \Sigma_f \phi_T - \lambda_I I) \\ \dfrac{dX}{dt} - (\gamma_X \Sigma_f \phi_T + \lambda_I I - \sigma_{a2}^X \phi_T X - \lambda_X X) \end{cases}$$

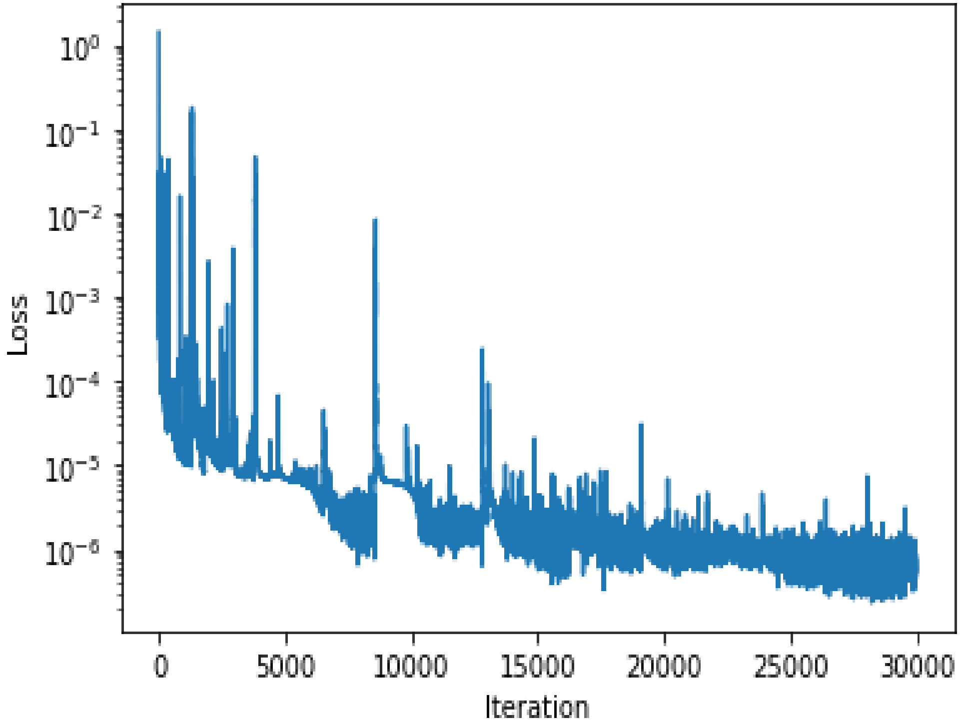
- 신경망
  - Hidden layer 4개로 구성되며 각 layer는 node 50개를 갖고 Activation function은 'ReLU' 사용.
  - 30,000번 iteration
  - ADAM optimizer

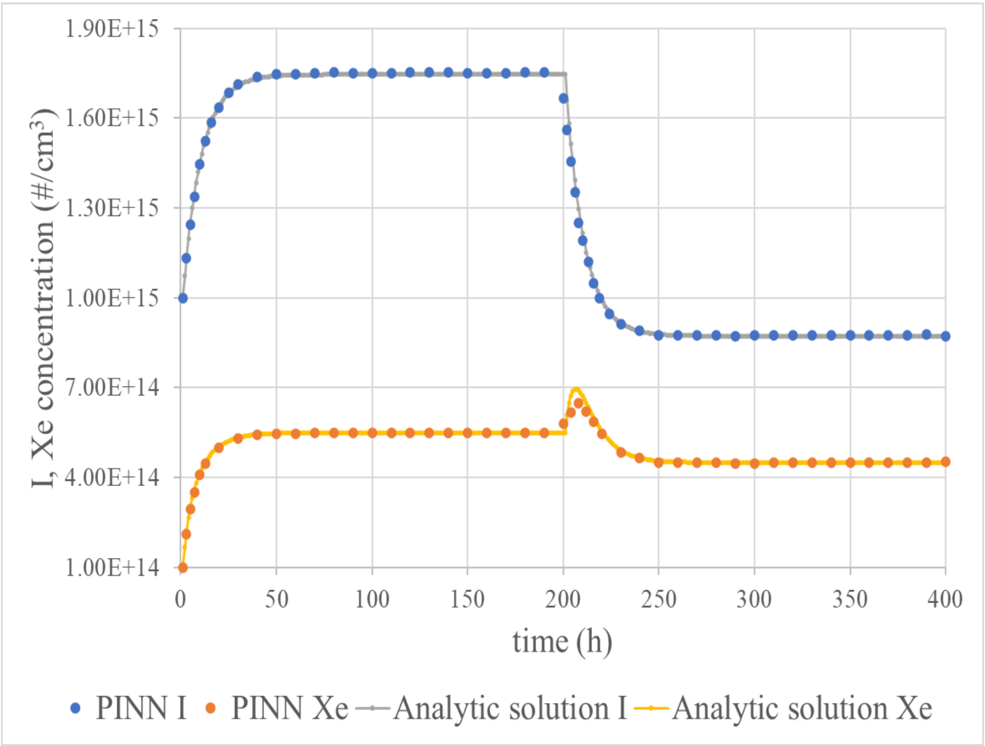
KHU



- Parameter 입력
  - 미분방정식 및 초기, 경계 조건 등을 입력.
- 신경망
  - 점점 Loss 값이 감소하는 방향 (optimizer)으로 예측 값을 도출.
- Loss function
  - 물리 법칙이 적용된 loss 값이 도출되고 이 수준이 사용자가 판단한 수준 이하라면 종료.

05 RESULT





- 30,000번 반복 후, Loss 값이 10^{-6} 수준으로 감소. Peak 또한 높이가 이전보다 감소.
- Analytic solution과 비교하였을 때, 출력이 변하는 상황에서도 비슷하게 예측.

06 CONCLUSIONS

- PINN을 Xe Oscillation 문제에 적용하여 PINN에 대한 기본적인 이론 및 적용 방법을 학습.
- PINN은 기존의 미분방정식 solver와 크게 다르지 않은 값을 예측함.
- 관측 데이터는 일종의 경계 조건이기 때문에 이는 경계 조건의 손실함수(L_{MSE}^{u})에 추가할 수 있고 이를 통해 더 현실적인 문제를 해결할 수 있음.
- $L_{MSE}^{u} = \frac{1}{N_u}\sum_{i=1}^{N_u}[u_{NN}(t_u^i;\theta) - u^i]^2$ 에서 경계 조건의 input은 t_u^i, output은 u^i 에 입력
- EX) $I(100) = 50\ \#/cm^3, X(100) = 30\ \#/cm^3$ → $t_u^i = \begin{bmatrix} 0 \\ 100 \end{bmatrix}, u^i = \begin{bmatrix} 10^{15} & 10^{14} \\ 50 & 30 \end{bmatrix}$

Q&A

감사합니다.