摘要

被动伽马射线发射断层成像（PGET）由国际原子能机构研发，可用于直接成像乏核燃料组件中各个燃料棒的空间分布，从而确定是否存在潜在的转移行为。

构建对PGET测量结果的分析与解读，依赖于全面数据集的可用性。实验数据成本高、数量有限，因此需要借助蒙特卡罗模拟进行补充。蒙特卡罗模拟的主要问题在于，模拟断层成像的360个角度视图需要很高的计算成本。数值科学中也普遍存在类似挑战。

为应对这一挑战，我们开发了一种物理感知降阶建模方法。该方法提供了一个框架，将 360 个角度视图中的少量视图与计算成本低廉、能体现物理本质的代理解相结合，从而能够实时获得所有角度视图下的高保真解，同时大幅降低计算成本。

arXiv:2303.04675v1 [math.NA] 8 Mar 2023

消除被动伽马发射断层成像模拟的计算成本：一种物理感知降阶建模方法

NicolaCavallini[1], Riccardo Ferretti[1], Gunnar Bostrom[1], Stephen Croft[2], Aurora Fassi[1], Giovanni Mercurio[1],Stefan Nonneman[1],和 Andrea Favalli[1,3]

[1]欧盟委员会联合研究中心，恩里科·费米路，伊斯普拉，I -211027（Va），意大利[2]兰卡斯特大学，贝利里格，兰卡斯特，英国[3]洛斯阿拉莫斯国家实验室，邮政信箱1663，洛斯阿拉莫斯，新墨西哥州87545，美国[*]andrea.favalli@ec.europa.eu

2023年3月9日

引言

被动伽马发射断层成像（PGET）是一种为乏核燃料核查而开发的测量技术，有助于满足核不扩散和保障要求。它是国际原子能机构在《不扩散核武器条约》（NPT）框架下采取的一系列技术措施之一，旨在确保每个成员国都遵守乏核燃料管理和核材料衡算要求。PGET系统用于对乏核燃料组件进行部分缺陷和偏置缺陷核查；在核查过程中，组件被屏蔽并置于水下，之后再移入长期贮存设施或地质处置库。国际原子能机构于2017年批准将PGET用于检查 [17, 16, 26, 18, 5, 9]。

PGET探测器可探测组件在反应堆中使用期间产生的裂变产物不断累积所导致的被动伽马射线发射。最重要的伽马射线特征来自裂变产物^{137}Cs、 ^{134}Cs、 ^{154}Eu、 ^{106}Ru和 ^{144}Ce [10]。这些特征之所以重要，是因为它们能够提供有关组件初始富集度、燃耗和冷却时间的信息，同时也便于测量。只有少数裂变产物的产量足够高，且其伽马射线发射强烈、寿命长并具有较强穿透力，因此通常适用于无损分析。

PGET设计由两个高度准直的线性阵列组成，最多包含91个碲锌镉（CdZnTe）伽马探测器。探测器间距为4 mm。每个探测器后方设有一个钨准直器，其宽15 mm、厚100 mm，在探测器前方的高度为5 mm，并在出口处增至70 mm。两个探测器头安装在旋转盘上，位于盘的两侧，彼此错开2 mm。这一2 mm的错位用于在每个视角下获取182组数据采集结果（称为计数）。PGET探测器系统的技术细节见[3, 2, 26]。

两个探测器阵列围绕乏燃料组件连续旋转。事件数按能量窗和旋转角度窗进行积分。能量窗的典型取值为： $<$400 keV、400-600 keV、600-700 keV 和 700-1200 keV；旋转角度则按每个 360 度区间进行积分。PGET采集序列的最终产物是每个能量窗对应的一幅正弦图。正弦图是一个矩阵，其行数等于探测器的数量，列数等于角度视图的数量；标准采集中角度视图为 360 个。准确的正弦图是断层重建算法的必要输入，这些算法旨在重建乏燃料轴向截面，以检测异常或转移，包括单根燃料棒级别的情况（即所谓的偏置缺陷）。

值得一提的是，与医疗和工业断层成像系统相比，PGET面临着独特的挑战，这是由于乏核燃料具有广泛的伽马活度范围，且核材料的伽马衰减很强。这些参数不受实验人员控制，因此在检测组件中心的异常时颇具挑战性 [25]。

用于分析和解释 PGET 测量的算法开发与评估研究，例如基于人工智能的研究 [9, 15], ，依赖于大量且全面的实验数据和/或模拟数据集。实验数据的可获取性以及所涵盖潜在转移情景的广度都极为有限，而且生成成本高昂。因此，对乏核燃料测量进行逼真的模拟，对于评估用于解释 PGET 测量的算法性能至关重要，尤其是对于稳健地识别潜在转移情形而言。

例如，使用蒙特卡罗 N 粒子（MCNP）程序[14], 进行蒙特卡罗模拟，可构建包含模拟案例及相关正弦图的真实且扩展的数据集；然而，其计算成本很高。事实上，高保真模拟需要在详细的几何结构中处理完整的物理辐射输运，

即PGET系统的几何结构。Miller 等人和 Wittman 等人指出，对燃料组件进行高保真 MCNP 模拟以测量 PGET时，生成正弦图所需的基本360个角度视图，在由128个节点和8192个核心组成的集群上大约需要6—7天 [18, 30, 21]。

为应对这一挑战，我们开发了一种物理感知降阶建模方法。在该方法中，我们结合了（1）360个角度视图中的有限视角（有限视角层析成像），以及（2）基于朗伯-比尔定律实时解析构建的、涵盖全部360个视角的近似正弦图，从而融入物理本质。通过仅模拟稀疏子集的角度视图，我们降低了计算成本。计算收益与跳过的视角数量成正比（例如，模拟60个视角而非360个，计算成本可降至约六分之一）。随后，物理感知降阶模型方法能够重建全部角度视图。具体而言，该方法使用本征正交分解（POD）[22, 19, 7, 11], ——这是降阶建模数值方法中的一种技术——通过对有限视角数据矩阵应用奇异值分解（SVD），识别数据中的主导模式。我们将这一方法命名为物理感知本征正交分解（PA-POD）。

我们使用国际原子能机构在 PGET层析成像与分析挑战赛（2019 [1, 29]中发布的数据来测试和评估该方法的性能。我们将国际原子能机构现场数据集用作逼真的模拟数据的替代数据集。该数据集作为真实值，用于应用我们的PA-POD方法。我们对有限数量的角度视图进行采样，并通过 PA-POD 在每个角度视图重建正弦图。通过比较真实值与重建结果，评估该方法的性能。在国际原子能机构的数据中，有三个案例尤其值得关注，因为它们对应现场情景。这些案例分别称为竞赛三、四和五，对应 VVER（水-水动力反应堆）、压水堆（压水反应堆）和沸水堆（沸水反应堆）燃料组件。在结果部分，我们报告了将 PA-POD方法应用于国际原子能机构压水堆组件案例所得的结果，因为压水堆核电站占全球核电站的绝大多数。所有结果均针对 600–700 keV能窗：该能窗包含 ^{137}Cs 的 661.7千电子伏伽马发射线。这是乏核燃料的一条主要伽马发射线，其半衰期相对较长，为 30 年[10]。

我们的方法

我们将正弦图矩阵 $\mathbf{S}$（即真实值）视为未知连续解$\mathbf{s}(y,\theta)$ 的离散表示，其中 y 表示探测器的空间坐标， θ 表示角坐标。POD 使用一组减少后的角度视图来估计主导模式（即模态）$\mathbf{u}_i(y)$，并将解近似为这些模式的线性组合。近似解为：

$$\tilde{\mathbf{s}}(y,\theta) = \sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{u}_i(y)\, \mathbf{c}_i(\theta), \tag{1}$$

其中 k为选定模态的数量。模态 $\{\mathbf{u}_i(y)\}$ 的所有可能线性组合（其中 $i = 0, \ldots, k-1$）构成所谓的 POD 解空间（或POD空间），其维数为 k 。接下来的步骤中，我们将统一符号，并概述 PA-POD 方法。

1. **数据库创建：** 取一组位于角坐标θ_n处的 N_s 模拟/测量有限角度视图，并构造配对集合 $\{\mathbf{s}(y,\theta_n)\ \theta_n\}$，其中 $n = 0, \ldots, N_s - 1$。将这些数据存储在数据库矩阵 $\hat{\mathbf{S}}_{N\times N_s}$ 中，其中 N 为探测器数量。

2. **POD 解空间构建：** 对数据库矩阵应用奇异值分解：$\mathbf{S} = \mathbf{U}\,\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^*$。即将数据库矩阵分解为两个酉矩阵$\mathbf{U}$ 和 $\mathbf{V}$，以及一个对角矩阵$\mathbf{\Sigma}$。其中 * 表示共轭转置。 $\mathbf{\Sigma}$的对角元素 δ_j ，也就是奇异值，均为非负数，并按从大到小的顺序排列。通常将它们归一化为 $\sigma_j = \frac{\delta_j}{\sum_{l=0}^{N-1} \delta_l}$。 我们将相对于第 j个奇异值的信息方差定义为前σ_j个奇异值之和。它衡量前 j 个模态 [4, 11]所捕获的总数据变化量。$\mathbf{U}$ 的第 i列存储模态$\mathbf{u}_i$（y）。为了构建合适的POD 解空间，我们需要在模态数量和信息方差之间取得平衡。这既能降低问题的维数，又能避免选取更高阶的模态 [4] ，因为这些模态通常与噪声而非信息相关。

3. **系数估计：** 我们使用$\mathbf{U}^*_{k\times N}$（模态矩阵$\mathbf{U}$前 k 列的共轭转置），投影到$\mathbf{R}_{N\times 360}$这一 POD 空间中；它是完整正弦图$\mathbf{S}$的一种计算开销较低的近似。我们将此近似称为实时近似前向模型，简称实时模型。在 PGET 的情况下，该模型是应用于燃料组件几何结构体素化结果的朗伯指数衰减模型。它简化了伽马光子输运，并能够在任意可能的 PGET 角度视角下进行实时近似。该模型最初由 [2], 提出；我们自行实现的详细信息见“方法”一节。因此，我们获得了 360 个视角下的系数集合估计，$\tilde{\{\mathbf{c}_i(\theta_m)\}}$，如方程（1）所示，其中 $i = 0, \ldots, k-1$，且 $m = 0, \ldots, 359$。写成矩阵形式：$\mathbf{C}_{k\times 360} = \mathbf{U}^*_{k,\,N}\mathbf{R}_{N\times 360}$。$\tilde{}$ $\hat{}$系数$\mathbf{C}$ 按行缩放，使其与$\mathbf{S}$ 的取值相匹配。

4. **解评估：** 最终的近似正弦图由方程（1）表示，可写成 $\tilde{}$ $\tilde{}$矩阵形式：$\mathbf{S} = \mathbf{U}\mathbf{C}$。

我们定义并报告重建图像上的误差，而非正弦图上的误差，因为在 PGET 分析中，正弦图的质量是根据其重建结果的质量来评判的。作为度量指标，我们选择量化滤波反投影（FBP，其数学表示为算子 $\mathcal{F}(\cdot)$）的误差矩阵$\mathbf{e}$ ，分别应用于真实值、实时近似前向模型和我们的 PA-POD 估计。具体而言，我们使用了 FBP 的斜坡滤波版本 [13, 23]。具体来说，逐像素误差图的定义如下：

$$\mathbf{e}_{\text{Real-Time Model}} = \left| \frac{\mathcal{F}(\mathbf{R}) - \mathcal{F}(\mathbf{S})}{\mathcal{F}(\mathbf{S})} \right|; \quad \mathbf{e}_{\text{PA-POD}} = \left| \frac{\mathcal{F}(\tilde{\mathbf{S}}) - \mathcal{F}(\mathbf{S})}{\mathcal{F}(\mathbf{S})} \right|.$$

我们应用一个掩膜（矩 阵），以选取大于最大值 15% 的 $\mathcal{F}$（$\mathbf{S}$）值。该掩膜覆盖
组件横截面 及其前提区域，该区域记为 Ω_{tot}。

此外，我们使用累积误差分布作为地图 $\mathbf{e}_{\text{Real-Time Model}}$ 和$\mathbf{e}_{\text{PA-POD}}$ 的积分误差度量。给定误差阈值 ϵ_{th}，我们统计误差小于或等于该阈值的像素数量，并将其标记为 $\Omega|_{\epsilon_{\text{th}}}$。我们将像素比例定义为该区域与 Ω_{tot} 之比：

$$\text{pixel fraction} = \frac{\Omega|_{\epsilon_{\text{th}}}}{\Omega_{\text{tot}}}, \tag{2}$$

其值越大，性能越好。本研究中使用的度量无需像常用的结构相似性指数 [28]那样进行任意筛选。

压水堆案例结果

以下结果展示了我们如何应用 PA-POD 方法：从国际原子能机构竞赛数据集中压水堆组件正弦图的 360 个角度视图中进行稀疏采样。具体而言，该组件由 10×10个针组成，其中一个 3×3 针块已被移除；因此，这也是一种转移情景。实时模型基于探测域离散化，详情请参见“方法”一节。报告的结果采用以下网格尺寸计算： $\Delta z = 10$ 毫米、$\Delta x = \Delta y = 0.5$ 毫米，其中 x， y， z 分别是探测域的三个坐标轴。真实正弦图和实时正弦图均归一化至零到一之间。

图 1 中的流程图总结了我们的方法，并概述了压水堆案例的结果。具体而言，我们展示了真实正弦图 $\mathbf{S}$、实时近似正弦图 $\mathbf{R}$、前三个模态$\tilde{}\mathbf{u}_0$,$\mathbf{u}_1$,$\mathbf{u}_2$ 以及 PA-POD 近似正弦图 $\mathbf{S}$。在实时近似前向模型中，我们假设压水堆组件中针所在位置的强度为均匀值，而在左下方$\tilde{}$中心处移除针的 3×3 针块区域内强度为零。PA-POD 正弦图 $\mathbf{S}$ 通过从数据库矩阵中随机采样 60 个视角构建，并选取前 60 个模态来构造 POD空间。左上角以橙色突出显示的视角用于直观展示数据库矩阵；这些旋转角度仅为示例。

图2展示并量化了误差。在图（**a**）中为真实值，而（**b**）和（**c**）中的误差图则以空间形式直观呈现误差。为避免任何流程偏差效应，我们重复进行视角采样100次，并绘制每个像素误差的中位数。图（**c**）显示，PA-POD能够修正针之间及组件周围的大多数高误差像素。PA-POD相对误差图清楚表明，该方法能够以约10%的相对误差重现实际数据。

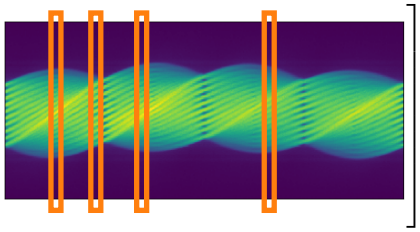
图2（**d**）和（**e**）通过绘制误差累积分布补充了完整图景；我们将其称为像素比例，以强调其几何意义，见公式 2。由于两个正弦图经过归一化，图2（**d**）起始时，与真实值相同的像素数量很少。随着考虑的误差增大，PA-POD能够以特定精度描述的区域，其增长梯度远比实时模型陡峭。图2（**b**）以更精细的粒度展示了结果。我们聚焦于10%的相对误差，发现PA-POD覆盖了总面积的58%，而实时模型以相同精度描述的面积为29%。这些结果表明，仅使用总视角数的16%，就有可能使实时模型的精度大约提高一倍。

图3(a)进一步详细研究了 PA-POD方法的收敛性。对于 $k = N_s$，我们将 N_s 从 30 变化到 120，间隔为 10。对于每个 N_s 值，我们选取 100 组随机均匀视角集，评估 10% 误差下的像素比例，并报告每种分布的均值和标准差。PA-POD 在样本非常稀疏时表现最佳，即样本数在 30 到 60 之间。从 80 个样本开始，收敛趋于平稳；这种现象是由于系数的非插值性质所致，详情请参见讨论部分。此外，我们注意到，以 10% 误差下的像素比例表示时，标准差小于 0.02，这意味着该方法的性能不受视角选择影响，具有一致性。图 3(b) 展示了视角选择对像素比例分布影响的局部放大图。我们考察 10% 误差下的像素比例，并针对 1000 组由六十个视角构成的均匀随机视角集进行评估，其中 $N_s = k = 60$。均值为 0.539，标准差为 0.019（以像素比例表示）。这证实了该方法对于视角选择具有稳健性。在图 3(a) 和(b) 中，我们都可以看到，10% 误差下像素比例的均值略低于图2中的数值：0.539，而图2中为 0.57。与图2一样，逐像素评估误差并重复计算、收集其中位数，对误差度量仅产生极小的正则化效应，不会影响我们的总体结论。

真实值

国际原子能机构竞赛，压水堆案例正弦图：

$$\mathbf{S} = \Big[\quad\Big]_{N\times 360}$$



数据库矩阵

由一组有限视角构建，

示例角度 $[7°, 15°, 22°, \theta_{N_s-1}]_{N_s}$：

$$\hat{\mathbf{S}} = \Big[\ \mathbf{秒}(7°)\quad \mathbf{秒}(15°)\quad \mathbf{秒}(22°)\quad \cdots\quad \mathbf{秒}(\theta_{N_s-1})\ \Big]_{N\times N_s} =$$

$$\overset{SVD}{=} \Big[\ \mathbf{u}_0\quad \mathbf{u}_1\quad \mathbf{u}_2\quad \cdots\quad \mathbf{u}_{N-1}\ \Big]_{N\times N_s} \mathbf{\Sigma V}^*$$

POD 解空间构建，降维

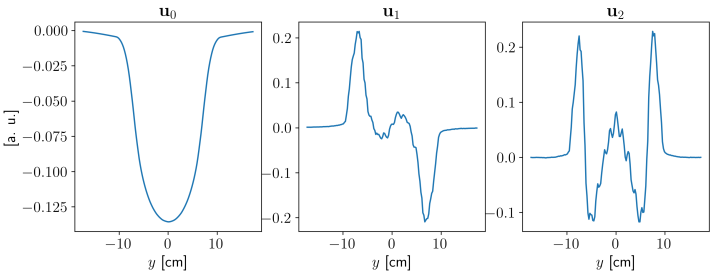
近似解是所选k 基函数的组合

$$\hat{\mathbf{秒}}(y,\ \theta) = \sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{u}_i(y)\, \mathbf{c}_i(\theta),\ ,$$

以矩阵形式表示：

$$\tilde{\mathbf{S}} = \mathbf{U}_{N\times k}\, \tilde{\mathbf{C}}_{k\times 360}$$

ˆ对S应用奇异值分解，以识别主导模式，即构建 POD 解空间：



实时正向近似模型

压水堆案例的完整正弦图

使用实时模型计算

在所有角度视图中。

系数估计

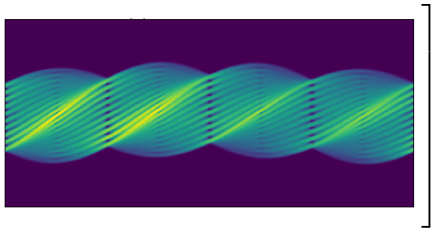
我们将实时解投影到 POD空间：

$$\tilde{\mathbf{C}}_{k\times 360} = \mathbf{U}^*{}_{k\times N}\mathbf{R}_{N\times 360}.$$

解评估

$$\tilde{\mathbf{S}}_{N\times 360} = \mathbf{U}_{N\times k}\tilde{\mathbf{C}}_{k\times 360}$$

$$\mathbf{R} = \Big[\quad\Big]_{N\times 360}$$



$$\tilde{\mathbf{S}} = \Big[\quad\Big]_{N\times 360}$$

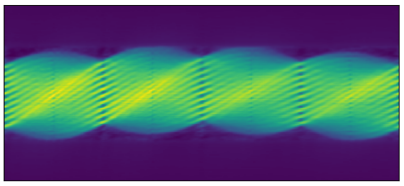


图 1：该图展示了我们 PA-POD方法的主要步骤。左上方展示的是来自国际原子能机构竞赛的压水堆组件的实际正弦图（即我们的真实值），作为高保真数据，在我们的公式中记为 $\mathbf{S}$ 。橙色部分突出显示了用于构建数据库矩阵的有限视角子集。我们展示了 POD 解空间，并绘制了随机选取 $N_s = k = 60$ 个视角时的前三个模态$\mathbf{u}_0$,$\mathbf{u}_1$, $\mathbf{u}_2$。左下方是在相同燃料棒配置下，由实时近似前向模型得到的正弦图$\mathbf{R}$。右下方为 PA-POD公式及其生成的正弦图$\mathbf{S}$。

图4展示了压水堆真实正弦图的奇异值（**a**）以及相应的信息方差（**b**）。图4（**b**）表明，少量模态便能捕获大部分信息方差。具体而言，分别使用8、27和45个模态，可捕获总信息方差的80%、90%和95%。这一结果证实了我们工作的基本假设：无论是通过实验测量还是数值计算得到的正弦图，都可以用有限个主导模式来描述；将这些模式精心组合，便能以稀疏的角度视图提供完整解。

讨论

我们的方法部分受到一种特定形式的本征正交分解的启发，该方法利用插值来估计系数，即带插值的POD（PODI）。在这一领域，研究工作致力于为每种适用情形找到最准确的插值器 [22, 19, 7, 11]。PODI 尤具吸引力，因为它不依赖现象背后的物理，也不涉及描述原型的数学方法；在 ROM 文献中，这类方法被称为非侵入式方法 [11]。本节将简要概述该方法的步骤，说明其在 PGET 案例中的局限性，以及我们在开发 PA-POD 时如何应对这些局限。

在PODI中，通过将数据库矩阵投影到POD空间来估计插值系数：$\mathbf{C}$ =$\mathbf{U}^*$ ˆ$\mathbf{S}$。$\mathbf{C}^{k\times N_s}$的列构成一组对 $\{\mathbf{c}j, \theta_j\}$，其中 $j = 0, \ldots, N_s - 1$。考虑 $\tilde{\theta}$一个旋转角，而非

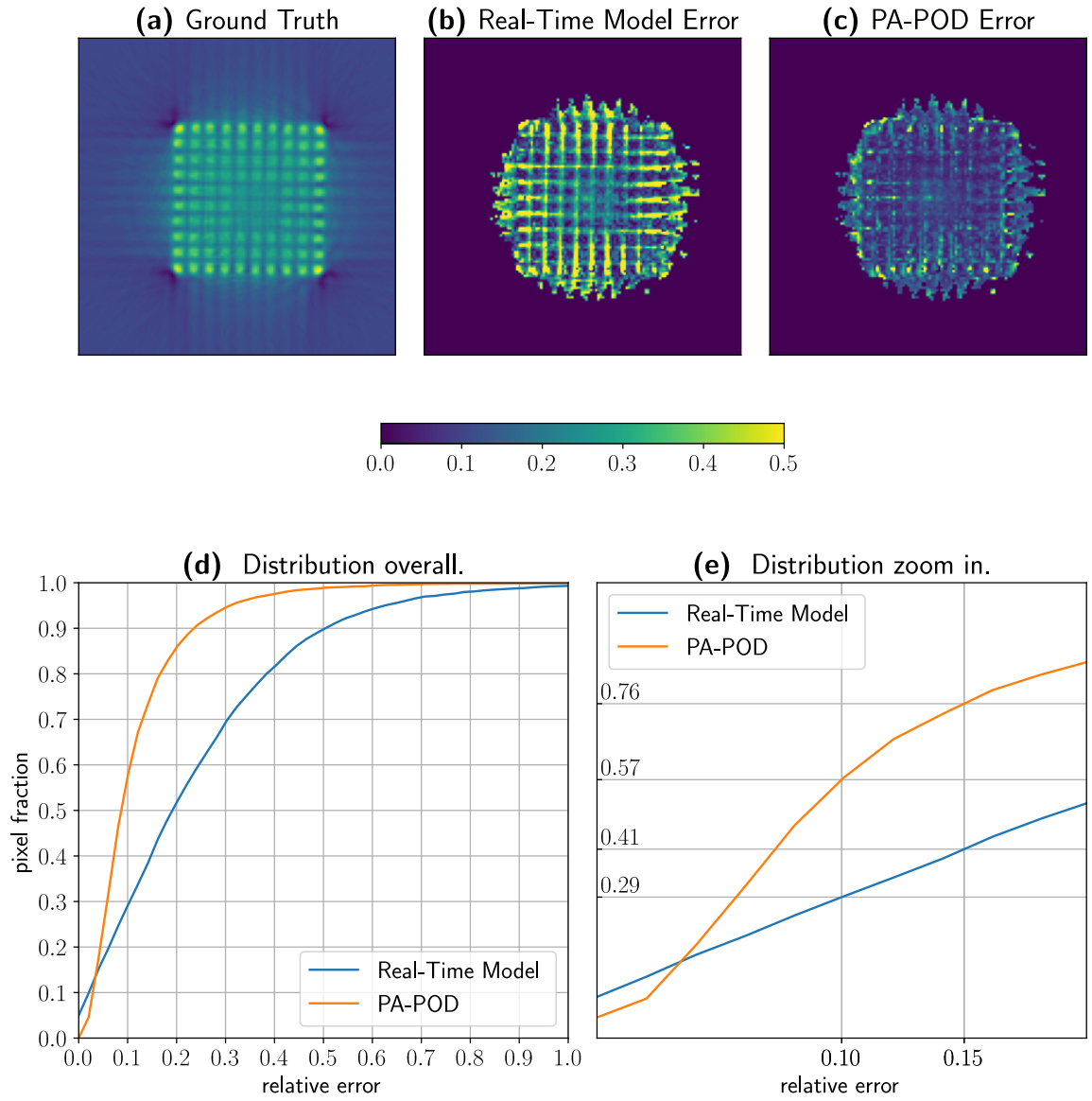


图2：此处我们展示了真实值(a)，以及表征实时模型(b)和我们的PA-POD近似(c)的误差。在PA-POD情况下，我们随机采样乏燃料的六十个视角，将该样本重复一百次，并针对每个像素收集采样数据的中位数。(d) 从实时模型到PA-POD的改进通过蓝线和橙线之间的面积来量化。(d) 更具体地说，考虑10%的误差时，PA-POD覆盖总面积的57%，而实时模型覆盖该面积的29%。

˜包含在我们的样本中，我们对系数 c_{ij} 进行插值以获得 $\{\tilde{\mathbf{c}}\ \theta\}$ 并进行重构：

$$\tilde{\mathbf{s}}(y, \tilde{\theta}) = \sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{u}_i(y) \cdot \tilde{\mathbf{c}}.$$

$\tilde{\mathbf{C}}_{k\times 360} = \mathcal{I}(\mathbf{C}_{k\times N_s})$ 是完整 360 度范围的系数矩阵，它是将插值算子 $\hat{\mathcal{I}}$ 应用于投影到 POD空间中的 $\mathbf{S}$ 所得的结果。

我们在图5中并列比较 PODI 和 PA-POD 方法。在这两种情况下，我们都寻找相同的解结构：

$$\tilde{\mathbf{S}}_{N\times 360} = \mathbf{U}_{N\times k}\tilde{\mathbf{C}}_{k\times 360}$$

在这两种情况下，系数都是通过将可用数据投影到 POD空间中来计算的：

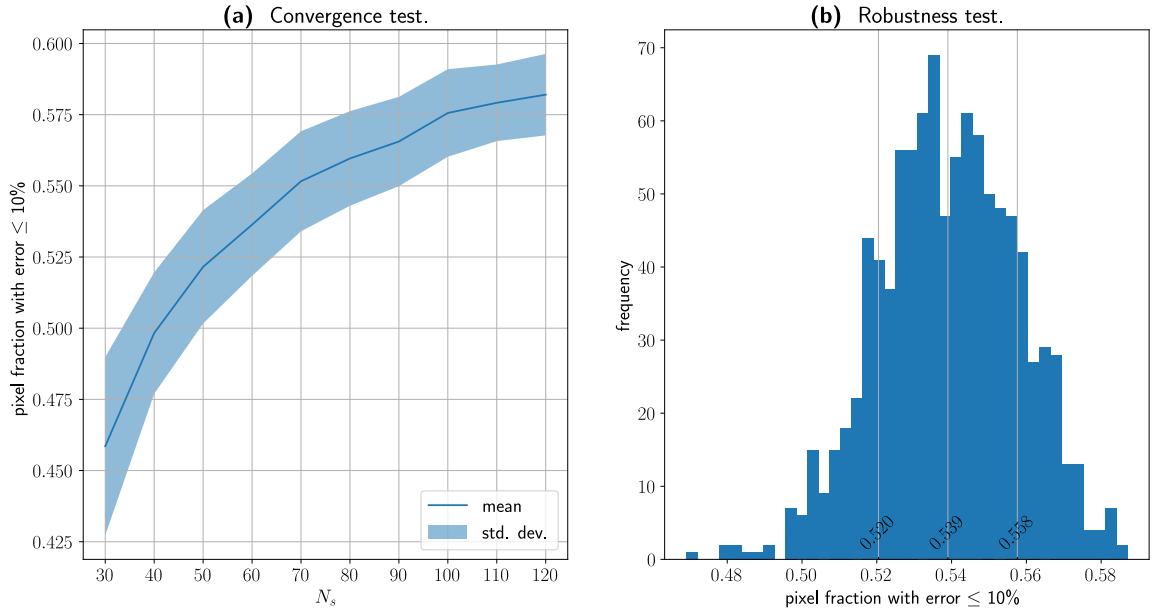


图3：(a) 在 $k = N_s$ 条件下，我们将 N_s 从 30 变化到 120，间隔为 10。对于每个 N_s 值，我们选取 100 个随机均匀视图集，评估 10% 处的像素比例，并报告每种分布的均值和标准差。该方法在 60 到 80 个样本之间表现最佳。图 (b) 更清晰地展示了像素比例分布与样本选择的关系。在 $N_s = k = 60$ 条件下，我们选取 1000 个随机均匀视图集，评估每个视图集的 10% 像素比例，并绘制其分布。我们观察到，均值为 0.545，标准差为 0.017，这两个指标均以像素比例表示。

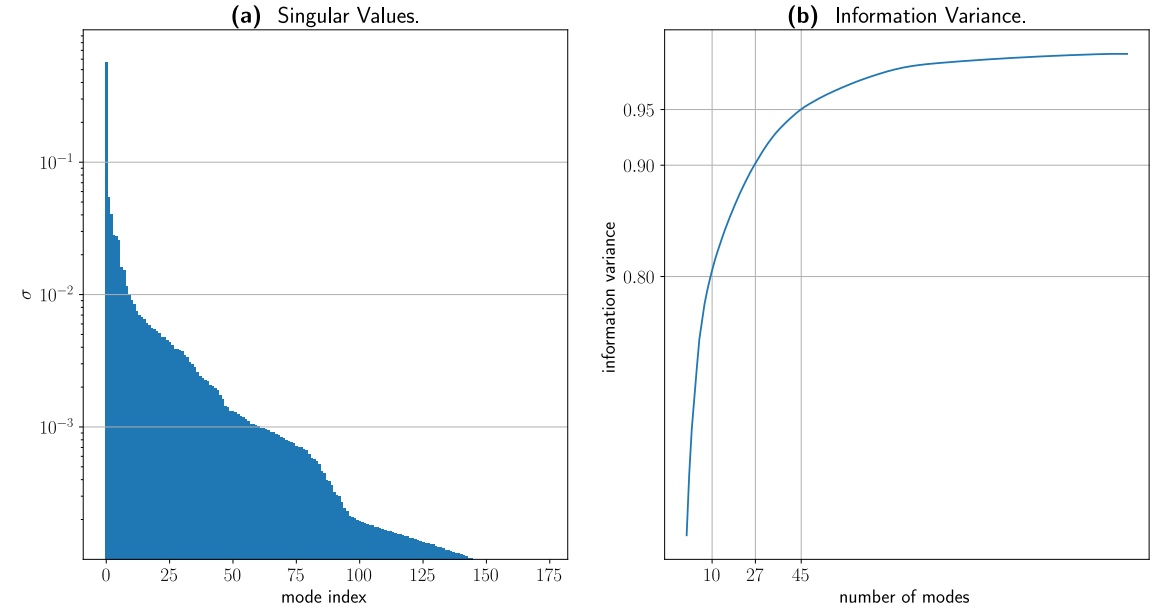


图4：(a) 国际原子能机构压水堆燃料组件正弦图奇异值谱的对数图，以及(b)与之相关的信息方差。值得注意的是，分别需要 8、27 和 45 个模态，才能捕获总信息方差的 80%、90% 和 95%。

$$\mathbf{C}_{k\times N_s} = \mathbf{U}^*{}_{k\times N}\,\hat{\mathbf{S}}_{N\times N_s} \quad \text{vs.} \quad \tilde{\mathbf{C}}_{k\times 360} = \mathbf{U}^*{}_{k\times N}\mathbf{R}_{N\times 360},$$

ˆ而 PODI 对准确但稀缺的数据 $\mathbf{S}_{N\times N_s}$进行插值；相比之下，PA-POD 依赖于由实时模型 $\mathbf{R}_{N\times 360}$提供的近似但密集的数据。

在图6中，我们将几种近似技术的滤波反投影与真实值进行比较，(a)。实时模型(b) 能够有效地近似描述组件几何形状。图(c) 和(d) 由$N_s = k = 60$构建。PODI未能捕捉燃料组件的结构(c)，而PA-POD保留了其几何

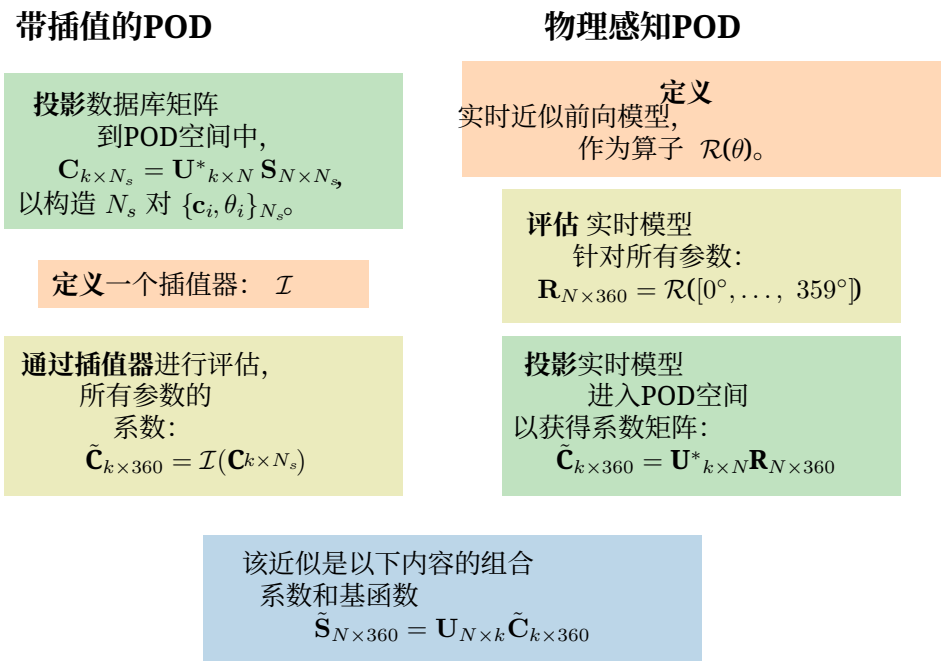


图5：此图展示了PODI与PA-POD的并排对比。在PODI中，我们对准确但稀少的数据进行插值；而在PA-POD中，我们评估密集的实时近似数据。

结构(d)，并恢复了真实值中的部分次级效应。PA-POD重建中可见明显的环状伪影，见图6(d)；使用参考文献 [27]中提供的算法可以去除这一效应。

我们测试了三种不同的插值器。结果如图7所示：真实值见图(a)，(b)在 POD 空间中对系数进行线性插值，(c) 对数据进行线性插值，(d) 对系数进行径向基函数插值，但没有一种方法能够保留 $N_s = k = 60$ 的组件几何形状。在这一探索阶段，我们采用了由高等国际研究学院开发的 EZyRB 软件包 [6]。

插值方法表现不佳的最重要原因是采样稀疏。具体而言，图8和图9显示，插值点间距过大，无法有效进行插值。

图8概述了模态和系数，其中包含 $k = N_s = 60$。图中展示了通过三种不同方式计算的前四个系数。首先，我们将真实值投影到 POD 空间中：

$$\mathbf{C}_{\text{ground truth}} = \mathbf{U}^*\,\mathbf{S},$$

ˆ这是对预期系数所能得到的最佳近似。其次，我们按照 PODI 方法的规定，将样本 **S** 投影到 POD 空间中。第三，我们采用 PA-POD 方法计算系数，将完整正弦图的低成本近似（即实时模型的结果）投影到 POD 空间中。

我们注意到，尽管样本整体上与真实值拟合良好，但仍遗漏了重要细节，导致几何结构重建失败。另一方面，与 PODI 情况不同，PA-POD 系数并非插值型，但能更好地整体描述组件几何形状。我们注意到，对于数据库矩阵 **S**，模态 **U**(: i) ˆ 与从完整正弦图 **S** 得到的模态非常吻合，见图8。

图9展示了系数矩阵的若干细节。采样不够精细，无法捕捉系数的实际形状；无论插值器的精度如何，除非恢复原型的物理感知（正如我们采用 PA-POD 所做的那样），否则都无法恢复数据中不存在的信息。

如图9所示，显然 PA-POD 系数并非插值型。因此，得到的正弦图在采样位置处与原始正弦图并不完全一致。

未来方向

我们的 PA-POD 能够以较低的计算成本生成扩展模拟，从而支持构建数字孪生系统。在该系统中，实际测量数据和模拟数据会与深度学习算法相结合，并随着测量和模拟数据的实时生成而持续更新。这样做的优势在于，能够提供一个集成的系统、硬件和数字孪生，用于利用 PGET 对辐照核燃料组件进行实时、高精度验证。我们提出的方法可以轻松调整并应用于核保障及其他领域的应用，例如为伽马射线断层扫描技术创建数据集 [24]，（这是一种无损分析技术），以及用于核材料和全球安全应用的其他射线照相/断层成像方法[12]。

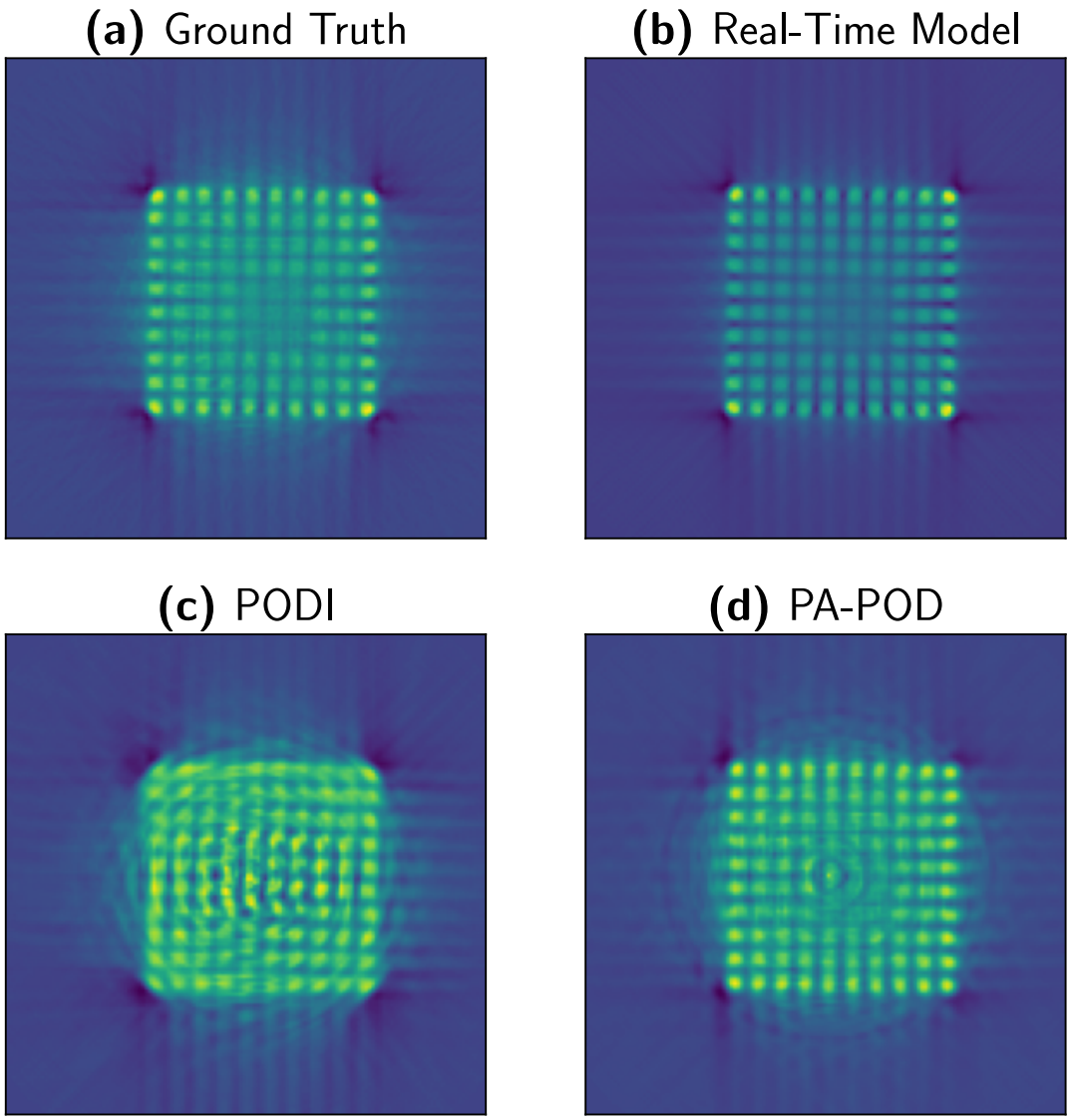


图6：国际原子能机构数据的滤波反投影(a)，以及我们正在研究的近似方法，$N_s = k = 60$。实时模型(b) 和 PA-POD(d) 保留了乏燃料的几何结构，而 PODI 无法提供具有代表性的重建(c)。

方法

论文中使用的参考数据（国际原子能机构竞赛）

我们的方法开发及相关验证得益于来自真实案例场景的高保真数据。国际原子能机构在举办国际原子能机构断层成像与分析挑战赛期间提供的数据集非常符合这一目的。相关数据可公开获取 [1, 29, 20]。在若干模拟数据中，提供了少量测量数据，本文使用了其中一部分。在本文中，国际原子能机构数据的原始名称“竞赛3”“竞赛4”和“竞赛5”分别更名为 VVER、PWR 和 沸水堆。在所展示的结果中，我们重点研究了 PWR 案例及 600–700 千电子伏的能量沉积窗口，该窗口包含 ^{137}Cs 在 661.7千电子伏处的全能峰；这种伽马射线发射是乏核燃料的主要伽马射线发射之一 [10]。

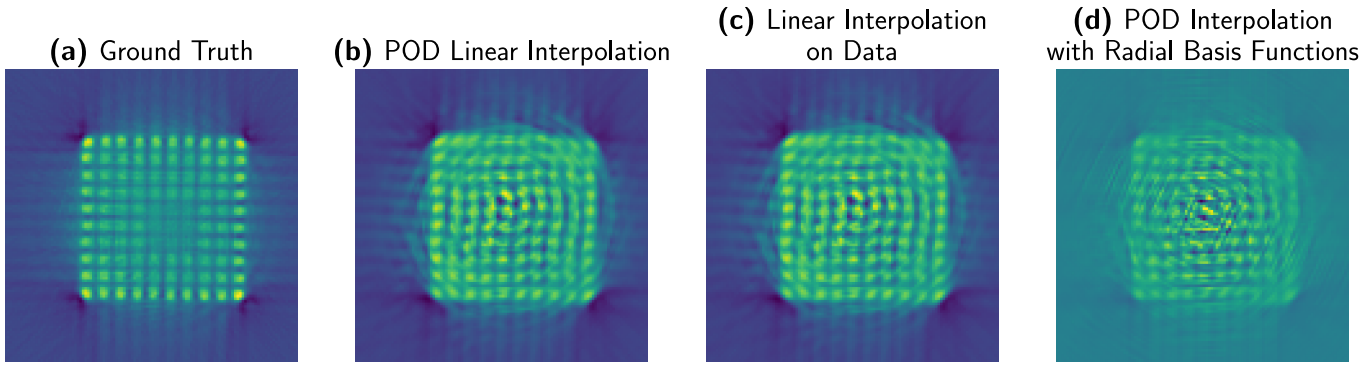


图7：此图展示了对三种不同插值结果应用滤波反投影的效果，其中包含 $N_s = 60$ 和$k = 30$。(a) 真实值；(b) 对系数进行线性插值的 POD；(c) 对数据进行线性插值；(d) 采用径向基函数插值的 POD。这三种近似方法都严重破坏了燃料组件的几何结构。它们都未能保留组件燃料棒结构。

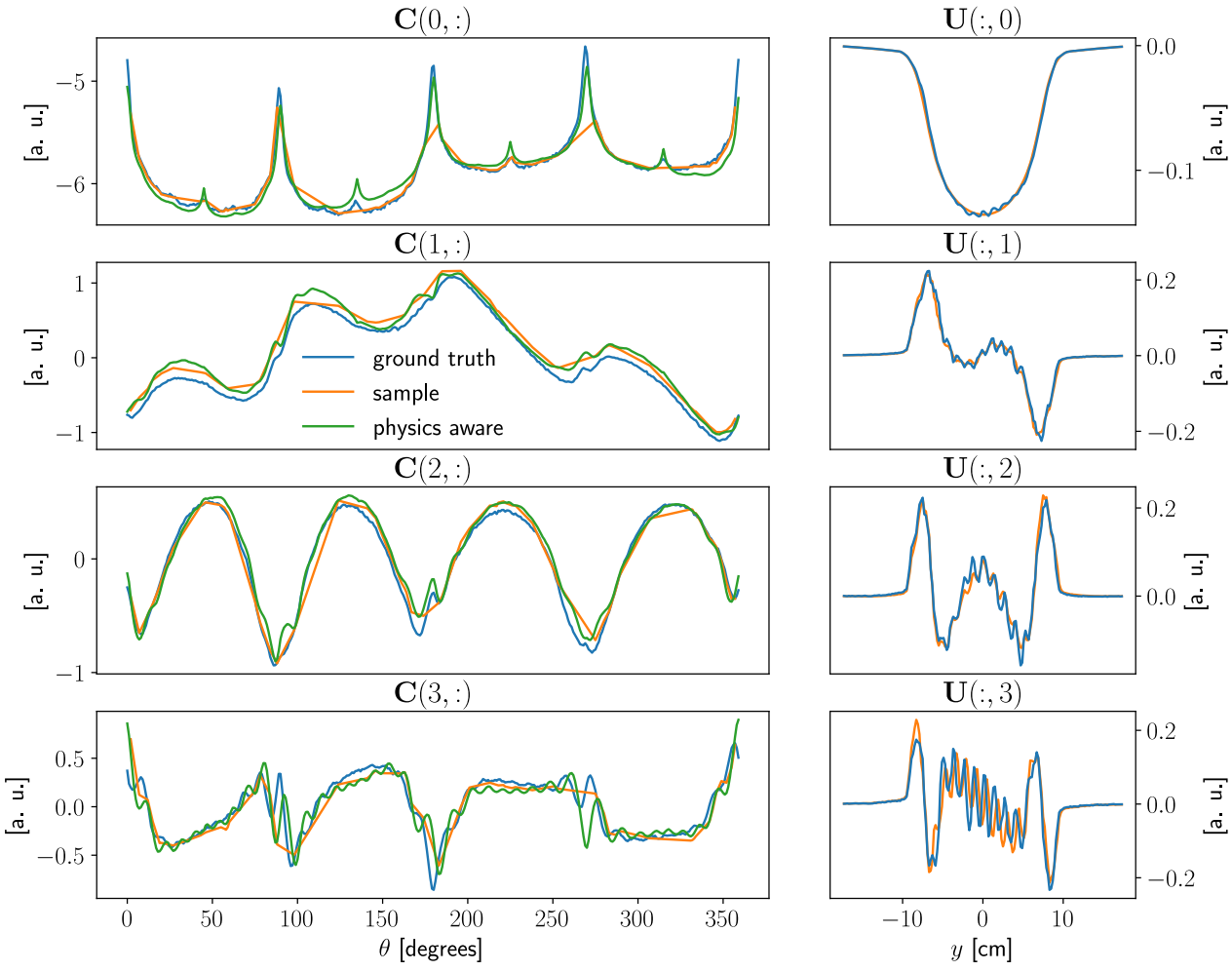


图8：压水堆正弦图前四个系数**C**(i,:)和模态**U**(: i)的曲线，其中包含 $k = N_s = 60$。采样系数中可见一些偏差，而物理感知系数的定义更清晰，尤其是在以高振荡为特征的ˆ区域。通过对**S**应用奇异值分解（SVD）得到的采样模态，与使用整个数据集**S**得到的模态吻合良好。

实时近似前向模型

我们的实时模型建立在 Backholm 等人 [2]的模型之上。模型集合的示意图如图10所示。探测域 $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ 是核燃料组件的轴向横截面，我们

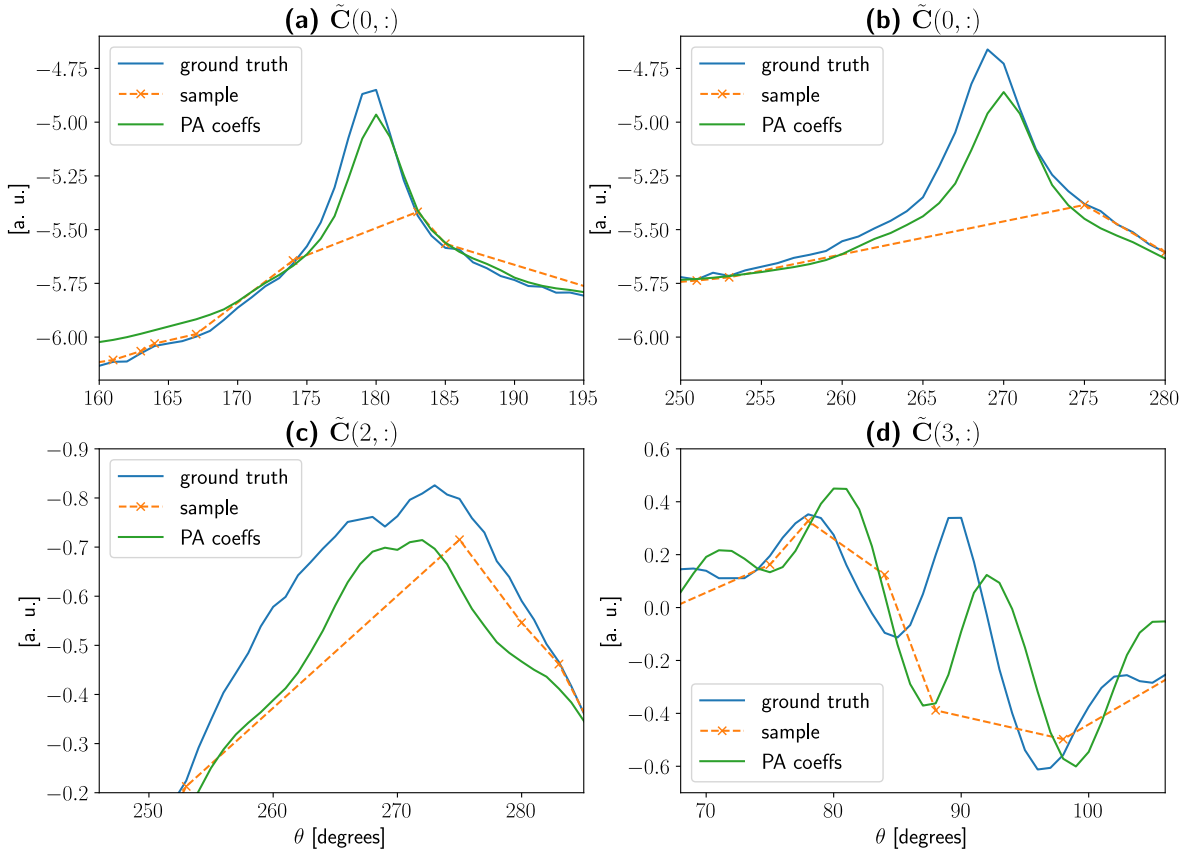


图9：这些图展示了真实系数、采样系数和物理感知系数的局部放大视图。给定 $N_s = k = 60$ 个随机采样的视角，我们发现采样系数未能捕捉足够的数据来反映局部结构。事实上，采样过程中丢失的信息无法恢复，除非我们采用物理感知的方法来重建系数。正是这种“物理感知系数”的概念启发了本文的核心思想。

将其离散为二维网格。在离散化区域的每个像素 p 处，我们定义 $\lambda \in \mathbb{R}^{N_{\text{pix}}}$ 发射值和衰减值 $\mu \in \mathbb{R}^{N_{\text{pix}}}$，$N_{\text{pix}}$ 为像素数量。我们认为 λ 和 μ 的值在每个像素内保持恒定。对于每个探测器 i，我们使用朗伯-比尔（指数）衰减模型 [2]对通量进行建模：

$$F(\lambda,\mu)_i = H(\mu)_{i,p}\,\lambda_p = \left[r_{i,p}\exp\left(-c_{i,p}\,d_{i,p}^T\,\mu\right)\right]\,\lambda_p.$$

通过相对于探测器旋转针孔位置，从而旋转整个组件，获得360个视角。随后，相应地更新发射图和衰减图。接着将二维网格进一步离散化，把每个像素上方和下方的半空间划分为体素。

在此设定下，定义如下量。

- $r_{i,\ p}$ 表示探测器 i 相对于像素 p的响应。给定一个三维点，体素 s, r_s^{3D}的重心与探测器表面之间的立体角除以 4π。接下来$r_{i,\ p}$表示所有位于同一像素处的体素响应的平均值：$r_{i,\ p} = \frac{1}{N_{p,\ \text{体素}}}\sum_{s=1}^{N_{p,\ \text{体素}}} r_s^{3D}$。

- $d_{i,\ p}^T\mu$ 是连接像素 p 与探测器 i的线段上离散衰减值的积分。在我们的实现中，我们显式地求出连接线段与网格的交点。由于衰减是分段常数，使用零阶求积即可精确计算该积分。

- $c_{i,\ p}$ 是一个衰减校正因子，计算如下：$c_{i,\ p} = \frac{1}{r_{i,\ p}}\sum_{s=1}^{N_{p,\ \text{体素}}} r_s^{3D}\cos(\alpha_s)$。$\alpha_s$ 是体素重心、探测器与二维平面之间的角度。它计入响应矩阵$r_{i,\ p}$ 和校正项$c_{i,\ p}$ 均为纯几何量，不受燃料组件旋转的影响。$d_{i,\ p}^T\mu$ 则取决于衰减图，而衰减图取决于衰减分布；衰减分布会随组件旋转而变化，因此必须针对每个旋转角分别构建衰减图。

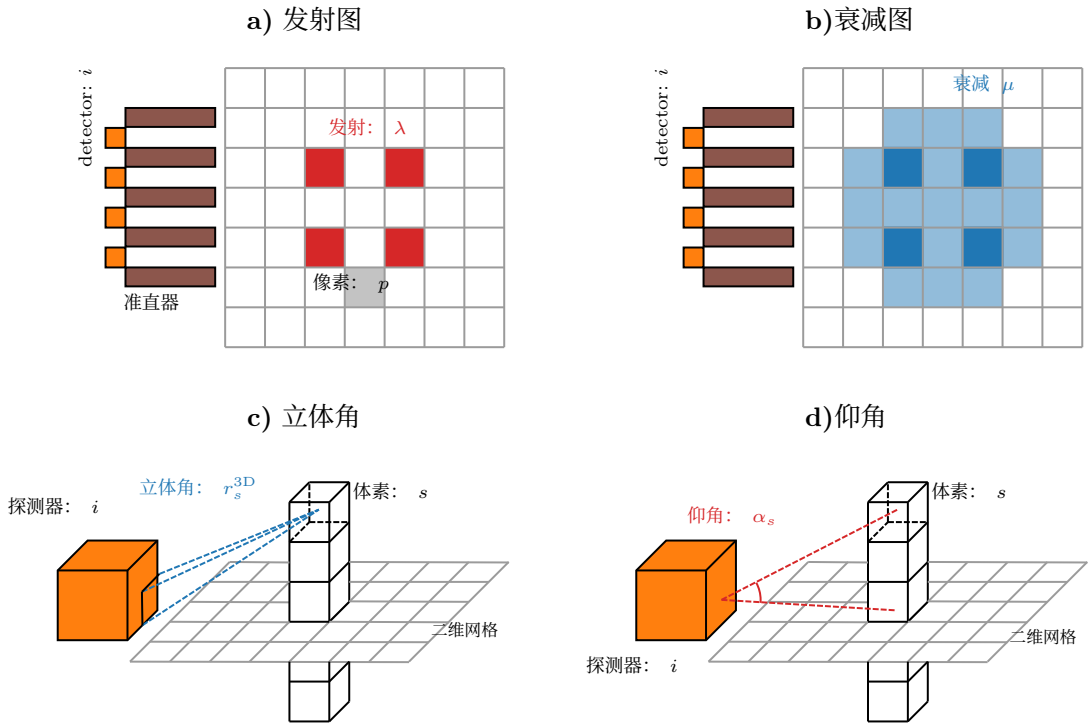


图10：实时模型实现中主要参与要素的示意图。

我们测试了三种不同的网格尺寸。在三种情况下， $\Delta z = 10$ mm均保持不变，其他尺寸分别为 $\Delta x = \Delta y =$ (2.5 mm 1.0 mm 0.5 mm)。网格尺寸不会影响结果的准确性，因此可以选择最粗的网格尺寸，以尽量降低计算成本。

发射 λ 衰减 μ 在 [2] 中定义。发射以任意单位表示，水的值为 0，乏燃料的值为 100。乏燃料的衰减为 0.1356 mm^{-1} ，水的衰减为 0.0085 mm^{-1} 。Virta等人在[25] 中对实验条件下的此类参数进行了全面探讨。实时近似前向模型的一个近似之处在于，它不对伽马射线的向下散射进行建模。

根据此射线追踪方案，计算完整正弦图的计算成本是在台式计算机上花费几分钟，而组装所有矩阵属于“极易并行化”的任务 [8], ，既可以按“每个探测器”并行化，也可以按“每个角度”并行化。

参考文献

[1] 国际原子能机构 t同态 hic chall挑战。https://id$_{eas.un}$ it$_{e.un.org}$ /iaea-t同态 hy/Page/H ome 2019 [Online; accessed 13-December-2022].[2] R. Backholm、T. A. Bubba、S. Siltanen、C. Bélanger-Champagne、T. Helin和P. Dendooven。乏核燃料被动伽马发射断层成像中发射与衰减的同步重建。*InverseProblems and Imaging*，14(2):317–337，2020年。[3] C. Belanger-Champagne、P. Peura、P. Eerola、T. Honkamaa、T. White、M. Mayorov和P. Dendooven。伽马射线能量对乏核燃料被动伽马发射断层成像图像质量的影响。*IEEETransactions on Nuclear Science*，66(1):487–496，2019年。[4] S. L. Brunton和J. N. Kutz。数据驱动科学与工程：机器学习、动力系统与控制。剑桥大学出版社，美国，第1版，2019年。[5] D. Chernikova、K. Axell、S. Gavrilov、B. Cederwall和A. Favalli。一种对传统图像重建技术的补充方法及其在乏核燃料组件中的应用。载于第*59*届核材料管理学会年会（*INMM 2018*）。核材料管理学会，2018年07月。[6] N. Demo、M. Tezzele和G. Rozza。EZyRB：简易降阶基方法。*The Journal of Open Source Software*，3(24):661，2018年。[7] N. Demo、M. Tezzele和G. Rozza。通过主动子空间重建POD模态系数的非侵入式方法。*Comptes Rendus Mécanique*，347(11):873–881，2019年11月。[8] Y. Deng。应用并行计算。World Scientific Publishing Co., Inc.，美国，2012年。[9] M. Fang、Y. Altmann、D. Della Latta、M. Salvatori和A. Di Fulvio。用于被动伽马发射断层成像的定量成像与自动燃料棒识别。*Scientific Reports*，11(1):2442，2021年1月。[10] A. Favalli、D. Vo、B. Grogan、P. Jansson、H. Liljenfeldt、V. Mozin、P. Schwalbach、A. Sjöland、S. Tobin、H. Trellue和S. Vaccaro。通过分析在瑞典CLAB中间燃料储存设施测得的被动伽马能谱，确定压水堆乏燃料组件的初始富集度、燃耗和冷却时间。*NuclearInstruments and Methods in Physics ResearchSection A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and AssociatedEquipment*，820:102–111，2016年。[11] J. S. Hesthaven、G. Rozza和B. Stamm。参数化偏微分方程的认证降阶基方法。Springer Briefs in Mathematics。Springer，瑞士，第1版，2015年。[12] C.-K. Huang、D. P. Broughton、S. Palaniyappan、A. Junghans、M. Iliev、S. H. Batha、R. E. Reinovsky和A. Favalli。激光驱动无碰撞激波加速氘核产生的高产额、高角注量中子。*Applied Physics Letters*，120(2):024102，2022年。[13] A. C. Kak和M. Slaney。计算机断层成像原理。工业与应用数学学会，费城，2001年。[14] J. A. Kulesza、T. R. Adams、J. C. Armstrong、S. R. Bolding、F. B. Brown、J. S. Bull、T. P. Burke、A. R. Clark、R. A. Forster, III、J. F. Giron、A. S. Grieve、C. J. Josey、R. L. Martz、G. W. McKinney、E. J. Pearson、M. E. Rising、C. J. Solomon, Jr.、S. Swaminarayan、T. J. Trahan、S. C. Wilson和A. J. Zukaitis。MCNP® 程序6.3.0版理论与用户手册。技术报告LA-UR-22-30006，修订版1，洛斯阿拉莫斯国家实验室，美国新墨西哥州洛斯阿拉莫斯，2022年9月。[15] A. Lahiri、M. L. Klasky、J. A. Fessler和S. Ravishankar。利用稀缺训练数据进行数据一致性监督学习和对抗学习的稀疏视角锥形束CT重建，2022年。[16] A. Lebrun、J. Beaumont、A. Berlizov、L. Bourva、Y. Dodane、D. Finker、M. Mayorov和A. Sokolov。用于国际原子能机构保障核查的新一代无损分析工具。载于国际保障研讨会论文集。国际原子能机构，2022年。[17] M. Mayorov、T. White、A. Lebrun、J. Brutscher、J. Keubler、A. Birnbaum、V. Ivanov、T. Honkamaa、P. Peura和J. Dahlberg。用于检查乏核燃料的伽马发射断层成像。载于*2017*年*IEEE*核科学研讨会暨医学成像会议（*NSS/MIC*），第1–2页，2017年。[18] E. Miller、M. Vladimir、W. Timothy、C. Luke、D. Nikhil、W. Richard和P. Pauli。乏燃料被动伽马发射断层成像的仪器性能评估。载于*INMM*第*59*届年会论文：燃料组件先进无损分析技术，2018年。[19] G. Ortali、N. Demo和G. Rozza。面向流体动力学工程问题的数据驱动POD框架中的高斯过程方法。*Mathematics in Engineering*，4(3):1–16，2022年。

[20] L. Presotto。面向国际原子能机构PGET探测器的断层重建：竞赛参赛作品。载于*2019*年*IEEE*核科学研讨会暨医学成像会议（*NSS/MIC*），第1–3页，2019年。[21] L. Smith、S. Jacobsson Svärd、V. Mozin、P. Jansson、E. Miller、T. White、N. Deshmukh、H. Trellue、R. Wittman、A. Davour、S. Grape、P. Andersson、S. Vaccaro、S. Holcombe和T. Honkamaa。伽马发射断层成像用于乏燃料验证的可行性研究：JNT 1955第一阶段技术报告。技术报告PNNL-25995，太平洋西北国家实验室，美国，2016年10月。[22] M. Tezzele、N. Demo和G. Rozza。通过本征正交分解进行形状优化，其中插值和动态模态分解由主动子空间增强。载于第八届海洋工程计算方法国际会议，2019年。[23] S. Van der Walt、J. L. Schönberger、J. Nunez-Iglesias、F. Boulogne、J. D. Warner、N. Yager、E. Gouillart和T. Yu。scikit-image：Python中的图像处理。*PeerJ*，2:e453，2014年。[24] R. Venkataraman、M. Villani、S. Croft、P. McClay、R. McElroy、S. Kane、W. Mueller和R. Estep。用于放射性废物无损分析的集成断层伽马扫描系统。*Nuclear InstrumentsandMethodsin PhysicsResearchSectionA:Accelerators, Spectrometers, DetectorsandAssociatedEquipment*，579(1):375–379，2007年。第11届辐射测量与应用研讨会论文集。[25] R. Virta、R. Backholm、T. A. Bubba、T. Helin、M. Moring、S. Siltanen、P. Dendooven和T. Honkamaa。基于乏核燃料组件被动伽马发射断层成像（PGET）的燃料棒分类。*ESARDA*公报，2020(61):10–21，2020年。[26] R. Virta、T. A. Bubba、M. Moring、S. Siltanen、T. Honkamaa和P. Dendooven。改善乏核燃料中央区域的被动伽马发射断层成像图像质量。*Scientific Reports*，12(1):12473，2022年7月。[27] N. T. Vo、R. C. Atwood和M. Drakopoulos。消除X射线显微断层成像中环状伪影的优越技术。《光学快报》，26(22):28396–28412，2018年10月。[28] Z. Wang、A. Bovik、H. Sheikh和E. Simoncelli。图像质量评价：从误差可见性到结构相似性。《*IEEE*图像处理汇刊》，13(4):600–612，2004年。[29] T. White、A. Lebrun、T. Honkamaa、M. Mayorov、P. Peura、J. Dahlberg、J. Keubler、V. Ivanov和A. Turunen。被动伽马发射断层成像（PGET）在乏核燃料验证中的应用。载于第*59*届核材料管理学会年会（*INMM 2018*）。核材料管理学会，2018年07月。[30] R. Wittman、L. Campbell、N. Deshmukh、P. Jansson、E. Miller和V. Mozin。提交给国际原子能机构的基准测试更新。技术报告PNNL-SA-13389，太平洋西北国家实验室，2018年。