arXiv:2603.01981v1 [stat.AP] 2 Mar 2026

亮点

空洞肿胀预测中的不确定性量化：用于反应堆安全裕度的保形预测框架

Minhee Kim，Yong Yang

- 开发了一种机器学习模型，可根据成分和辐照条件预测辐照材料的空洞肿胀行为。
- 保形预测通过针对未见实验数据校准不确定性估计，使模型达到预设的覆盖水平。
- 对数变换提高了模型对异方差实验数据的稳健性。
- 该模型实现了具有竞争力的预测准确度，并提供与目标置信水平一致的经验覆盖率。

空洞肿胀预测中的不确定性量化：用于反应堆安全裕度的保形预测框架

Minhee Kim

佛罗里达大学工业与系统工程系，美国佛罗里达州盖恩斯维尔，邮编 *32603*

Yong Yang

佛罗里达大学材料科学与工程系，美国佛罗里达州盖恩斯维尔，邮编 *32603*

摘要

辐照诱发空洞肿胀是核反应堆结构材料的一种关键退化机制，决定着部件的运行寿命和安全性。尽管近期的机器学习（ML）方法提高了肿胀率预测的准确性，但它们往往未能考虑辐射损伤固有的随机性，只提供点估计，缺乏严谨的不确定性量化。缺少概率层面的背景限制了这些方法在材料鉴定、反应堆许可和风险评估中的应用。本研究提出了一种将集成机器学习模型与保形预测（CP）相结合的框架，以生成经过统计校准的预测区间。与通常依赖严格分布假设的标准误差估计或贝叶斯方法不同，该方法专门处理肿胀数据的物理异方差性，即方差从形核主导的孕育阶段转变至生长主导的稳态阶段。我们证明，即使在稀疏数据情形下，对数变换保形预测推断也能提供有效的经验覆盖率，并与目标置信水平相符。该框架为以概率风险评估（PRA）工具取代过度保守的上限曲线，提供了可行途径，适用于高剂量反应堆堆芯内部构件。

关键词：空洞肿胀、机器学习、不确定性量化，

1. 引言

辐照诱发空洞肿胀是高辐射环境下结构材料的一种关键微观结构退化现象[1, 2, 3]。空洞的逐步累积会导致尺寸不稳定，并显著降低材料的力学性能，包括引发脆化和断裂韧性下降 [4, 5, 6, 7]。因此，准确预测肿胀速率对于确保堆芯内部构件的结构完整性以及延长核能系统的运行许可至关重要 [8]。

传统上，空洞肿胀的预测依赖于结合经验关联与基于物理的模拟（例如平均场速率理论、相场建模）；经验关联源自辐照实验。实验研究提供了最可靠的证据，但受限于高昂的成本和漫长的周期 [9]。因此，现有的大多数经验研究都着重于表征肿胀行为随单一变量变化的规律。研究人员广泛探讨了各项独立因素，包括位移速率 [10], 辐照温度[11], 冷加工程度 [12], 以及辐射类型 [13]。然而，探究这些变量如何同时影响肿胀现象的研究仍然有限，因为开展完全因子化的经验实验往往需要耗费大量人力。

相反，基于物理的模型能够提供机理层面的洞见，但在衔接不同计算尺度以及同时考虑多个协变量复杂的耦合影响方面面临重大挑战。例如，Li等人 [14] 利用相场模型，描述热力学和动力学特征如何影响辐照材料中的空洞形成与扩展。然而，这些方法往往难以考虑多变量环境因素的综合影响。此外，要准确模拟辐射损伤，并有效衔接原子尺度起始与宏观肿胀，仍然是一项固有的挑战[15, 16]。

近年来，机器学习（ML）已成为一种强大的替代方案，无需明确的函数形式，即可将高维输入特征映射到材料响应 [17]。在核

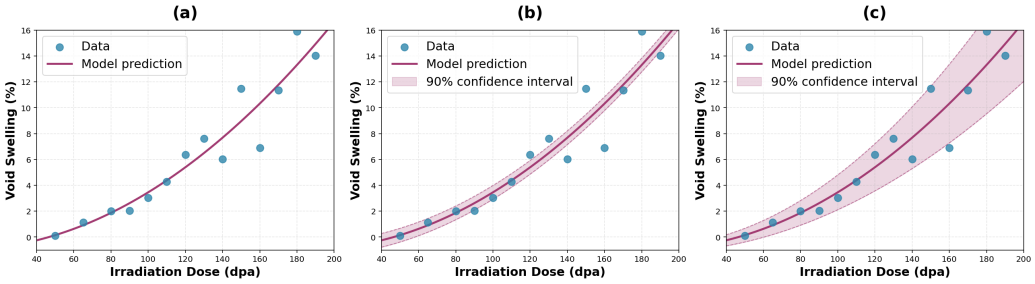

图 1：预测性机器学习模型中的不确定性量化示意图：(a) 未进行不确定性量化的模型，(b) 不确定性量化校准不佳的模型，以及 (c) 不确定性量化校准良好的模型。

材料学界，机器学习已应用于广泛的问题，包括相稳定性 [18], 力学性能 [19], 腐蚀行为[20, 21], 和辐照响应 [22, 23]。尤其是在空洞肿胀方面，近期进展主要集中于三个方向：通过自动化机器学习和混合优化提高预测准确度 [24, 25], 借助自然语言处理和大语言模型整合来扩充数据库 [26], 以及利用变分自编码器等生成模型增强可解释性 [27]。值得注意的成果包括对孕育剂量 [9] 和稳态肿胀率 [28], 的预测，以及一些研究显著降低了特定合金的预测误差 [29]。

尽管取得了这些进展，大多数用于空洞肿胀的机器学习应用仍采用确定性方法，只提供点预测，却不提供置信度（不确定性）的度量（图 1(a)）。这限制了它们在安全关键型应用中的用途，因为这类应用中的预测会影响监管决策。虽然贝叶斯方法[30, 31] 已被用于探索基于机器学习的空洞肿胀率预测中的不确定性量化，但这些方法通常依赖特定的分布假设，而这些假设可能无法准确反映真实的肿胀数据。假设不成立时，可能会导致严重的校准失准，即名义置信区间无法覆盖相当比例的观测值（图 1(b)）。

为克服上述局限性，本研究提出了一种利用保形预测（CP）的分布无关不确定性量化（UQ）框架。与可能难以应对辐照肿胀数据复杂异方差性的标准回归或贝叶斯方法不同，CP 无需假设任何特定的误差分布或模型结构，即可生成具有严格数学覆盖保证（例如 95%）的预测区间 [32, 33]。该方法有效地将启发式、未经校准的估计（图 1(b)）转化为

有效且经统计校准的设计区间（图1(c)）。尽管 CP 已成功应用于预后 [34], 医学诊断 [35], 和机器人学 [36], 等其他高风险领域，但其在空洞肿胀领域的应用尚未得到探索。本研究将对数变换共形预测推断层与集成学习相结合，以证明即使在实验数据稀疏的情况下，空洞肿胀预测也能维持严格的安全裕度。

2. 方法

为确保评估严谨且不确定性校准不偏不倚，数据集被随机划分为三个互不重叠的子集：训练集（80%）、校准集（10%）和测试集（10%）。训练集用于优化随机森林回归器（第 2.1 节），而校准集则专门用于计算保形预测（CP）的非一致性分数（第 2.2 节）。最终性能通过保留的测试集进行评估，以衡量模型对未见过的辐照条件的泛化能力（第 3 节）。

2.1. 预测性机器学习模型

我们将空洞肿胀预测表述为一个监督回归问题。令 x 表示输入特征向量（例如，辐照剂量、辐照温度、合金成分），令 y 表示相应测得的空洞肿胀率。目标是直接从数据中学习映射 $y = f(x)$，而不施加明确的函数形式。

为刻画辐照诱发空洞肿胀所固有的复杂非线性依赖关系，我们采用随机森林回归器作为基础预测算法 [37]。随机森林是一种集成方法，在训练过程中构建N 棵独立的决策树。每棵决策树均在训练数据的“自助抽样”子集（有放回抽样）上拟合，并且在树内每个节点分裂时，仅考虑特征的一个随机子集。自助聚合（装袋法）与特征随机性的这一组合显著降低了各决策树之间的相关性，使最终模型比单一决策树对离群值和过拟合更为稳健。本研究选用随机森林模型，是因为其已被证明对含噪实验数据集具有稳健性，并已成功应用于先前关于空洞肿胀的机器学习研究 [9, 28]。

对于给定的输入向量 x，最终集成预测$\hat{y}(x)$通过对各决策树 t的局部预测$\hat{y}_t(x)$取平均来计算：

$$\hat{y}(x) = \frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}\hat{y}_t(x). \tag{1}$$

除了提供点估计外，随机森林还提供一种启发式的预测不确定性度量。由于每棵决策树都代表基于某个子数据集训练得到的模型的不同实现，各决策树之间的预测分歧可作为模型置信度的替代指标。这种启发式不确定性通过各决策树预测值的标准差计算：

$$\hat{\sigma}(x) = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}(\hat{y}_t(x) - \hat{y}(x))^2}. \tag{2}$$

虽然该标准差反映了模型的内部变异性，但它并不提供正式的统计保证。具体而言，由 $\hat{y} \pm k\hat{\sigma}$ 定义的区间并不保证以特定概率包含真实值 y。这一局限性在空洞肿胀应用中尤为关键，因为数据稀疏性以及高剂量下变异性的增加，可能导致低估预测误差。

标准回归模型假设误差项具有同方差性，即其方差在整个输入空间内保持恒定。空洞肿胀建模的一项根本挑战在于其固有的异方差性。在低剂量孕育阶段，肿胀受空洞随机形核控制，并受到局部溶质俘获和析出物界面的显著影响，因此数据散布相对有限。然而，随着材料进入稳态肿胀阶段，方差会显著增加。肿胀速率较高时方差的这种“爆发”，是由多种复杂相互作用驱动的，例如汇强度增加、位错结构饱和、偏析诱导的偏差改变以及空洞聚并。核材料的稳健预测模型必须考虑这种剂量依赖的不确定性扩展。

当前的确定性机器学习模型未能捕捉这种物理现实，可能会掩盖失控肿胀事件的风险。为此，我们对目标变量进行对数变换：

$$y_{log} = \ln(y + \text{offset}), \tag{3}$$

其中，添加偏移量 1.0，以确保所有目标值均为正。随机森林模型经过训练以预测 y_{log}，之后所有预测值均通过逆变换映射回原始膨胀尺度。该变换确保模型在低剂量下仍对微小的肿胀增量保持敏感，同时稳定高肿胀离群值的方差。

2.2. 对数变换保形推断

包括随机森林在内的标准预测性机器学习模型存在一项重要局限：它们无法提供具有统计覆盖保证的不确定性估计。换言之，根据模型内部方差得到的 90% 置信区间，并不能在数学上保证包含 90% 的真实观测值。为弥补这一不足，我们采用保形预测（CP）这一通用框架，利用留出数据集上观测到的预测误差来校准不确定性，从而在广泛条件下为新的观测值提供正式的覆盖保证。

对于每个校准样本（x， y_{log}），我们计算一个“不符合度”分数s，其定义为对数空间中的绝对预测误差：

$$s = |y_{log} - \hat{y}_{log}(x)| \,. \tag{4}$$

这些分数反映了机器学习模型对训练阶段未使用的数据所作预测的偏差。给定目标置信水平 $1-\alpha$（例如 90%、95%），我们将校准阈值 q_α 设为这些校准分数 $\{s\}$的 $(1-\alpha)$ 分位数。该阈值实际上决定了预测区间的宽度。

对于新的输入 $x^\star$，对数空间中的保形预测区间构造如下：

$$C_{log}(x^\star) = [\hat{y}_{log}(x^\star) - q_\alpha,\ \hat{y}_{log}(x^\star) + q_\alpha]. \tag{5}$$

关键在于，按照构造方式，该区间保证以至少 $1-\alpha$ 的概率包含真实的变换后响应 $y^\star_{log}$，唯一前提是校准数据（$\{(x,\ y)\}$）与测试数据（$\{(x^\star,\ y^\star)\}$）满足可交换性：

$$P(y_{log} \in C_{log}(x^\star)) \geq 1 - \alpha. \tag{6}$$

正式而言，可交换性要求校准集和测试数据来自同一底层数据生成过程，从而使得它们的

联合分布在排列下保持不变。该假设比大多数机器学习和统计模型中广泛使用的标准独立同分布（i.i.d.）假设更弱，也更灵活。

最后，使用对数逆变换将保形区间映射回原始物理肿胀尺度：

$$C(x^\star) = \left[\exp\left(\hat{y}_{log}(x^\star) - q_\alpha\right) - \text{offset},\ \exp\left(\hat{y}_{log}(x^\star) + q_\alpha\right) - \text{offset}\right]. \quad (7)$$

由此得到空洞肿胀率的自适应预测区间：肿胀值较高时区间自然变宽，而接近零肿胀时区间则较窄，即 $P(y \in C(x^\star)) \geq 1 - \alpha$。

保形预测（CP）的关键优势在于，式（6）中所得预测区间的覆盖保证可直接从数据中获得，无需假设预测误差具有任何特定的函数形式或统计分布。这使得所提出的方法能够稳健应对实验空洞肿胀测量中常见的非高斯噪声和异方差性。

3. 结果

3.1. 数据集与预处理

本研究使用了一个全面的空洞肿胀测量数据集，该数据集汇编自已发表的实验文献，可从 Mendeley Data Repository 获取（DOI: 10.17632/g4bnkxgc26）。汇编后的数据集涵盖了广泛的辐照温度、辐照剂量、辐照类型和材料成分。表1总结了数据集的特征。

预测模型采用18维输入特征向量 x，由两类变量组成：辐照变量和合金成分变量。辐照变量包括辐照剂量（每原子位移数）、辐照温度（C○）、辐照气体环境（原子百万分率）和辐照类型。合金成分由14种关键元素的重量百分比表示：硼、碳、氮、铝、硅、磷、硫、钛、铬、锰、铁、镍、铜和钼。这些特征共同刻画了辐照条件与合金成分对肿胀行为的协同效应。在所有特征中，仅辐照类型被视为分类变量，包含五个不同类别（镍$^{6+}$ 离子、铁$^{2+}$ 离子、中子、质子、电子）。

类别	Name	Unit
辐照条件（x）	辐照剂量	dpa
	辐照温度	°C
	辐照类型	类别型
	气体浓度	appm
合金成分（x）	硼（B）	wt.%
	碳（C）	wt.%
	氮（N）	wt.%
	铝（Al）	wt.%
	硅（硅）	wt.%
	磷（磷）	wt.%
	硫（硫）	wt.%
	钛（钛）	wt.%
	铬（铬）	wt.%
	锰（锰）	wt.%
	铁（铁）	wt.%
	镍（镍）	wt.%
	铜（铜）	wt.%
	钼（钼）	wt.%
目标变量（y）	空洞肿胀率	%

表1：本研究所用输入变量和目标变量概述。

目标响应变量 y 为实验报告的空洞肿胀率（%）。对数据集的检查表明，部分记录报告了较小的负肿胀值，最小值约为-0.55%。具有负肿胀值的样本被排除在进一步分析之外。排除后，最终数据集包含311个样本。

从特征矩阵中移除了非预测性标识符，例如钢材名称和记录索引。与许多其他机器学习算法不同，基于树的随机森林架构不受单调缩放的影响，因此未对输入特征进行归一化。最后，根据第2节所述的验证策略，将处理后的数据集随机划分为训练集（80%）、校准集（10%）和测试集（10%）。

3.2. 探索性数据分析

在模型训练之前，我们进行了探索性数据分析，以表征空洞肿胀数据集的统计特性。分析

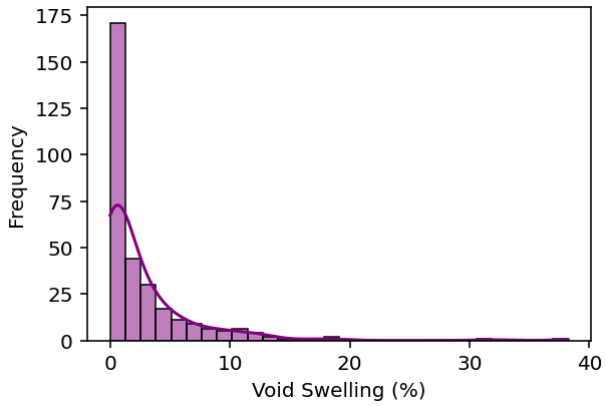

图2：空洞肿胀（%）的分布

重点评估目标变量的分布、连续输入特征的取值范围、分类辐照条件的表示方式，以及变量间的相关性。

图2展示了实验测得的空洞肿胀率分布。数据呈明显的右偏态，绝大多数测量值集中在较低的肿胀值范围内（$< 5\%$），并带有一条延伸至高膨胀区间的长尾。叠加在直方图上的核密度估计（KDE）拟合，以非参数方式呈现了这一潜在分布，并凸显了其显著的不对称性。这种偏态反映了典型的实验现实：与耗资高昂、耗时较长且肿胀率较高的辐照实验相比，短期、低肿胀的观测结果要常见得多。至关重要的是，目标变量极端的右偏态既说明了采用对数变换的理由，也从数学上要求本研究所用的保形预测框架具备分布无关性。

如表2所示，连续输入特征（x）涵盖了广泛的参数空间。辐照条件的取值范围很广，尤其是剂量和温度。同时，记录的合金成分涵盖主要合金元素和少量微量成分，其浓度跨越多个数量级。

除连续输入特征外，该数据集还包含一个分类变量：辐照类型。图3展示了汇总数据集中这些辐照类型类别的分布情况。数据

变量	Min	Mean	Max
辐照剂量（每原子位移数）	0.50	80.96	228.76
辐照温度（°C）	150.0	513.5	1023.4
气体浓度（原子百万分率）	0.00	1.77	10.00
硼（wt.%）	0.000	0.0023	0.010
碳（wt.%）	0.000	0.051	0.110
氮（重量百分比）	0.000	0.0097	0.150
铝（重量百分比）	0.000	0.034	1.120
硅（重量百分比）	0.000	0.462	1.270
磷（重量百分比）	0.000	0.028	0.220
硫（重量百分比）	0.000	0.0021	0.030
钛（重量百分比）	0.000	0.163	1.110
铬（重量百分比）	14.88	16.30	24.70
锰（重量百分比）	0.000	1.41	1.94
铁（重量百分比）	34.28	62.68	72.40
镍（重量百分比）	8.40	16.92	43.00
铜（重量百分比）	0.000	0.0044	0.540
钼（重量百分比）	0.000	1.90	3.08

表2：连续输入变量的汇总统计。

分布明显不均衡。中子辐照是实验数据的主要来源（$n = 217$），其次是质子辐照（n =55）。相比之下，重离子（Fe^{2+}、Ni^{6+}）和电子辐照在数据集中所占比例要小得多。

为评估特征空间内的线性相互依赖关系，我们进行了皮尔逊相关分析（图4）。结果显示，空洞肿胀与辐照剂量之间存在显著正相关，这符合物理预期。然而，肿胀与其他任何单一输入变量之间均未观察到强线性相关性。缺乏简单的两两线性关系表明，肿胀行为受化学成分与辐照条件之间复杂的多变量协同作用支配，而非由各因素独立决定，这进一步验证了采用非线性回归框架的合理性。

3.3. 预测准确度

首先使用基线随机森林模型评估所提出的机器学习框架的预测准确度。在独立测试集上进行评估时，

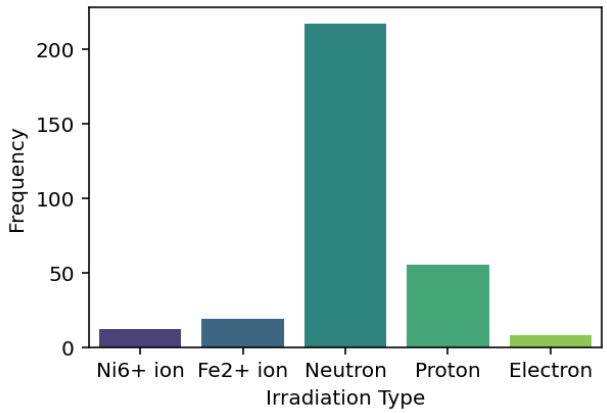

图3：辐照类型分布

基线模型的决定系数（R^2）为 0.727，平均绝对误差（MAE）为 1.82%。虽然 R^2 高于 0.7 表明模型捕获了相当大一部分方差，但仍存在的预测误差促使我们进一步考察模型性能。

为了解预测误差的来源，我们分析了预测值与实测肿胀值差异较大的单个测试样本。等值图（图5）显示，尽管模型在数据集占主导的低肿胀率范围内表现良好，但由于数据稀疏性，在较高肿胀率（>15%）下，预测误差显著增大。两个值得注意的离群值（图5中标出）体现了这一局限。第一个样本是经过铁离子辐照、剂量高达 220.56 每原子位移数的 316不锈钢，模型显著低估了其肿胀值（预测值为 22.6%，实测值为 38.2%）。这种低估可能源于训练数据中对极高剂量下肿胀行为的表征不足。类似地，镍（19.7%）和铬（24.7%）含量较高的 AISI 310 样本也呈现较大的正残差（预测值为 4.54%，实测值为 17.92%）。

绝对误差和残差的分布进一步印证了这种模型不稳定性，并呈现出明显的异方差性（图6）。误差幅度并非恒定不变，而是随辐照剂量和实际肿胀率的增加而显著增大。具体而言，辐照剂量低于 50 每原子位移数时，绝对误差相对较小；但超过这一阈值后，残差迅速分散。这些发现证实，

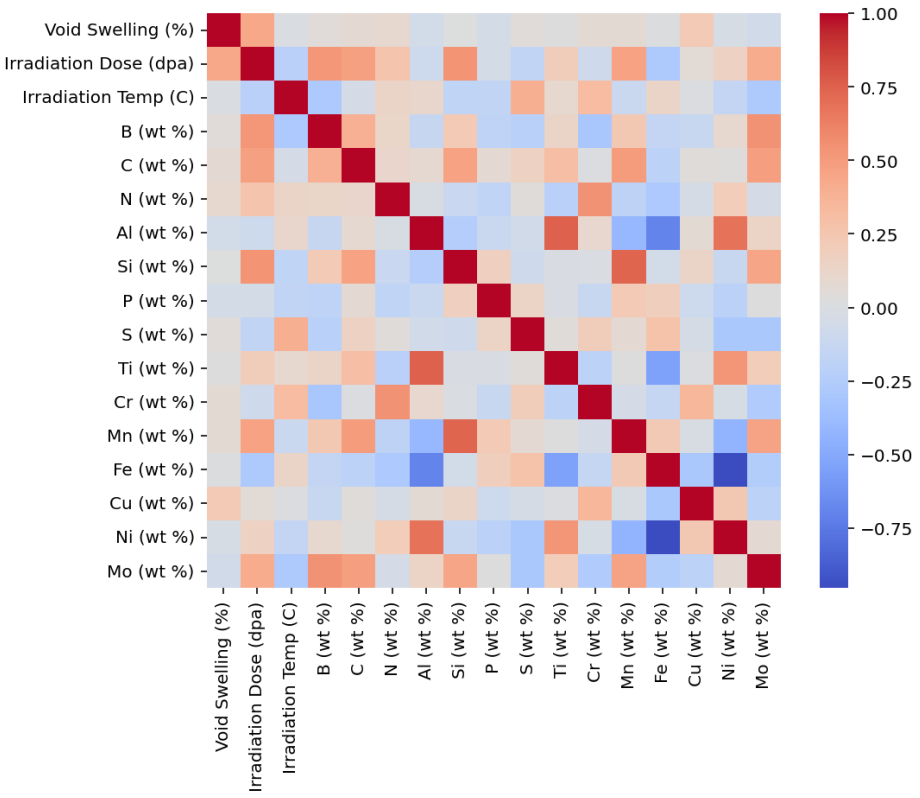

图4：连续变量之间的相关性热力图

尽管标准随机森林模型能够提供合理的全局点估计，但在肿胀率高、辐照剂量高的区间，其可靠性会逐渐下降，而这些区间恰恰是结构完整性面临最大风险、数据覆盖率最有限的区域。此类离群值的存在凸显了下一节将讨论的诊断工具和不确定性感知建模方法的重要性。

3.4. 不确定性量化性能

为了解决确定性点估计的局限性，我们评估了三种不同建模方法所生成的不确定性区间的可靠性和效率：基准标准随机森林（不采用对数变换或保形预测）、对数变换随机森林，以及本文提出的对数变换保形预测框架。我们采用两个主要指标评估不确定性量化的质量：不确定性覆盖率和预测区间宽度。

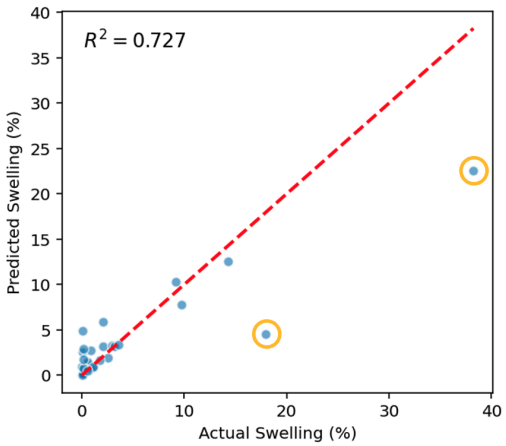

图5：随机森林模型的等值图

覆盖率用于量化真实实验值落在预测不确定性界限内的频率，直接衡量模型的可靠性。对于目标覆盖率为 80% 的预测区间，若经验覆盖率显著低于 80%，则表明模型过度自信，可能不够安全。反之，若覆盖率大幅超过目标水平，则说明界限过于保守。

区间宽度定义为上下预测限之差，用于衡量不确定性估计的精度与实际效用。虽然获得高覆盖率在数学上是必要的，但预测出不切实际的宽区间会使模型失去实用价值。在空洞肿胀的背景下，紧致的不确定性界限在低肿胀区间尤为关键，以便尽早检测肿胀起始。

模型	覆盖率（%）	平均宽度（%）	宽度（$< 1\%$）
标准随机森林	68.75	2.93	2.38
对数变换随机森林	62.50	2.58	1.52
对数变换共形预测	84.38	6.86	3.46

表3：目标置信水平为 80% 时，不同模型的不确定性量化性能比较。

表3和图7总结了目标置信水平为 80% 时三种模型的不确定性量化性能。两种启发式模型（标准随机森林和对数变换随机森林）均未达到覆盖率目标，所捕获的

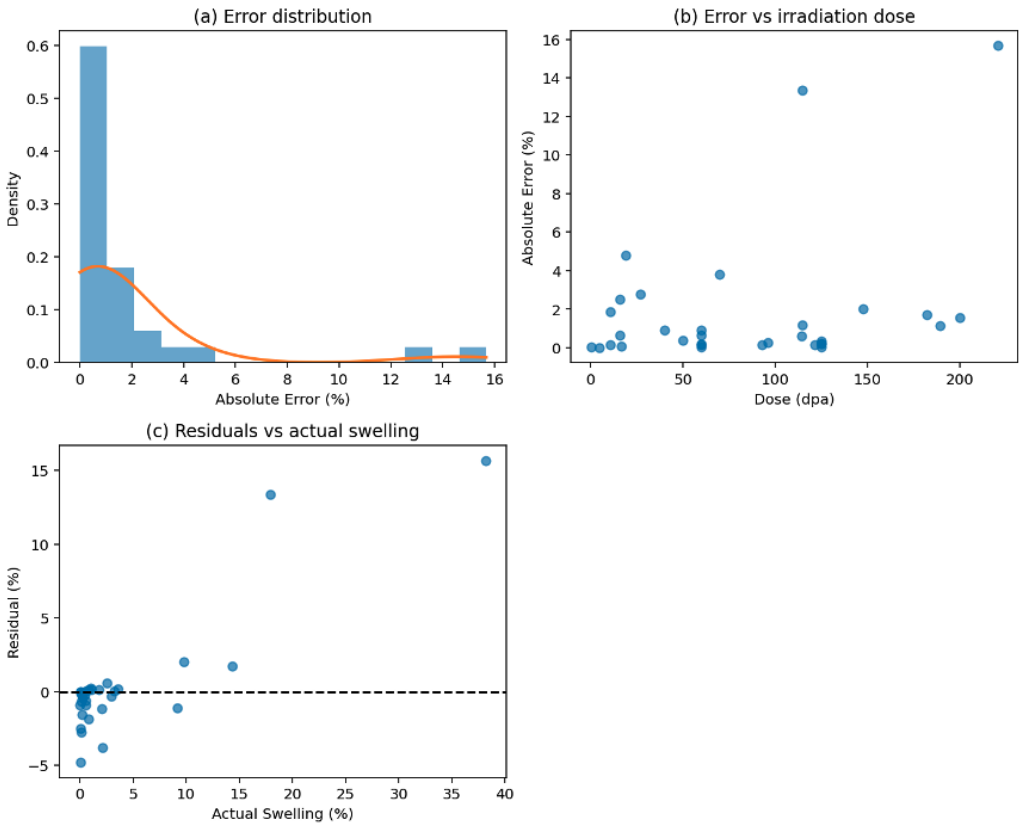

图6：随机森林模型的错误诊断

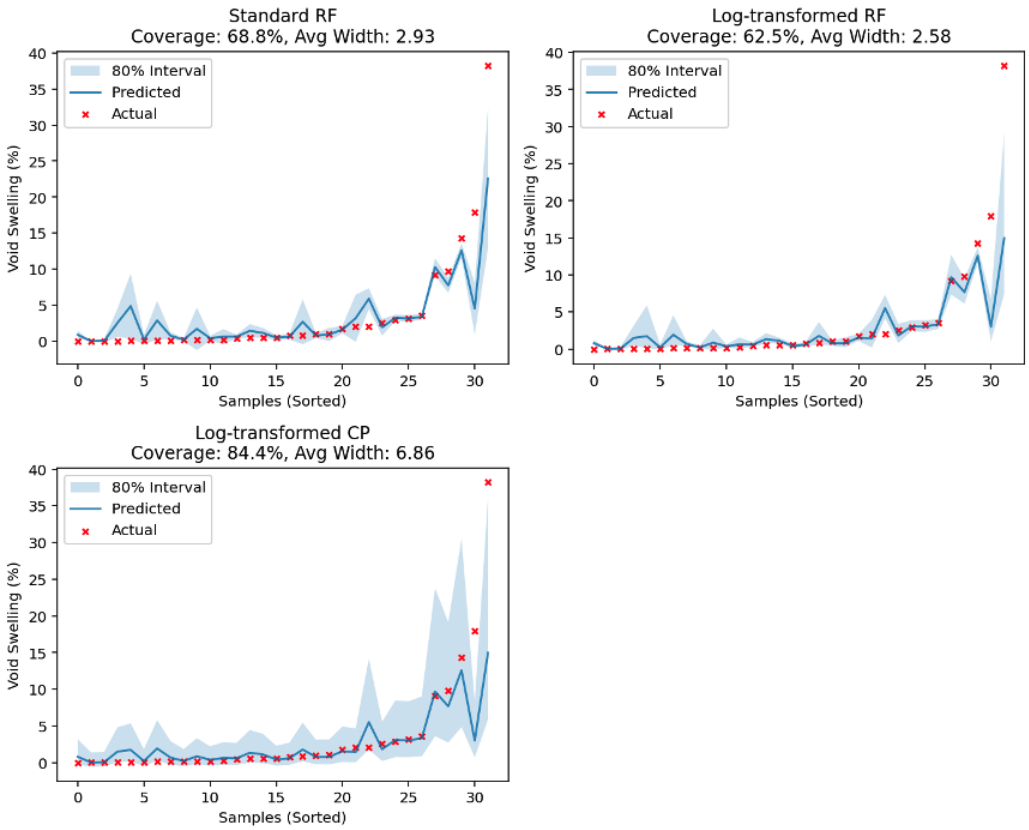

图7：不同模型的空洞肿胀率预测及其对应的80%不确定性区间。结果针对按真实肿胀率值排序的测试样本展示。

测试观测值中分别仅有68.75%和62.50%。这证实，仅依赖树集成的内部方差会导致严重的过度自信，并低估真实的实验误差。

相比之下，所提出的对数变换CP框架成功满足了统计要求，经验覆盖率达到84.38%。通过利用专门的校准集计算非一致性分数，共形预测模型成功校准了底层机器学习基线模型，从而确保对未见数据给出的区间具有统计有效性。

这种可靠性的提升自然需要以区间宽度为代价。对数 CP 模型的平均区间宽度为 6.86%，明显比启发式模型给出的名义上较窄但不可靠的区间宽度（2.93% 和 2.58%）更为保守。不过，

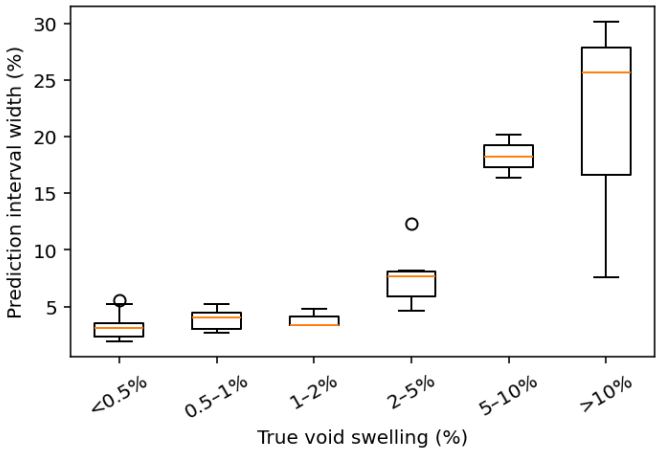

图 8：按真实空洞肿胀水平分组的所提出模型预测区间宽度箱线图。

Log-CP 框架提供的是自适应区间。在孕育期（肿胀 $< 1\%$），对数 CP 模型的平均区间宽度更窄，为 3.46%。在高剂量、高不确定性时期，它会适当扩大区间，以维持覆盖保证；对于数据更精确的低膨胀观测值，则会显著缩窄区间。如图 8 所示，预测区间宽度的分布会随真实空洞肿胀率而变化，从而有效捕捉空洞肿胀数据的物理异方差性。

4. 讨论

尽管标准机器学习模型对辐照诱导空洞肿胀率具有合理的预测准确度，但它们始终表现出过度自信。直接从基线随机森林模型得出的启发式不确定性区间过窄，未能达到 80% 的目标经验覆盖率。对于安全关键的反应堆堆芯内部构件，这种未经校准且过度自信的区间令人高度担忧，因为它们可能导致不够保守的监管评估和工程决策。

探索性数据分析证实，空洞肿胀数据具有强烈的异方差性。在较高肿胀速率（$> 20\%$）和升高的辐照剂量（> 70 每原子位移数）区间，模型残差显著增大，而实验数据恰恰在这些区间变得稀疏。启发式或固定宽度的不确-

定性估计源自标准机器学习模型，无法捕捉这种剂量依赖行为，并在高肿胀率阶段系统性地低估不确定性。

为克服这些局限，我们采用保形预测框架，直接根据观测到的预测误差对不确定性进行数学校准。通过将保形预测与肿胀率的对数变换相结合，所提出的方法成功实现了与预设置信水平一致的经验覆盖率，同时保持了具有实际应用价值的区间宽度。该框架有效地将启发式不确定性估计转化为经过严格校准的区间，从而保证对未见数据达到指定的覆盖水平。

与传统的不确定性量化方法相比，保形预测的一项主要优势在于其与分布无关，这意味着无论实验数据的复杂性、噪声或非线性程度如何，覆盖保证都仍然有效，因此尤其适用于实验材料数据集。此外，保形预测作为后处理步骤，无需改变底层预测方法，即可应用于现有的回归机器学习模型。

与此前应用于空洞肿胀数据的贝叶斯分层方法相比，保形预测框架具有若干实际优势。具体而言，它无需指定先验分布，也不必对底层噪声结构作出严格假设。此外，该方法计算效率高，可作为后处理校准层普遍应用于各种机器学习回归模型。最终，这种方法能够生成具有数学覆盖保证的严格不确定性区间。

5. 结论

本研究探讨了一个关键挑战：如何量化数据驱动的机器学习（ML）模型在预测辐照诱导空洞肿胀时的不确定性。尽管机器学习已展现出较高的预测准确度，但核反应堆许可涉及安全关键问题，因此必须提供严格的可靠性保证，而不能仅依赖简单的点估计。通过将保形预测（CP）框架与集成树学习相结合，本研究建立了一种稳健的方法，用于生成经统计校准的设计区间。

本研究的主要发现与贡献总结如下：

1.**随机性的有效量化**：与假设同方差误差的标准回归模型不同，对数变换CP框架成功捕捉了空洞肿胀的物理异方差性。它正确刻画了从低方差孕育阶段到高方差稳态增长阶段的转变，并提供有效的覆盖保证，该保证对历史辐照数据库稀疏且含噪的特性具有稳健性。

2. **无分布假设的可靠性**：与近期的贝叶斯方法相比，这一框架的一项显著优势在于不依赖分布假设。该框架无需假设底层肿胀数据服从特定分布（如高斯分布），即可生成有效的预测区间，因此尤其适用于模拟突发肿胀复杂的非线性行为，而正态性假设往往不适用于这种情况。

3. **向概率化设计转变**：在实际应用中，这一框架有助于从确定性、过度保守的上限设计曲线转向概率风险评估（PRA）。通过提供透明的“可信度”指标，该工具使反应堆工程师和监管机构能够设定具体的风险容忍度（例如，超过肿胀限值的概率为 5%），从而有望延长堆芯内部构件的合格使用寿命，并减少部件更换计划中不必要的保守性。

未来的工作应着重于明确适用范围、评估其在不同材料类别间的可迁移性，并探索主动学习，以针对辐照参数空间中不确定性较高的区域。

参考文献

[1] F. Garner，《液态金属反应堆中包壳和结构钢的辐照性能》，材料科学与技术（2006）。

[2] L. K. Mansur，辐照条件下金属和合金的空洞肿胀：理论评估，《核技术》40 (1) (1978) 5–34。[3] G. Lucas，辐照奥氏体不锈钢力学性能变化的演变，《核材料学报》206 (2-3) (1993) 287–305。

[4] S. Taller, G. VanCoevering, B. D. Wirth, G. S. Was，利用离子辐照预测先进核反应堆结构材料的退化，《科学报告》11 (1) (2021) 2949。[5] E. A. Little, D. Stow，铁和铁素体钢中的空洞肿胀：II. 快堆辐照材料的实验调查，《核材料学报》87 (1) (1979) 25–39。[6] V. Neustroev, F. Garner，中子辐照奥氏体钢严重脆化的原因：高空洞肿胀，《核材料学报》386 (2009) 157–160。[7]X. Wang, Q. Yan, G. S. Was, L. Wang，高剂量离子辐照下铁素体-马氏体钢的空洞肿胀：探索对抗肿胀性能的可能贡献，《材料学报》112 (2016) 9–14。[8] C. Sun, F. A. Garner, L. Shao, X. Zhang, S. Maloy，自离子辐照在500 c下诱导的两种304L不锈钢结构变体中，注入间隙原子对空洞肿胀的影响，《核仪器与方法物理研究B辑：束流与材料和原子的相互作用》409 (2017) 323–327。[9] M. Jin, P. Cao, M. P. Short，利用机器学习预测辐照金属中空洞肿胀的起始，《核材料学报》523 (2019) 189–197。doi:10.1016/j.jnucmat.2019.05.054。URL http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.05.054[10] A. Kalchenko, V. Bryk, N. Lazarev, I. Neklyudov, V. Voyevodin, F. Garner，预测18Cr10NiTi奥氏体钢在宽位移速率范围内的肿胀，《核材料学报》399 (1) (2010) 114–121。[11] T.-n. Yang, C. Lu, G. Velisa, K. Jin, P. Xiu, Y. Zhang, H. Bei, L. Wang，辐照温度对NiCoFeCrMn和NiCoFeCrPd空洞肿胀的影响，《材料学报》158 (2019) 57–61。[12]E. Wakai, N. Hashimoto, J. Robertson, T. Sawai, A. Hishinuma，在谱调制条件下于高通量同位素反应堆中辐照的冷加工奥氏体不锈钢的肿胀，《核材料学报》307 (2002) 352–356。

[13] J. Hudson，固溶处理的 AISI 316 和 321 不锈钢在 46.5 MeV 镍6+ 辐照下的空洞形成，《核材料学报》60（1）（1976）89–106。[14] Y. Li，S. Hu，X. Sun，F. Gao，C. H. Henager Jr，M. Khaleel，辐照条件下材料空洞演化和肿胀的相场建模，《中国科学：物理学 力学 天文学》54（5）（2011）856–865。[15] C. David，B. Panigrahi，S. Balaji，A. Balamurugan，K. Nair，G. Amarendra，C. Sundar，B. Raj，通过离子束模拟研究钛对 D9 钢空洞肿胀行为的影响，《核材料学报》383（1-2）（2008）132–136。[16]L. Tan，R. E. Stoller，K. G. Field，Y. Yang，H. Nam，D. Morgan，B. Wirth，M. Gussev，J. Busby，轻水堆相关条件下 304 型和 316 型不锈钢的微观结构演化，《JOM》68（2）（2016）517–529。[17] M. H. Mobarak，M. A. Mimona，M. A. Islam，N. Hossain，F. T. Zohura，I. Imtiaz，M. I. H. Rimon，机器学习在材料研究中的应用范围——综述，《应用表面科学进展》18（2023）100523。[18] C. Qin，J. Liu，Y. Yu，Z. Xu，J. Du，G. Jiang，L. Zhao，通过机器学习模型预测锕系化合物的热力学稳定性，《国际陶瓷》50（1）（2024）1220–1230。[19]A. Stoll，P. Benner，用于材料表征的机器学习及其在力学性能预测中的应用，《GAMM-Mitteilungen》44（1）（2021）e202100003。[20] M. A.-A. Allah，I. U. Toor，A. Shams，O. K. Siddiqui，机器学习和深度学习技术在核电站腐蚀与裂纹检测中的应用：综述，《阿拉伯科学与工程杂志》50（5）（2025）3017–3045。[21] S. Hakimian，S. Pourrahimi，A.-H. Bouzid，L. A. Hof，机器学习在不同环境下不锈钢腐蚀行为分类及材料选择中的应用，《计算材料科学》228（2023）112352。

[22] S. Zhao，机器学习在理解高熵材料辐照损伤机制中的应用，《核材料学报》559（2022）153462。[23]N. J. Sai，P. Rathore，K. Sridharan，A. Chauhan，基于机器学习预测中子辐照铁素体/马氏体钢的屈服强度，《聚变工程与设计》195（2023）113964。[24]Y. Tang，利用自动化机器学习预测奥氏体不锈钢辐照诱导肿胀的系统框架，《核仪器与方法：物理研究B辑：束流与材料和原子的相互作用》572（2026）165990。doi:10.1016/j.nimb.2025.165990。URL http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2025.165990[25] V.-T. Pham，K.-H. Cha，J.-S. Kim，结合优化算法和重采样方法的混合机器学习，用于预测辐照316型不锈钢的肿胀率，《核材料学报》617（2025）156126。doi:10.1016/j.jnucmat.2025.156126。URL http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2025.156126[26]J. Zhou，W. Wang，X. Jiang，B. Bai，Y. Su，大语言模型与自然语言处理的集成实现不锈钢离子辐照诱导肿胀预测，《核材料学报》619（2026）156241。doi:10.1016/j.jnucmat.2025.156241。URL http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2025.156241[27]C. Liu，H. Su，基于变分自编码器和可解释机器学习预测316L不锈钢辐照后肿胀率，《核材料与能源》42（2025）101879。doi:10.1016/j.nme.2025.101879。URL http://dx.doi.org/10.1016/j.nme.2025.101879[28] C. Yang，Z. Wang，M. Yu，W. Ma，H. Wang，Z. Wei，N. Gao，Z. Yao，通过机器学习方法预测辐照316型不锈钢的肿胀率，《核材料学报》600（2024）155288。doi:10.1016/j.jnucmat.2024.155288。URL http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2024.155288

[29] C. Yang, Z. Wang, M. Yu, W. Ma, H. Wang, Z. Wei, N. Gao, Z. Yao, 通过机器学习方法预测辐照316型不锈钢的肿胀率，《核材料学报》600（2024）155288。[30] Y. K. Huh, M. Kim, K. Olivas, T. Allen, K. Liu, 使用贝叶斯分层分段线性模型进行退化建模：预测辐照材料空洞肿胀的案例研究，《质量技术杂志》56（2024）498–513。doi:10.1080/00224065.2024.2369674。[31] M. Kim, C. Song, K. Liu，通过纳入内在协变量信息，对异质群体进行个体化退化建模与预后学研究，《IEEE自动化科学与工程汇刊》19（3）（2022）2079–2094。doi:10.1109/TASE.2021.3070532。[32] A. N. Angelopoulos, S. Bates, 保形预测与无分布假设的不确定性量化简明入门，arXiv [cs.LG]（2021年7月15日）。网址：http://arxiv.org/abs/2107.07511[33] G. Shafer, V. Vovk，保形预测教程，《机器学习研究杂志：JMLR》9（2008年）371–421。网址：http://arxiv.org/abs/0706.3188[34] Z. Li, M. Reisi Gahrooei, M. Kim，用于分布式舰队预测性维护的可信不确定性量化联邦保形方法，TechRxiv（2026年1月）。doi:10.36227/techrxiv.176902673.30333692/v1。[35] J. Vazquez, J. C. Facelli，临床医学中的保形预测，《医疗保健信息学研究杂志》6（3）（2022）241–252。[36] L. Lindemann, M. Cleaveland, G. Shim, G. J. Pappas，利用保形预测在动态环境中进行安全规划，《IEEE机器人与自动化快报》8（8）（2023）5116–5123。

[37] L. Breiman，随机森林，机器学习 45 (1) (2001年) 5 –32.