arXiv:2303.08872v1 [math.NA] 15 Mar 2023

本征正交分解模态系数插值：用于参数化反应堆动力学的非侵入式降阶模型

Zachary K. Hardy,*, a 和 Jim E. Morelb

[a]洛斯阿拉莫斯国家实验室，*X*-理论设计部，邮政信箱 *1663*，洛斯阿拉莫斯，新墨西哥州 *87545*[b]德克萨斯农工大学，核工程系，*AI*工程大楼，*Spence* 街 *423* 号，邮政信箱 *3133*，大学城，得克萨斯州 *77843-3133*

*电子邮箱：zhardy@lanl.gov

页数：35 表格数：5 图数：20

摘要

本文介绍了一种用于参数化反应堆动力学模拟的非侵入式降阶模型（ROM）。涉及非线性多物理现象时，时变降阶模型往往需要大量数据，且难以实现。纳入参数依赖关系后，这些挑战会更加严峻。本文提出的本征正交分解模态系数插值（POD-MCI）降阶模型可直接基于低维关注量（QoI）构建，且独立于底层模型。这大幅降低了许多现有降阶模型的数据需求，并且无需修改即可用于任意复杂的模型或实验数据。通过多个示例验证了POD-MCI降阶模型；相较于全阶模型（FOMs），该模型在所选参数空间内能够以极具吸引力的计算加速因子，准确表征关注量。

关键词 — 降阶建模、本征正交分解、非侵入式、辐射输运、反应堆动力学、参数化、插值

I. 引言

许多现代降阶模型（ROM）都具有侵入性，需要访问并修改其所要模拟的全阶模型（FOM）的高维算子。这些技术通常采用投影方法，将 FOM 的维度从 N 降至 $r \ll N$，并利用在预先定义的时间或参数空间中执行有限次数 FOM 所获得的全局降阶基。这类模型降阶（MOR）技术自 20 世纪 60 年代末起便在计算流体力学领域得到研究 [1]。20 世纪 80 年代末，随着 Galerkin 正交本征分解（GPOD）的提出 [2, 3, 4], ，这些方法开始在计算物理学的众多领域广泛流行。

过去十年间，降阶建模（MOR）技术已在反应堆物理领域得到广泛应用。研究人员已将基于降阶的方法用于参数化 k特征值问题 [5, 6, 7, 8, 9], 反应堆动力学[10, 11], 中的角度离散优化 [12, 13, 14], ，以及参数化固定源辐射输运应用 [9, 15]。随着爱达荷国家实验室（INL）的多物理场面向对象仿真环境（MOOSE） [16]和 GeN-Foam® [17]等多物理场平台不断发展，复杂的多物理场反应堆模型正变得日益普遍。此类模型的侵入式降阶模型面临若干独特挑战。

其中一项挑战是设计一种方案，将物理场耦合和非线性项投影到降阶系统中。将投影方法应用于非线性项时，其求值仍需执行依赖于全阶问题维度的运算。这可能会大幅削弱降阶模型原本能够带来的计算节省。为了在降阶层面求值这些项，通常会采用离散经验插值方法（DEIM）等技术 [18]。该技术将非线性函数投影到一个低秩子空间上，该子空间近似于非线性函数的映射空间，然后在低维空间中定义插值方案。已有若干成功实现多物理场降阶模型的案例 [6, 8, 10], ，然而，这些实现依赖于具体模型，且需要投入大量工作。

侵入式降阶模型面临的最大挑战或许在于，随着问题规模增大，其数据需求也会随之增加。投影技术要求降阶基元素与全阶模型具有相同的维数。降阶基通常通过对参数空间中、不同时间点或两者兼有的全阶模型快照进行奇异值分解（SVD）来计算。当存在非线性项时，

还必须存储全阶非线性项的快照，并对其进行奇异值分解。对于一个真实的参数化多物理场反应堆瞬态模型，很容易看出，构建降阶模型所需的数据量可能会变得难以管理。

在大多数情况下，降阶模型（ROM）用于确定特定关注量（QoI）的灵敏度，或寻找使特定关注量最大化或最小化的参数配置。对于侵入式方法，降阶模型的输出通常是全阶解的降阶表示。因此，需要根据降阶模型预测的全阶解计算关注量。非侵入式模型降阶技术则提供了一种颇具吸引力的替代方案，因为它们与全阶模型（FOM）完全解耦。借助现有的模拟数据或实验数据，这些技术只需建立全阶模型输入与输出之间的函数关系。与模拟全阶模型不同，这种方法具有直接对关注量进行建模的显著优势。

反应堆物理领域的许多非侵入式降阶模型都侧重于维度较低的量，例如剂量映射 [19], 材料退化 [20], 以及使用低维模型对系统参数进行逆不确定性量化（UQ） [21], 和燃料循环灵敏度分析。动态模态分解（DMD）等方法已应用于高保真反应堆仿真[22, 23, 24, 25, 26], ，但该方法的公式使其难以应用于参数化问题。据作者所知，非侵入式模型降阶技术在高保真参数化反应堆动力学仿真中的应用仍鲜有探索。

本文提出了本征正交分解模态系数插值（POD-MCI）方法。与现代侵入式方法相比，该方法具有良好的可移植性，且所需数据较少。侵入式技术将 POD 模态投影到 FOM 上，构建用于求解 POD 模态系数的 r 方程组；而 POD-MCI 方法则构建一组 r 互不耦合的插值问题。通过多个示例，该方法以极具吸引力的计算加速比，准确地表征了感兴趣量。下一节将详细介绍 POD-MCI 方法，随后介绍 FOM 的细节。之后将展示两个不同测试案例的数值结果。最后，将总结数值示例的结果，并对该方法作出一些总结性评论。

II. POD 模态系数插值方法

假设有一个 FOM，用于对空间坐标 $\boldsymbol{r}$、时间 t 和模型参数 $\boldsymbol{\mu}$ 的任意标量或向量函数 $f = f(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{\mu})$ 进行建模。 f 可以简单到只是一个标量温度，也可以复杂到是一个多物理场向量。现在，假设存在一个多查询应用，需要了解某个感兴趣量 $=\text{QoI}(f(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{\mu}))$ 在某个 d维参数空间 $\boldsymbol{\mu} = [\mu_1, \ldots, \mu_d] \in \mathbb{R}^d$中的行为。POD-MCI 方法旨在模拟感兴趣量 $\text{QoI}(f)$ 在该参数空间中的行为，且不依赖于 FOM。

POD-MCI 方法分为离线阶段和在线阶段。在离线阶段，获取感兴趣参数空间内全阶模型的感兴趣量数据，并构建降阶模型。这一过程计算成本较高，但只需执行一次。在线阶段的计算成本较低，只需查询降阶模型，即可刻画感兴趣量的参数化行为。

设具有 N_c 个解分量的 f 在 N_r 个空间节点 $\vec{\boldsymbol{r}} = [\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_{N_r}]$和 $N_t + 1$ 个时间快照处离散，快照时刻为 $t_n = t_0 + n\Delta t$，其中 $n = 0, \ldots, N_t$，且 Δt 固定。则时刻 t_n 的离散解为 $\vec{u}(t_n) = \vec{u}_n \in \mathbb{R}^{N_c N_r}$，时间相关解为 $\boldsymbol{X} = [\vec{u}_0, \ldots, \vec{u}_{N_t}] \in \mathbb{R}^{N_c N_r \times N_t + 1}$。本节余下部分将通过全阶解 $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\mu})$ 来描述 POD-MCI 方法。需要指出的是，对于任意感兴趣量，降阶模型的构建方式都相同。

为了获得 ROM 中使用的降阶基，必须在感兴趣的空间内对 FOM 进行采样 $\boldsymbol{\mu}$。所需的样本数量在很大程度上取决于感兴趣量在该空间中的行为，以及全局降阶基所需的精度。稍后将对此进行更详细的讨论。在最简单的情况下，可以采用张量积采样。对于维数较高的参数空间，拉丁超立方抽样 [27] 或 Smolyak 稀疏网格 [28] 等技术可能更合适。设有 M 针对模型配置的参数快照$\vec{\boldsymbol{\mu}} = [\boldsymbol{\mu}_1, \ldots, \boldsymbol{\mu}_M]$，其模拟结果为 $\boldsymbol{Y} = [\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\mu}_1) \ldots, \boldsymbol{X}(\boldsymbol{\mu}_M)] \in \mathbb{R}^{N_c N_r \times N_t + 1 \times M}$。需要强调的是，每次模拟的输出都必须具有相同的空间网格和时间快照。为提取全局降阶基，必须将每个模拟结果展平

使得 $\hat{\boldsymbol{X}} = [\vec{u}_0^T, \ldots, \vec{u}_{N_t}^T]^T \in \mathbb{R}^{N_c N_r (N_t+1)}$。由此得到矩阵

$$\hat{\boldsymbol{Y}} = [\hat{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{\mu}_1), \ldots, \hat{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{\mu}_M)] = \begin{bmatrix} \vec{u}_0(\boldsymbol{\mu}_1) & \ldots & \vec{u}_0(\boldsymbol{\mu}_M) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vec{u}_{N_t}(\boldsymbol{\mu}_1) & \ldots & \vec{u}_{N_t}(\boldsymbol{\mu}_M) \end{bmatrix}, \tag{1}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{Y}} \in \mathbb{R}^{N_c N_r (N_t+1) \times M}$。矩阵 $\hat{\boldsymbol{Y}}$ 的每一列称为训练快照，代表一个固定的参数配置 $\boldsymbol{\mu}_i$。因此，矩阵的每一行代表某个特定离散模拟输出的参数化行为。对于 $N_c N_r (N_t + 1) \gg M$，$\hat{}$矩阵 $\boldsymbol{Y}$ 又长又窄。对于实际模拟，全阶解的维数很容易变得难以承受。侵入式方法需要存储这一维度的数据，而使用较低维度的感兴趣量，POD-MCI 方法可以大幅降低矩阵 $\boldsymbol{Y}$ 的维数。

为提取全局降阶基，采用标准 POD 程序。该程序本质上是向低维空间进行坐标变换，以最优方式描述感兴趣量的参数化行为。POD 基 $\boldsymbol{\Phi} = \{\varphi\}_{i=1}^r$ 满足以下最小化问题

$$\min_{\boldsymbol{\Phi}} \|\hat{\boldsymbol{Y}} - \mathcal{P}_{\boldsymbol{\Phi}} \hat{\boldsymbol{Y}}\|_2^2 = \min_{\boldsymbol{\Phi}} \sum_{i=1}^{M} \int \int \|\hat{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{\mu}_i) - \mathcal{P}_{\boldsymbol{\Phi}} \hat{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{\mu}_i)\|_2^2 \, d\boldsymbol{r} dt, \tag{2}$$

其中 $\mathcal{P}_\Phi$ 是向由 $\boldsymbol{\Phi} = \{\varphi_i\}_{i=1}^r$ 和 $r \leq M$ 张成的子空间进行的$\hat{}$ $\hat{}$正交投影，该子空间的秩为 [29]。随后，模拟数据 $\boldsymbol{Y}$表示为 $\boldsymbol{Y}(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{\mu}) = \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r}, t)\vec{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{\mu})$，或

$$\hat{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{\mu}_k) = \sum_{i=1}^{r} a_i(\boldsymbol{\mu}_k)\varphi_i(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r}, t)\boldsymbol{a}(\boldsymbol{\mu}_k), \quad k = 1, \ldots, M, \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{\Phi} \in \mathbb{R}^{N_c N_r (N_t+1) \times r}$ 是 POD 模态，$\vec{\boldsymbol{a}} \in \mathbb{R}^{r \times M}$ 是参数快照的 POD 模态系数或坐标。基底 $\boldsymbol{\Phi}$ 通过奇异值分解获得，使得

$$\hat{\boldsymbol{Y}} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^* \tag{4}$$

其中，$\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{N_c N_r (N_t+1) \times r}$ 是正交归一左奇异向量，$\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}([\sigma_1, \ldots, \sigma_r]) \in \mathbb{R}^{r \times r}$是按从大到小排列的非负奇异值，使得 $\sigma_1 > \sigma_2 > \ldots > \sigma_r$，而$\boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^{M \times r}$ 是正交归一右奇异向量。算子 $*$ 表示复数

共轭转置。POD 模态是左奇异向量，而奇异值则是衡量每个 POD 模态包含多少 $\boldsymbol{Y}$“信息”的指标。

尚未讨论的是秩 r 的选取。有几种常用方法可用于选取秩。首先，可以直接 先验地选取秩 $r \in [1, M]$。其次，可以采用奇异值截断，使得

$$r = \underset{r \in [1,M]}{\operatorname{argmin}} \left(\frac{\sigma_r}{\max(\sigma)} < \tau_{\text{cut}} \right), \tag{5}$$

其中，$\tau_{\text{cut}} \in (0, 1)$ 是相对奇异值截断阈值，小于 τ_{cut} 的值均会被截断。最后，采用基于能量的截断，使得

$$r = \underset{r \in [1,M]}{\operatorname{argmin}} \left(\frac{\sum_{i=1}^{r} \sigma_i^2}{\sum_{i=1}^{M} \sigma_i^2} < 1 - \tau \right), \tag{6}$$

其中，$\tau \in (0, 1)$ 是允许保留的信息量，或称“能量”截断比例。该方法保留包含指定总能量比例所需的最少模态数。

$\hat{}$ 为完成离线阶段，将 $\boldsymbol{Y}$ 中的数据转换为 POD 坐标。根据式 4 进行转换:

$$\hat{\boldsymbol{Y}} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^* = \boldsymbol{\Phi}\vec{\boldsymbol{a}} \tag{7a}$$

$$\vec{\boldsymbol{a}} = \boldsymbol{\Phi}^{\dagger}\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^*, \tag{7b}$$

其中，$\dagger$ 是摩尔–彭若斯伪逆。为定义插值问题，必须存储 POD 模态、每个训练快照的 POD 坐标以及训练参数。随后，POD-MCI 降阶模型实现的数据压缩比例为

$$c = \frac{r\left(N_c N_r (N_t + 1) + M\right) + dM}{M N_c N_r (N_t + 1)} \approx \frac{r}{M}, \tag{8}$$

其中 $d \ll N_c N_r (N_t + 1)$ 和 $r \ll N_c N_r (N_t + 1)$。该因子表示仅通过本征正交分解（POD）降维所实现的压缩率。使用低维关注量时，相较于全阶解可实现显著更高的压缩率。

根据式（3），利用 POD 坐标的函数形式 $\boldsymbol{a}(\boldsymbol{\mu})$，对于未见配置 $\boldsymbol{\mu}_p$，所得感兴趣量的 POD 坐标可通过 r 独立的

插值

$$a_i(\boldsymbol{\mu}_p) = \mathcal{I}\left(\boldsymbol{\mu}_p | \boldsymbol{a}_i, \vec{\boldsymbol{\mu}}\right), \quad i = 1, \ldots, r, \tag{9}$$

其中， $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^M$ 是一个向量，包含每个训练快照的第 i个 POD 坐标。由于 POD 模态彼此正交归一，因此各个 POD 坐标互不相关，进而每个插值也互不相关。插值函数 $\mathcal{I}$ 的选择是任意的。常用插值函数包括多元线性插值、三次样条、最近邻和径向基函数（RBF）。利用插值得到的 POD 坐标，模型配置 $\boldsymbol{\mu}_p$ 对应的预测感兴趣量为

$$\hat{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{\mu}_p) = \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{\mu}_p) = \sum_{i=1}^{r} a_i(\boldsymbol{\mu}_p)\varphi_i, \tag{10}$$

随后可以将其还原，并根据需要进行进一步分析

III. 全阶模型

本文考虑一种包含缓发中子先驱核的多群时变中子扩散模型。该模型由式（11）

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{v_g}\frac{\partial \phi_g(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} - \nabla \cdot D_g(\boldsymbol{r})\nabla\phi_g(\boldsymbol{r},t) + \Sigma_{t,g}(\boldsymbol{r})\phi_g(\boldsymbol{r},t) = \sum_{g'=1}^{G}\Sigma_{s,g'\to g}(\boldsymbol{r})\phi_g(\boldsymbol{r},t) + \\
&\quad \chi_g^p(\boldsymbol{r})\sum_{g'=1}^{G}\nu_{g'}^p(\boldsymbol{r})\Sigma_{f,g'}(\boldsymbol{r})\phi_g(\boldsymbol{r},t) + \sum_{j=1}^{J}\chi_{g,j}^d(\boldsymbol{r})\lambda_j(\boldsymbol{r})C_j(\boldsymbol{r},t) + Q_q(\boldsymbol{r},t), \quad g = 1,\ldots,G
\end{aligned} \tag{11a}$$

$$\frac{\partial C_j(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} + \lambda_j(\boldsymbol{r})C_j(\boldsymbol{r},t) = \gamma_j(\boldsymbol{r})\sum_{g=1}^{G}\nu_g^d(\boldsymbol{r})\Sigma_{f,g}\phi_g(\boldsymbol{r},t), \quad j = 1,\ldots J, \tag{11b}$$

其中假设已提供适当的边界条件和初始数据。此处， $\phi_g(\boldsymbol{r},t)$为群g 标量通量， $C_j(\boldsymbol{r},t)$为位置 $\boldsymbol{r} \in \Omega$、时间 $t \in [0,T]$处缓发中子先驱核种类 j 的浓度。群 g 的总截面、裂变截面、扩散系数、中子速度和外源分别由Σ_t、$_g(\boldsymbol{r})$、Σ_f、$_g(\boldsymbol{r})$、 $D_g(\boldsymbol{r})$、 v_g和 $Q_g(\boldsymbol{r},t)$给出。从群 g' 到群 g 的微分散射截面由Σ_s、$_{g'\to g}(\boldsymbol{r})$给出。瞬发裂变谱由 $\chi_g^p(\boldsymbol{r})$给出，其中 $\sum_g \chi_g^p(\boldsymbol{r}) = 1$；缓发发射谱由$\chi_g^d$、$_j(\boldsymbol{r})$给出，其中$\sum_g \chi_g^d$、$_j(\boldsymbol{r}) = 1$，适用于 $j = 1$、$\ldots J$。此外，每次裂变产生的瞬发和缓发中子数分别由$\nu_g^p(\boldsymbol{r})$和$\nu_g^d(\boldsymbol{r})$给出。最后，缓发中子先驱核

衰变常数由 $\lambda_j(\boldsymbol{r})$给出，裂变产额由 $\gamma_j(\boldsymbol{r})$给出，其中 $\sum_j \gamma_j(\boldsymbol{r}) = 1$。需要强调的是，截面并不局限于上述函数依赖关系。事实上，截面通常可建模为时间的函数，以涵盖控制棒抽出的行为；也可建模为温度的函数，以纳入多普勒展宽的影响，或同时依赖于时间和温度。

本文采用有限体积（FV）离散对空间进行离散化。首先将空间区域划分为 N 个网格单元。随后用网格单元平均值 $\phi_{g,\,i}(t)$近似多群标量通量。对每个网格单元的体积进行积分，得到

$$\frac{V_i}{v_g}\frac{\partial \phi_{g,i}(t)}{\partial t} + \sum_{f\in\partial\Omega_i} A_f \boldsymbol{J}_{g,f}(t)\cdot\hat{n}_f + \Sigma_{t,g,i}\phi_{g,i}(t)V_i = S_{g,i}V_i, \tag{12}$$

其中， V_i 是网格单元 i的体积， A_f 是网格单元 i 中面 f 的面积，其外法向量为 $\hat{n}_f$， $S_{g,\,i}$ 是散射、裂变和非齐次源项，并且

$$\boldsymbol{J}_{g,f}(t) = -D_g \nabla\phi_g(t)\Big|_f \tag{13}$$

是穿过网格单元 i的面 f 的电流。计算电流时必须格外谨慎。在正交网格上，梯度与外法向量的点积可化简为单个导数，从而大大简化计算。该导数采用相对于该面的中心差分近似，因此

$$\nabla\phi(t)\Big|_f = \frac{\phi_n - \phi_i}{d_{in}}, \tag{14}$$

其中， n 表示相邻网格单元， d_{in} 表示网格单元 i 与其相邻网格单元 n 的中心之间相对于面 f 的距离。为考虑材料界面，网格单元面上的扩散系数采用加权调和平均计算，因此

$$D_f = \left(\frac{w}{D_i} + \frac{1-w}{D_n}\right)^{-1}, \tag{15}$$

其中 $w = d_{if}/d_{in}$， d_{if}为从单元 i的中心到面 f中心的距离。

内部网格单元的最终离散系统由下式给出

$$\frac{V_i}{v_g}\frac{\partial \phi_{g,i}(t)}{\partial t} + \sum_{f\in\partial\Omega_i} A_f \frac{D_{g,f}}{d_{in}}\left(\phi_{g,i}(t) - \phi_{g,n}(t)\right) + \Sigma_{t,g,i}\phi_{g,i}(t) = S_{g,i}(t)V_i. \tag{16}$$

该方法具有二阶精度和守恒性。

时间离散采用梯形二阶后向差分公式（梯形二阶后向差分公式）。 [30]该方法具有二阶精度，且能强烈阻尼振荡行为。该方法首先采用克兰克-尼科尔森方法推进半个时间步长，使得

$$\frac{4}{\Delta t}\left(f^{n+1/4} - f^{n}\right) = \boldsymbol{A} f^{n+1/4}. \tag{17}$$

随后用此结果计算 $f^{n+1/2} = 2f^{n+1/4} - f^{n}$。基于该结果，再推进半个时间步长，采用二阶后向差分法，通过下式获得时间步末的结果

$$\frac{3}{\Delta t}\left(f^{n+1} - f^{n+1/2}\right) - \frac{1}{\Delta t}\left(f^{n+1/2} - f^{n}\right) = \boldsymbol{A} f^{n+1}. \tag{18}$$

由于缓发中子先驱核方程是逐单元常微分方程，因此没有充分理由增加多群系统的维数并同时求解这些方程。相反，通过检查时间离散系统，

$$\left(1 + \lambda_{j,i}\Delta t_*\right) C^*_{j,i} = C^{\text{prev}}_{j,i} + \gamma j, i\Delta t_* \sum_{g=1}^{G} \nu^d_{g,i}\Sigma_{f,g,i}\phi^*_{g,i}, \tag{19}$$

表明 $C^*_{j,\ i} = C^*_{j,\ i}(C^{\text{prev}}_{j\ i}{}_{,\ ,}\ \phi^*_{g,\ i})$。在上述方程中， $*$ 表示未知的时间步索引，Δt_* 表示该方法完全隐式版本的有效时间步长，而上标“prev”表示涉及所有先前计算所得解的项。例如，对于 Crank–Nicolson 方法的第一个半时间步， $\Delta t_* = \Delta t/4$。由此，$C^*_{j,\ i}$ 可从多群扩散方程中消去，缓发中子先驱核只需在线性方程组求解后更新。

IV. 数值结果

本节给出两个算例的数值结果。第一个是相对简单的问题，重点是详细展示 POD-MCI 降阶模型。第二个算例是反应堆脉冲的一个更贴近实际的应用。这是一个二维问题，包含瞬态截面和非线性温度反馈，并与绝热升温模型耦合。

IV.A. 三群均匀球问题

这个数值算例是对脉冲中子实验的粗略模拟：实验中，半径为 $r_b = 6$ 厘米的易裂变材料次临界球体受到一束快中子的轰击。由于这类实验的时间尺度通常很短，因此忽略缓发中子先驱核的影响。关于该问题的意义和研究动机的详细说明，请参见 [22]，其中对此有详细讨论。

本问题使用的三群核数据列于表I 和II。从数据可以看出，所有裂变事件产生的中子都属于快群，并且只允许中子从快群向超热群下散射。数据的设定使得不存在产生

表 I 三群均匀球问题的核数据。

群	σ_t (b)	$\nu\sigma_f$ (b)	χ	v (cm/μs)
0	7.71	5.4	1	2000
1	50.0	60.8	0	100
2	25.6	28.0	0	2.2

表 II
三群均匀球问题的散射矩阵，单位为靶恩；每行表示最终群 g ，每列表示初始群 g'。

群	0	1	2
0	4.4	0	0
1	1.46	13.8	0
2	0	0	12.0

热群的术语。换言之，如果初始条件中不存在热中子，那么问题中也不会观测到热中子。使用名义原子密度 $\rho = 0.05$ atoms/b- cm 来计算模拟中使用的宏观截面，扩散系数则通过 $D_g = (3\rho\sigma_{t,g})^{-1}$ 计算。

为了引发更有趣的动态变化，快群和超热群采用抛物型初始条件，使得

$$\phi_g(r, t=0) = \begin{cases} C\left(1.0 - \dfrac{r^2}{r_b^2}\right), & \text{if } g = 0, 1 \\ 0.0, & \text{otherwise,} \end{cases} \tag{20}$$

其中 C 是将通量归一化为单位功率的常数。这一点可见图 1。在

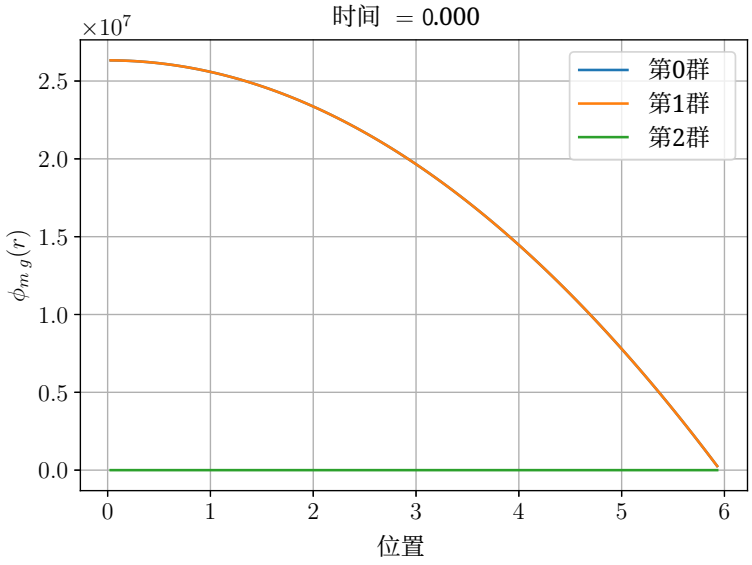


图 1. 三群均匀球问题的初始条件。

在球边界处，对每个群施加零通量条件。模拟运行 100 ns，时间步长为 2 ns，并使用 100 个等间距计算单元。由于超热群的裂变截面较高，问题开始时发生了大量裂变事件，导致反应堆功率出现峰值，之后逐渐进入次临界动力学状态。反应堆功率随时间的变化以及模拟结束时的标量通量分布如图所示2。

本节其余内容分为两个小节。第一小节采用问题的一维参数化，以帮助建立对 POD-MCI 降阶模型性能的直观认识。第二小节则考虑更贴近实际的三维参数化。

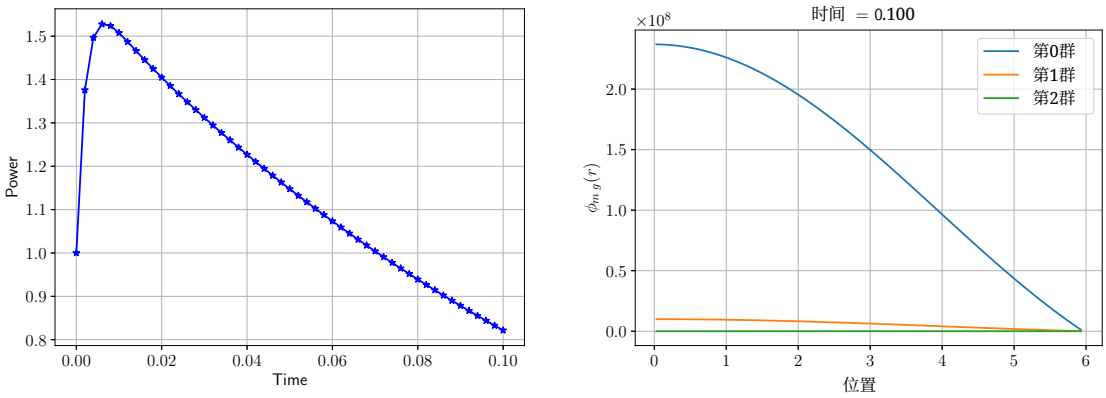


图2. 功率随时间的变化（左）以及模拟结束时的多群标量通量（右）。

IV.A.1. 球体半径参数化

本节将球体半径作为不确定参数或设计参数。不同于采用次临界标称构型，标称球体半径设为临界半径$r_b = 6.1612$ cm。需要强调的是，在临界状态附近进行扰动，会导致结果相对于标称问题呈指数级发散。对于此示例，运行了 21 次模拟，半径在 $r_b = 6.1512$ cm $\pm 2.5\%$ 之间均匀分布。最次临界（$r_b - 2.5\%$）和最超临界（$r_b + 2.5\%$）的功率分布显示于图 3中。这意味着最终功率相对差异为 150%，最小值与最大值之间的差异为 606%。此外，这涵盖了两种截然不同的动态状态。

根据这些数据，利用多群标量通量数据构建 POD-MCI降阶模型。每个模拟快照的大小等于时间步数、网格点数和群数的乘积，即 $51 \times 100 \times 3 = 15,300$。降阶模型的能量截断限值设为 $\tau = 10^{-8}$，由此得到一个包含四个模态的模型。相对奇异值衰减（即碎石图）和截断阈值如图 4 所示。训练数据的相对 ℓ_2 重构误差为 1.5×10^{-5}，平均仿真重构误差为 1.47×10^{-5}，最大值为4.67×10^{-5}。出于验证目的，通常会考察重构误差随模态数或能量截断参数的变化。根据理论，重构误差与被截断的最大奇异值成正比，因此 $\|X_r - X\|_{\ell_2} \propto \sigma_{r+1}$。如图5所示，可以观察到这一现象。当然，重构误差并不能代表

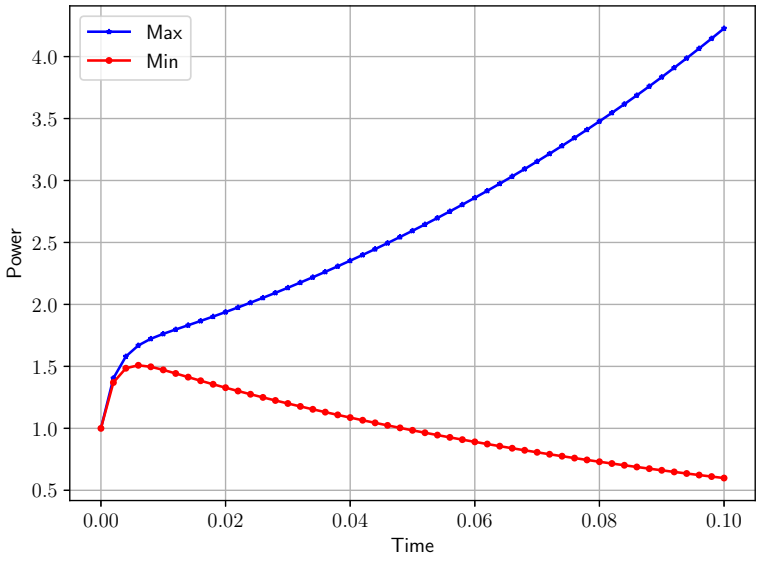


图 3. 参数空间中次临界程度最高（红色）和超临界程度最高（蓝色）的状态。

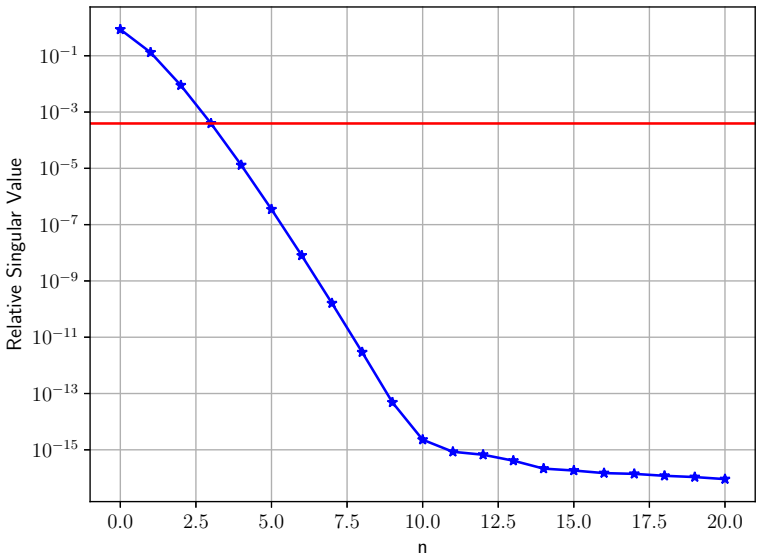


图 4. 多群标量通量数据的碎石图。

POD-MCI误差，因为模态系数并非通过插值获得，而是通过对 POD 模态进行最小二乘拟合得到。不过，它可以提供一个近似的最佳情况。

将 POD 模态系数随参数值的变化可视化，有助于了解其函数形式的平滑性。如图 6所示。显然，

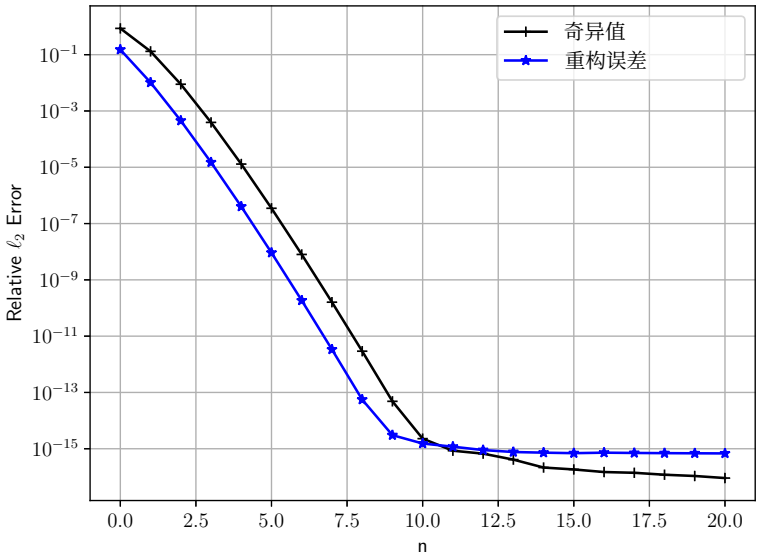


图 5. 相对 ℓ_2 POD 重构误差随模态数的变化，并与奇异值谱进行对比。

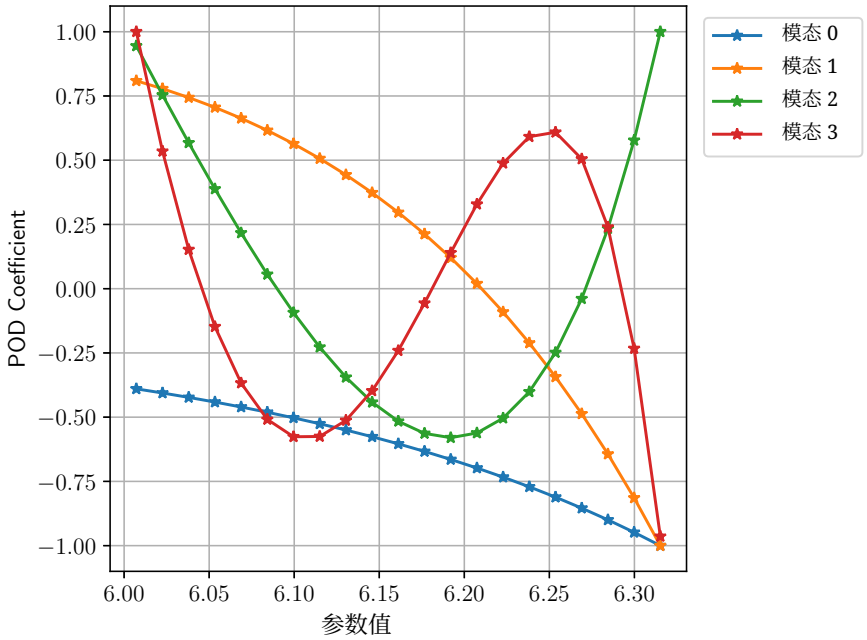


图 6. POD 模态系数随球体半径的变化。

POD 模态系数的平滑性会随着模态数的增加而降低。虽然插值精度显然也会随着模态数的增加而降低，但由于 POD 的性质，这种情况并非完全

令人棘手。由于 POD 模态是正交归一的，每个后续 POD 模态都会为展开增加新的、不相关的信息。此外，由于每个模态所包含的信息都依次少于前面的模态，高阶模态插值不佳对预测误差的影响会显著减弱。

由于 POD-MCI 降阶模型中插值函数的选择是任意的，因此本研究仅使用采用薄板样条核的径向基函数（RBF）插值函数，其形式为 $r^2\log(r)$。使用 RBF 的优势在于，预测可用点网格之外的点时无需特殊处理。虽然应始终尽量减少外推，但在高维空间中，由于难以在规则网格上进行采样，某些维度上的外推无法避免。采用这种特定的核函数，是因为它无需调整形状参数。本文未对其他超参数进行调整。为获得最佳结果，应先进行初步分析，以确定适用于特定数据集的最佳插值函数配置。本研究使用 Python 软件包 `SciPy` 类 `RBFInterpolator`[31]进行插值。

从第一张快照开始，每隔一张快照取一张作为训练数据，其余快照作为验证数据或测试数据。图中展示了均值、最大值和最小值模拟重构误差随模态数量的变化情况，见图 7。从这一结果中可以观察到几个值得注意的现象

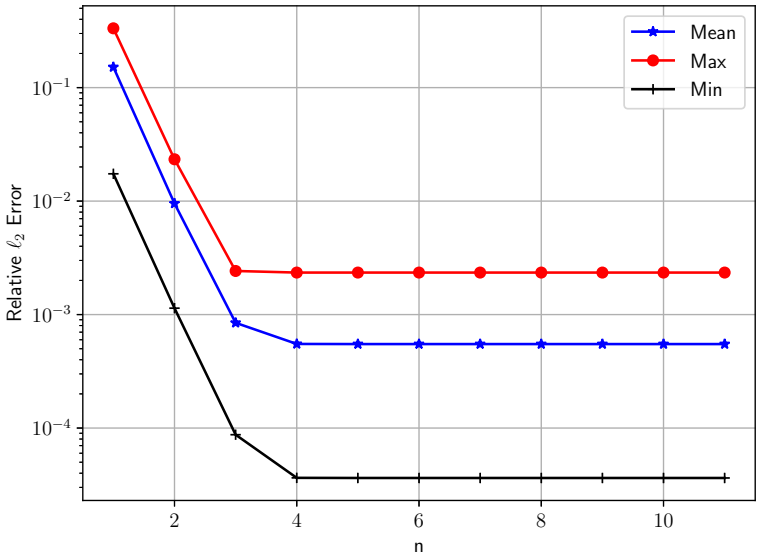


图 7. 预测误差均值、最大值和最小值随 POD 模态数量的变化。

。首先，预测误差单调下降，证实了此前关于非光滑高阶 POD 模态插值的论述。其次，对于少模态模型，POD 表示误差显然占主导；而对于模态数量较多的模型，插值误差则显然占主导。此外，在规则参数网格上，将每隔一张快照作为插值点，意味着所有插值点与最近训练点的距离均为 Δr_b 。由于插值精度会随着与训练点距离的增加而降低，因此对于采用这种网格结构的情况，这代表了最坏情形的结果。需要强调的是，这些结果仅基于训练集中的 11 次模拟。采用更多仿真数据，或针对该数据集优化插值函数，都可以降低这些误差。

为近似评估 POD-MCI 降阶模型在不规则参数网格上的性能，采用重复 k折交叉验证。该交叉验证技术会打乱可用的快照，并将其划分为 k 组，即若干折。随后， $k-1$ 组用于训练降阶模型，剩余的一组留作验证。该过程重复 k 次，每次选取不同的一组进行验证。当可用数据有限时，可多次重复此过程，每次都打乱快照以生成不同的数据组。为执行这一过程，使用了 Python 软件包`Scikit-Learn`中的工具 [32]。使用三组数据并重复 250 次，共得到 750 个交叉验证集；图8展示了各降阶模型的均值和最大预测误差分布。由此可见，无论如何打乱数据，降阶模型误差的均值都低于 1%，且只有极少数情况下最大误差会超过 1%。事实上，最大误差超过 1% 的情况不到 2.5%。随机打乱训练样本时，最大误差的最坏情形可能出现在训练集包含许多连续样本、导致参数空间中相当大一部分区域采样稀疏的情况下。此时，对于包含 14 个快照的训练集和包含 7 个快照的验证集，理论上可能出现距离为 $7\Delta r_b$ 的插值或外推。实际应用中，通过适当采样可以轻松避免这些情况。因此，这些分布很可能是对实际观测结果的保守估计。

在实际应用中，为确保结果准确，人们会尽可能使用现有的训练样本。留一交叉验证是一种有效工具，可用于评估

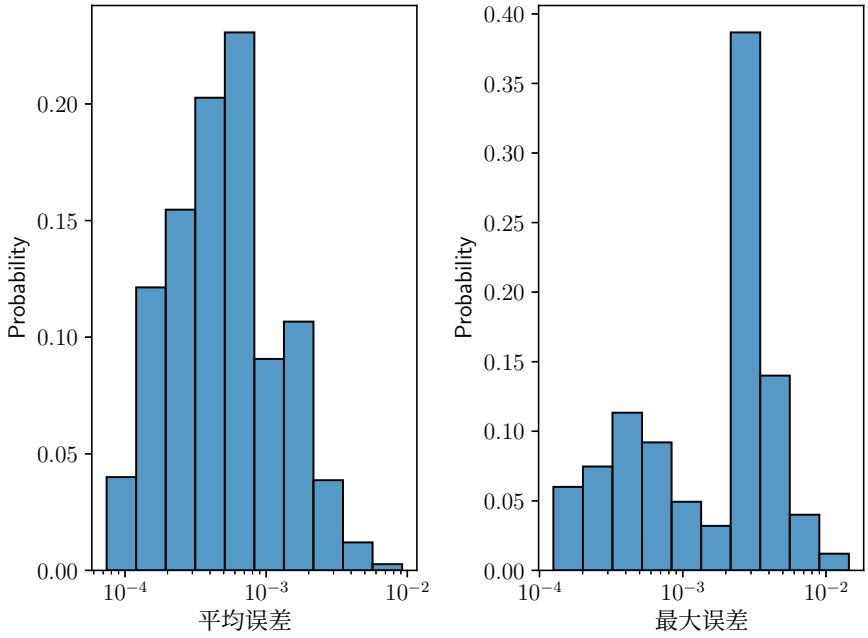


图 8. 750 个交叉验证集上的均值误差和最大误差分布。

使用除一组仿真数据外的所有数据时降阶模型的性能。当 k 为可用快照的数量时，这种方法等同于k折交叉验证。虽然交叉验证集的数量仅限于可用快照的数量，但由于不会对现有数据进行大幅外推，因此它能很好地反映降阶模型的性能。对于该数据集，平均预测误差为 0.15%，最大值为 1.4%，最小值为 0.0056%。

这些结果表明，POD-MCI降阶模型能够在简单的一维参数化下，准确预测跨越截然不同动态状态的全阶仿真结果。模型取得了可接受的误差，且总体上对参数空间的采样不敏感。对于此问题，每次全阶仿真使用 Python 平均耗时 1.1 s。在留一交叉验证研究中，POD-MCI降阶模型的平均构建时间为 8.12 ms，平均查询时间为 0.135 ms。因此，加速比约为 8,000 倍，极具吸引力。

IV.A.2. 三维参数化

在此示例中，模型以半径、原子密度和微观向下散射截面为参数。上一节展示了涵盖次临界和超临界状态的模拟结果，而本示例仅限于次临界系统。这样做是为了更贴近脉冲中子实验中观测到的状态。参数空间定义为 $r_b = [5.94, 6.0]$ cm、 $\rho = [0.0495, 0.05]$ atoms/b-cm 和 $\sigma_{s,0\to1} = [1.387, 1.46]$ b，并得出图 9所示的边界功率分布。相对

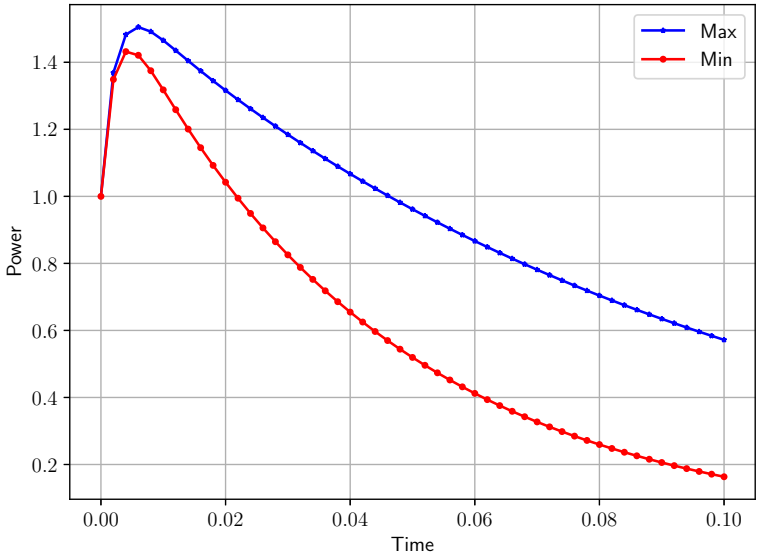


图 9. 三维参数空间中次临界程度最高（红色）和最低（蓝色）的功率分布。

此参数化下最终功率的最大值与最小值之差为 111%，而最小值与最大值之比差为 250%。此空间采用张量积采样技术进行采样，每个维度取四个等距点，共进行 64 次模拟。

多群标量通量数据的碎石图如图10所示。在这种情况下，截断参数 $\tau = 10^{-8}$ 得到一个五模态模型。整个数据集上的重构误差为 6.79×10^{-5}，仿真重构误差的均值和最大值分别为 5.46×10^{-5} 和 2.77×10^{-4}。采用留一交叉验证时，平均预测误差为 0.259%，最大值为 0.674%。这表明，即使模态系数的函数行为分辨率显著降低，仍能达到可接受的精度。需要

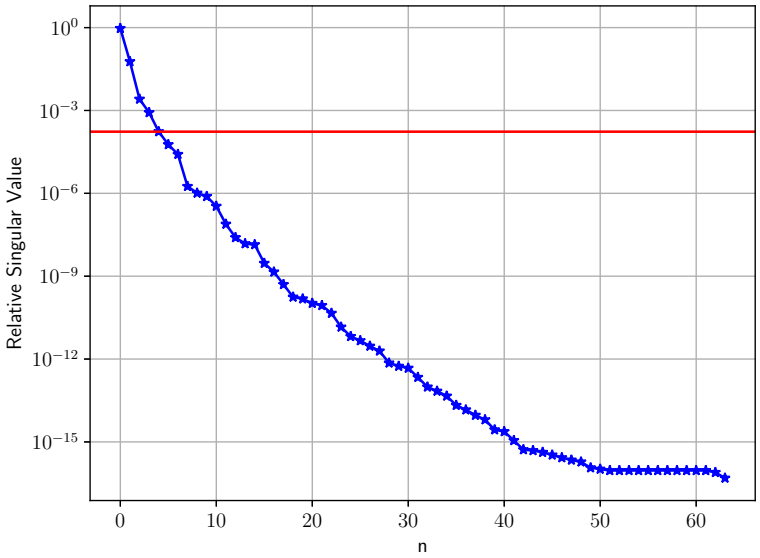


图 10. 多群标量通量数据的碎石图。

指出，这些结果优于第IV.A.1 节的结果，主要是因为限定在次临界区间内，从而消除了从次临界到超临界转变附近的发散行为。采用 k折交叉验证且 $k = 3$ 时，750 个交叉验证集上的均值和最大误差分布如图11所示。即使参数空间的采样相对稀疏，且训练集中省略了三分之一的样本，最大误差仍低于 4%，平均误差仍低于 1%。如前所述，随机打乱可用数据可能导致参数空间的某些区域严重欠采样。在更高维度下，这一问题会更加突出，因为受计算成本限制，通常对空间的采样会更加稀疏。考虑到这一点，这一结果极具前景。

在此阶段，POD-MCI降阶模型已被证明能够准确预测全阶模拟数据的参数化行为。然而，非侵入式降阶模型的主要优势之一，是能够直接对任意数据建模。为此，考虑这样一种情况：我们只关心模拟结束时的功率密度分布。利用这类数据构建降阶模型，可以将所需数据量减少至原来的 1/(组数与时间步数乘积)。在本例中，数据量减少了 153 倍。该数据的碎石图如图12所示。由于此时模拟中的解已趋于稳定，进入长期行为阶段

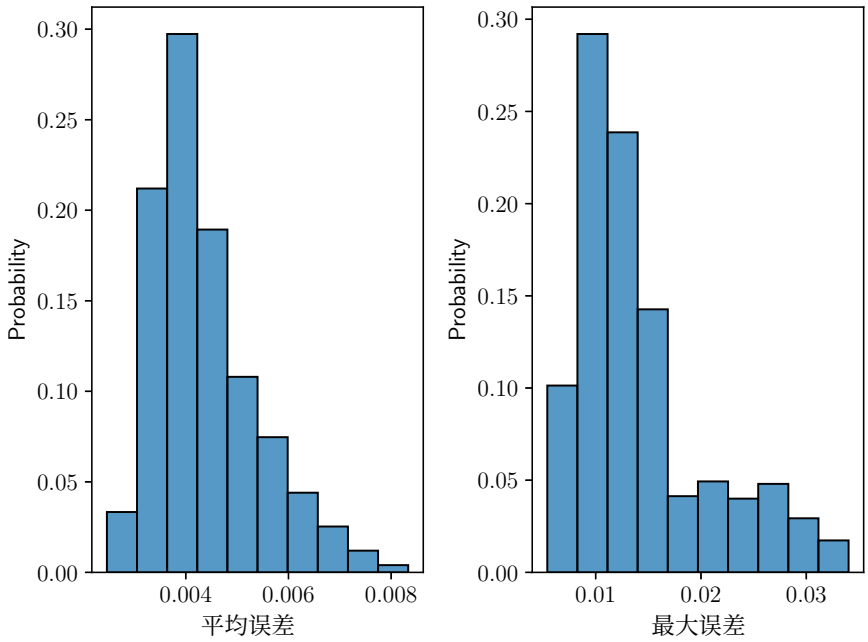


图 11. 750 个交叉验证集的平均误差和最大误差分布。

在参数空间内，功率分布非常相似，只有幅值有所变化。因此，数据可以通过截断至 $\tau = 10^{-8}$ 、仅使用一个 POD 模态来表示。通过留一交叉验证，预测最终功率密度分布的均值误差和最大误差分别为 1.12% 和 3.05%，对于降阶模型而言，这通常仍是可接受的误差水平。误差较大的原因可能是，最终功率密度分布数据并不“完整”，因为系统先前的动态行为对预测未来状态具有参考价值。在本例中，降阶模型的构建时间和查询时间均缩短了约四倍。

最后一个示例中，可以将功率随时间变化的曲线作为感兴趣量并直接进行建模。采用相同的流程，当能量截断阈值为 $\tau = 10^{-8}$ 时，可得到一个五模态模型。留一交叉验证的结果与采用全阶解时相当，但加速比达到四倍。此外，该降阶模型所需的数据量比采用全阶解时少 300 倍。

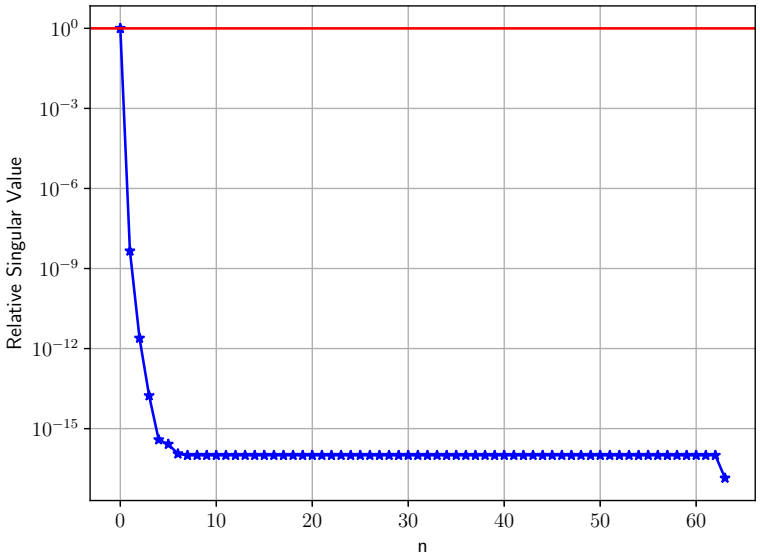


图 12. 最终功率密度分布数据的碎石图。

IV.B. LRA基准问题

LRA 基准问题是一个带温度反馈的瞬发超临界事故二维四分之一堆芯模型，取自阿贡国家实验室的《基准问题手册》 [33]。该问题的几何结构如图13所示。标记为 1–4 的区域为燃料，区域 5 为反射层。底部和左侧边界为反射边界，顶部和右侧边界施加零通量条件。该问题采用两个能群和两种缓发中子先驱核种类。截面和缓发中子先驱核数据见表III、IV和V。该量 B_a^2 是一个轴向曲率项，用于通过$B_a^2 D_g \phi_g$近似轴向泄漏。

标称设置采用 484 个 7.5 cm × 7.5 cm 网格单元，计算至 3 s，时间步长为 0.01 s。通过对区域“R”中的热群吸收截面进行线性递减来引发瞬发超临界事故，具体如下：

$$\sigma_{a,1}^{R}(t) = \sigma_{a,1}^{3} \begin{cases} 1 + \dfrac{t}{t_{\text{ramp}}}\Delta, & 0 < t < t_{\text{ramp}} \\ 1 + \Delta, & t \geq t_{\text{ramp}}, \end{cases} \tag{21}$$

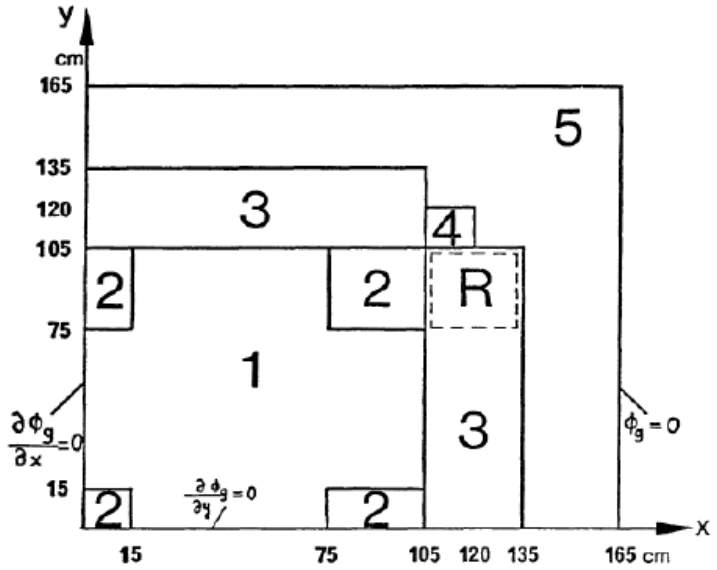


图 13. LRA 基准问题的几何结构 [33]。

表 III LRA 基准问题中各材料的截面。

区域	组	D (厘米)	σ_a (厘米$^{-1}$)	$\nu\sigma_f$ (cm^{-1})	$\sigma_{s,\ 0\to1}$ (厘米$^{-1}$)
1	1 2	1.255 0.211	0.008252 0.1003	0.004602 0.1091	0.02533
2	1 2	1.268 0.1902	0.007181 0.07047	0.004609 0.08675	0.02767
3	1 2	1.259 0.2091	0.008002 0.08344	0.004663 0.1021	0.2617
4	1 2	1.259 0.2091	0.008002 0.073324	0.004663 0.1021	0.2617
3	1 2	1.257 0.1592	0.006034 0.01911	- -	0.04754

表 IV LRA 基准问题中所有材料共用的核数据。

组	v (cm/s)	χ^p	χ^d	B_a^2 (cm^{-2})	ν	ν^p	ν^d
1 2	3.0e7 3.0e5	1 0	1 0	1.0e-4	2.43	2.41423659	0.01576341

其中 $\Delta = -0.1212369$, $t_{\text{ramp}} = 2.0$ s。温度反馈模型如下:

$$\sigma_{a,0}(\boldsymbol{r},t) = \left[1+\gamma\left(\sqrt{T(\boldsymbol{r},t)}-\sqrt{T_0(\boldsymbol{r})}\right)\right]\sigma_{a,0}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}), \tag{22}$$

表 V LRA 基准问题的缓发中子先驱核数据。

核素	λ (s^{-1})	产额分数
1	0.0654	0.0054
2	1.35	0.001087

为 $\gamma = 3.034 \times 10^{-3}\,\mathrm{K}^{1/2}$ 且 $T_0(\boldsymbol{r}) = 300\,\mathrm{K}$ 是位置 $\boldsymbol{r}$处的初始温度。模拟中采用滞后非线性。温度使用式（23）所示的绝热升温模型进行建模，其中 $\alpha = 3.84 \times 10^{-11}\,\mathrm{K\text{-}cm}^3$ 是将裂变率转换为温度变化的换算因子。

$$\frac{\partial T(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \alpha \sum_{g=1}^{2} \sigma_{f,g}(\boldsymbol{r})\phi(\boldsymbol{r},t) \tag{23}$$

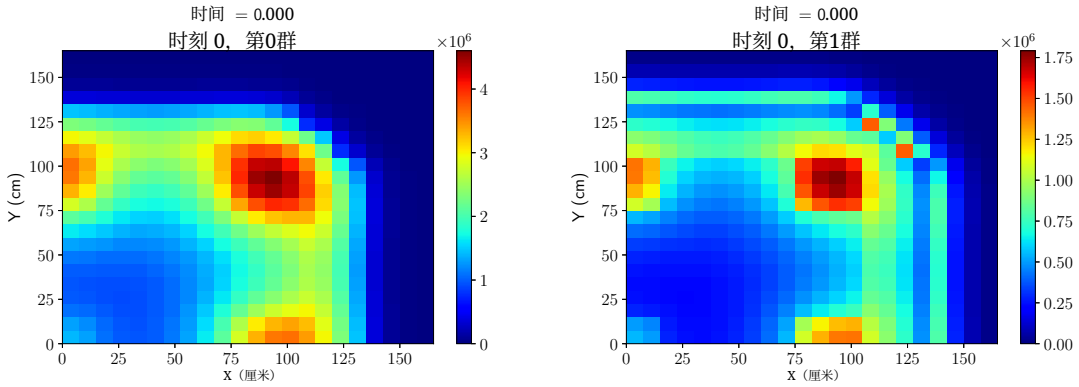
需要注意的是，该温度模型意味着不存在热扩散或热量移除机制。因此，在整个模拟过程中，燃料温度单调升高，而反射层始终保持初始温度。由此，反射层内不会发生热反馈。

通过求解 k 特征值问题来初始化模拟，并对所得标量通量分布进行归一化，使其满足

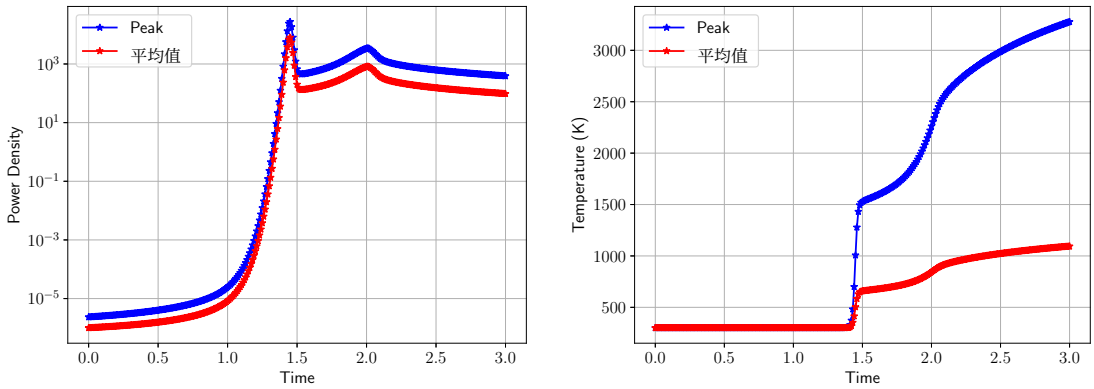
$$\bar{P} = \frac{E_f}{V_{\mathrm{core}}} \int_{V_{\mathrm{core}}} \sum_{g=1}^{2} \sigma_{f,g}(\boldsymbol{r})\phi_g(\boldsymbol{r}, t=0)dV = 10^{-6}\,\mathrm{W\ cm}^{-3}, \tag{24}$$

其中， $\bar{P}$为平均功率密度， $E_f = 3.204 \times 10^{-11}\,\mathrm{J}$ 为每次裂变事件释放的能量。此外，对裂变截面进行归一化，使系统处于稳态，其依据为 k特征值。该问题收敛后的 k特征值为 0.9975。各群的初始条件如图14

平均功率密度、峰值功率密度和燃料温度随时间的变化如图15所示。对于 $t < 1.44$ 秒，区域“R”中的吸收截面正在减小，使系统的反应性增加，导致功率以越来越快的速度上升。在此期间，吸收截面减小所带来的正反应性大于温度反馈产生的负反应性。在 $t = 1.44$ 秒时，功率达到峰值，这表明温度反馈已“赶上”并开始超过由



LRA 基准问题的初始多群标量通量。



平均值（红色）和峰值（蓝色）功率密度（左）与燃料温度（右）随时间的变化。

截面坡升所带来的正反应性。峰值功率时刻的多群标量通量分布如图16所示。对于 $1.44 < t \leq 2$ 秒，截面坡升仍在向系统加入正反应性。峰值功率后不久，正反应性再次超过温度反馈，导致功率在谷值后继续上升。这种情况一直持续到坡升在 $t = 2$ 秒时结束。在模拟的剩余时间内，温度反馈主导系统，功率开始衰减。该基准问题具有复杂的动态特性，且其解变化了十个数量级，因此非常适合用于测试 POD-MCI 降阶模型。

在反应堆脉冲问题中，人们通常关注峰值功率的特征。为测试 POD-MCI 降阶模型，LRA 基准问题以三个变量进行参数化：截面幅值 $\Delta = -0.1212369 \pm 2.5\%$，截面坡升持续时间

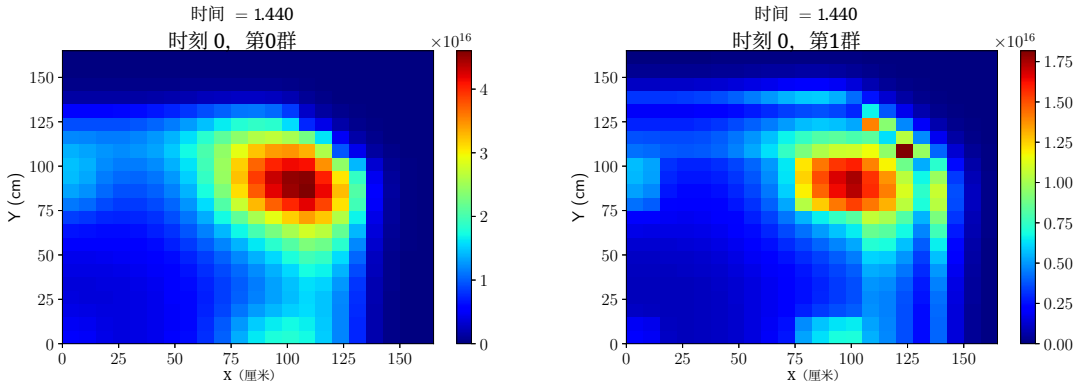


图 16. LRA 基准问题峰值功率时刻（$t = 1.44$ s）的多群标量通量。

$t_{\text{ramp}} = 2.0$ 秒 $\pm 2.5\%$，以及反馈系数 $\gamma = 3.034 \times 10^{-3}\ \text{K}^{1/2}$ $\pm 5\%$。这些参数都以复杂的方式直接影响峰值功率出现的时间及其幅值。此外，由于峰值功率出现前功率迅速增长，在峰值功率出现前的固定时刻，即使是微小扰动，也会导致解相差数个数量级。这一点可见图 17。由于参数范围内的解数据变化很大

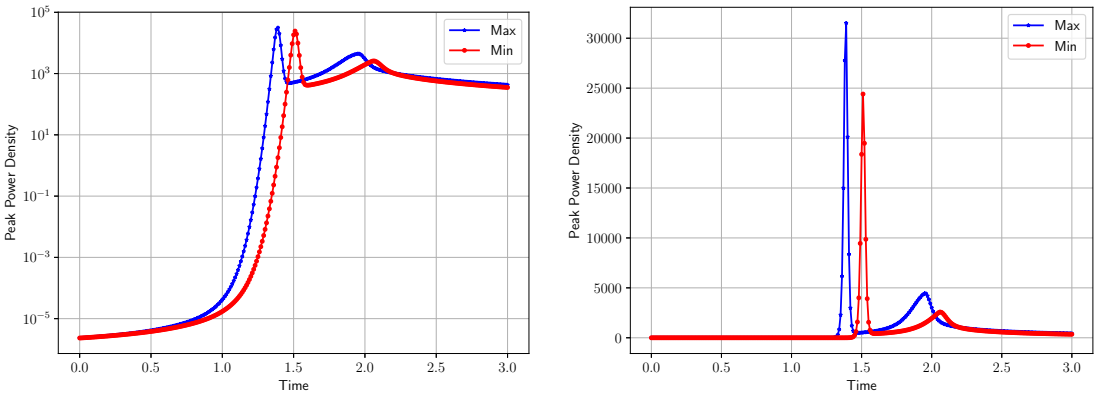


图 17. 对数刻度（左）和线性刻度（右）下，峰值功率最小（红色）和最大（蓝色）的模拟功率分布。

空间中，要达到与前述示例相同的能量，需要更多 POD 模态。图18展示了时变功率密度分布数据中的这一现象。

虽然该 POD-MCI降阶模型在能量截断为 $\tau = 10^{-8}$ 时使用了 20 个模态，但结果与前一个示例的结果相当。留一交叉验证得出的均值和

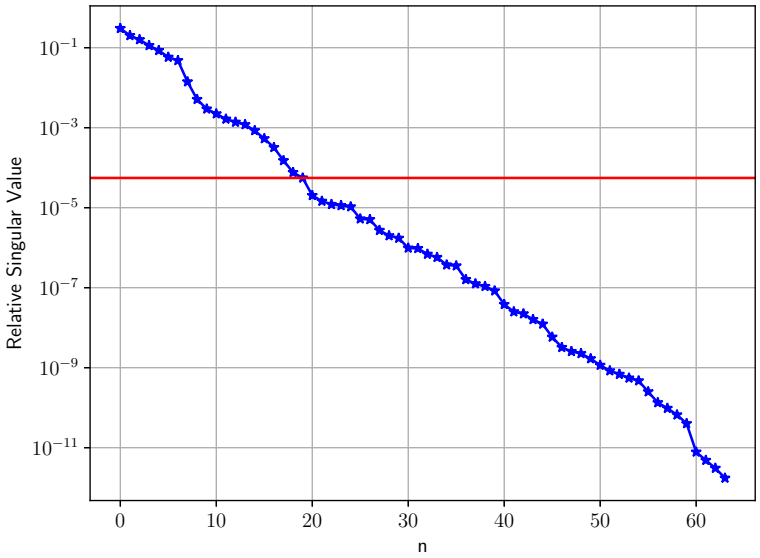


图 18. LRA 基准问题的时变功率密度分布数据的碎石图。

最大预测误差分别为 0.657% 和 1.75%。与前几个示例一样，采用三折交叉验证会得到较差的结果，这是由于模态数量较多且参数空间中的变化范围较广。高阶模态包含了更多用于描述数据集的信息，因此它们对解的贡献更大；由此，较差的插值可能导致非常糟糕的预测。当参数空间中的采样不足时（例如进行 k折交叉验证时），这一问题会更加严重。因此，我们采用五折交叉验证而非三折交叉验证来研究采样的影响，结果如图19所示。值得注意的是，在极少数情况下会观察到发散误差。这是因为训练集中对参数空间的采样特别差。由于固定时间下不同快照之间存在数量级差异，采样不佳可能会导致误差显著高于前一个示例。不过需要强调的是，在 95% 的情况下，观测到的最大误差介于 1.58% 和 12.8% 之间；在使用降阶模型之前，对现有训练数据执行交叉验证流程即可避免较大的误差。总体而言，这些结果表明，只要采样充分，POD-MCI降阶模型的性能对参数空间中的采样相对不敏感。

该问题的全阶模型计算成本远高于前一个示例。

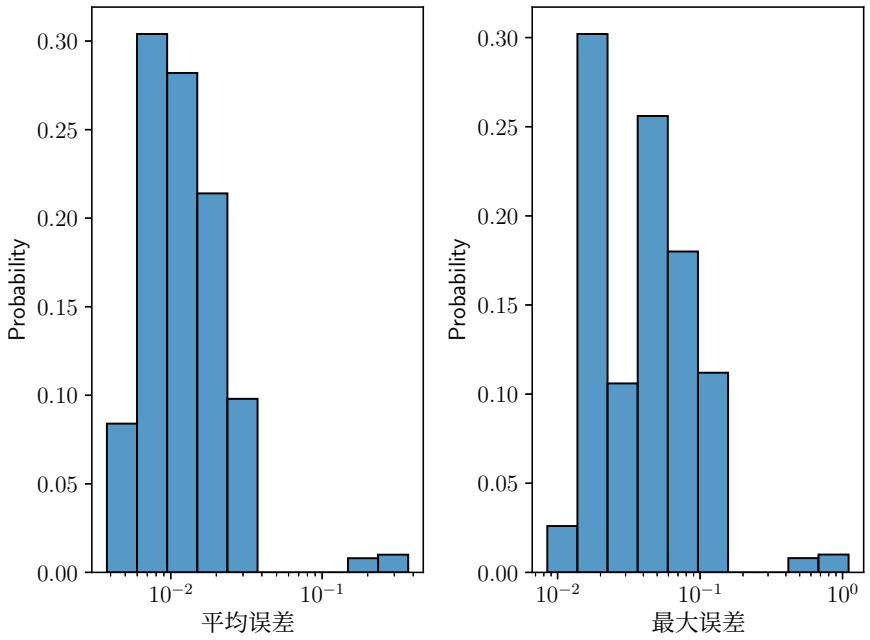


图 19. 500 个交叉验证集上的均值（左）和最大值（右）误差分布。

如果不采用自适应时间步进，也不对非线性进行迭代，每次模拟平均需要 32 s。采用这些功能后，耗时可能增加一倍以上。通过留一交叉验证构建 POD-MCI 降阶模型，平均耗时为 0.71 s，平均查询时间为 1.56 ms。构建时间较长是由模拟规模较大造成的。本例包含 301 个时间步，每个时间步有 484 个网格点，因此每次模拟有 145,684 个数据点。值得注意的是，与侵入式降阶模型相比，所需数据量已减少 80%；侵入式降阶模型需要纳入双群标量通量、两种先驱核素和温度。查询时间较长，纯粹是因为模态数量较多，而且将系数映射回全阶结果的成本较高。尽管成本有所增加，计算加速比仍约为 20,500。对于任何降阶模型而言，面对更复杂、规模更大的全阶模型时能获得更高的加速比，都是一项优势。

对于此类问题，人们可能希望预测系统在峰值功率时刻或其附近的行为。使用基于时变功率密度分布数据构建的降阶模型时，POD-MCI降阶模型始终会低估峰值功率。原因相对简单，基于这样一个事实：参数空间被视为连续体，而时间则是离散的。

参数空间的微小变化可能会导致峰值功率幅值和峰值功率时刻发生微小变化。然而，只有在对应于仿真时间步的时刻，才能提取峰值功率。因此，如果峰值功率不恰好出现在某个时间步上，就必然会被低估。可以不对时变数据建模，而是直接针对每次模拟的峰值功率密度分布构建降阶模型。这样，数据需求量可减少为原来的 1/时间步数；在本例中，时间步数为 301。与前一个示例一样，由于峰值功率密度分布的底层行为相较于完整的时变数据变化较小，因此，POD模型在达到相同能量时所需的模态显著更少。在本例中，峰值功率密度分布可由三个 POD 模态表示，留一交叉验证得到的最大观测误差为 0.424%。将空间积分功率密度分布作为标量感兴趣量，通过在参数空间中抽取一百万个随机样本得到的分布如图 20所示。这显然是一个

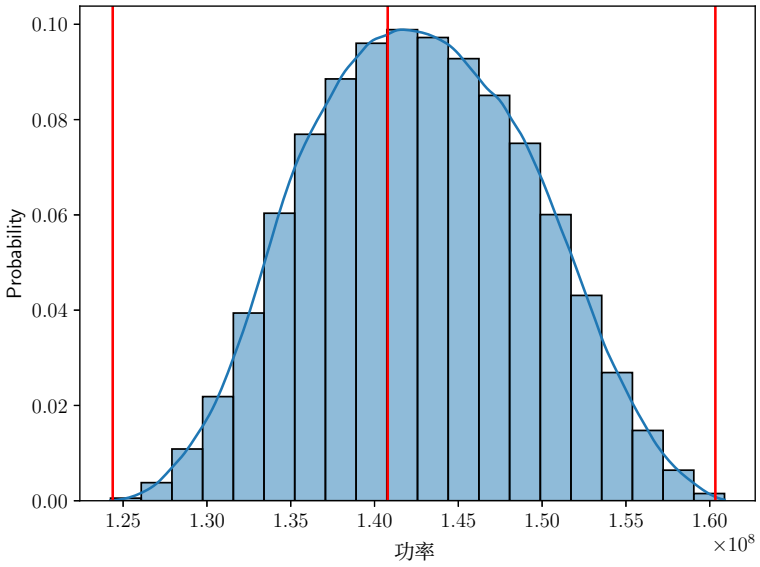


图 20. 三维参数空间中峰值功率的分布，并标出了可用仿真数据的峰值功率最小值、最大值和均值（红色）。

结果符合预期：分布近似正态，位于观测范围内，且中心接近观测值的均值。此外，该降阶模型处理一百万个样本的查询时间为 7.32μs，相较于全阶模型实现了 435 万倍的加速比。

V. 结论

本文提出了非侵入式、与模型无关的 POD-MCI 降阶模型，可根据任意数据构建。该降阶模型将高维仿真数据进行坐标变换，映射至低秩最优基，在该基中进行插值，然后将结果映射回高维空间。该方法不仅无需修改全阶模型的源代码，还能仅利用感兴趣的仿真数据构建降阶模型，从而大幅降低相较于侵入式方法的数据需求。

本文展示了多项不同的结果，以表征 POD-MCI 降阶模型的特性和精度。首先，研究表明，降阶模型的稳定性不受模态数影响。由于函数型 POD 模态系数的平滑性会随着模态能量含量的降低而变差，当 POD 模态的能量相对于插值前几个模态时产生的误差足够小时，插值不佳所引入的误差便可忽略不计。其次，本文采用自助法方法来表征该方法对参数采样的敏感性。除参数空间中某些区域采样严重不足的情况外，误差均处于可接受范围内。最后，与全阶模型相比，使用较低维数据（例如特定时刻的功率密度分布或纯时变数据）时，数据需求和执行时间均显著降低。对于具有复杂动力学特性且参数空间内变化显著的示例，上述结果在一维和三维参数空间中均成立。

本研究主要属于探索性工作，旨在评估 POD-MCI 方法的整体性能。还有许多值得进一步研究的方向。首先，优化插值技术（例如径向基函数核及其超参数）或许能够得到更准确的结果。此外，还可以采用人工神经网络或高斯过程等技术，以更好地捕捉模态系数的非线性行为。后者还可以从插值中提供有用的不确定性信息。最后，探索更先进的采样技术（例如拉丁超立方抽样或稀疏网格），有助于了解该方法在非规则网格和更高维空间中的性能。

致谢

本研究由美国能源部（DOE）通过洛斯阿拉莫斯国家实验室提供支持。洛斯阿拉莫斯国家实验室由 Triad National Security, LLC 代表美国能源部下属的国家核安全管理局运营（合同编号 89233218CNA000001）。本材料基于美国国家科学基金会研究生研究奖学金资助的工作，资助编号为 DGE:1746932。本材料中表达的任何意见、研究结果、结论或建议均为作者所有，不一定反映美国国家科学基金会的观点。

参考文献

[1] J. L. Lumley, 《非均匀湍流的结构》, 《大气湍流与无线电波传播》, 166–178（1967年）。[2] L. Sirovich, 《湍流与相干结构动力学。I. 相干结构》, 《应用数学季刊》, 45, 3, 561（1987年）。[3] L. Sirovich, 《湍流与相干结构动力学。II. 对称性与变换》, 《应用数学季刊》, 45, 3, 573（1987年）。[4] L. Sirovich, 《湍流与相干结构动力学。II. 对称性与变换》, 《应用数学季刊》, 45, 3, 573（1987年）。[5] A. Buchan、 C. Pain、 F. Fang和 I. Navon, 《一种用于特征值问题的本征正交分解降阶模型及其在反应堆物理中的应用》, 《国际工程数值方法杂志》, 95, 12, 1011（2013年）。[6] A. Sartori、 A. Cammi、 L. Luzzi和 G. Rozza, 《用于铅冷快堆单通道分析的多物理场降阶模型》, 《核能年鉴》, 87, 198（2016年）。[7] P. German 和 J. C. Ragusa, 《参数化多群扩散 k 特征值问题的降阶建模》, 《核能年鉴》, 134, 144（2019年）。[8] P. German、 J. C. Ragusa和 C. Fiorina, 《多物理场模型降阶在多普勒/中子学反馈中的应用》, 《EPJ 核科学与技术》, 5, 文章编号17（2019年）。[9] P. Behne、 J. Vermaak和 J. C. Ragusa, 《基于扫描的辐射输运的最小侵入式参数化模型降阶》, 《计算物理学杂志》, 111525（2022年）。[10] D. Prill和 A. Class, 《面向未来沸水反应堆稳定性的半自动本征正交分解降阶模型非线性分析》, 《核能年鉴》, 67, 70（2014年）。[11] A. Sartori、 D. Baroli、 A. Cammi、 D. Chiesa、 L. Luzzi、 R. Ponciroli、 E. Previtali、M. E. Ricotti、 G. Rozza和 M. Sisti, 《模态方法与本征

正交分解方法在多群时变反应堆空间动力学中的比较》，《核能年鉴》，71，217（2014年）。[12] L. Soucasse、 A. G. Buchan、 S. Dargaville和 C. C. Pain，《非灰介质辐射传输的角度降阶模型》，《定量光谱学与辐射传输杂志》，229，23（2019年）。[13] Y. Sun、 J. Yang、 Y. Wang、 Z. Li和 Y. Ma，《用于求解核反应堆中子输运问题的本征正交分解降阶模型》，《核能年鉴》，149，107799（2020年）。[14] A. C. Hughes和 A. G. Buchan，《用于玻尔兹曼输运方程角度离散的不连续自适应降阶模型》，《国际工程数值方法杂志》，121，24，5647（2020年）。[15] M. Tano、 J. Ragusa、 D. Caron和 P. Behne，《柱坐标下辐射输运问题的仿射降阶模型》，《核能年鉴》，158，108214（2021年）。[16] C. J. Permann、 D. R. Gaston、 D. Andrš、 R. W. Carlsen、 F. Kong、 A. D. Lindsay、 J. M. Miller、 J. W. Peterson、 A. E. Slaughter、 R. H. Stogner et al.，《MOOSE：实现大规模并行多物理场模拟》，《SoftwareX》，11，100430（2020年）。[17] C. Fiorina、 I. Clifford、 M. Aufiero和 K. Mikityuk，《GeN-Foam：一种基于OpenFOAM® 的新型多物理场求解器，用于核反应堆二维/三维瞬态分析》，《核工程与设计》，294，24（2015年）。[18] S. Chaturantabut 和 D. C. Sorensen，《通过离散经验插值实现非线性模型降阶》，《SIAM科学计算杂志》，32，5，2737（2010年）。[19] B. A. Khuwaileh和 W. A. Metwally，《辐射场剂量映射的高斯过程方法》，《核工程与技术》，52，8，1807（2020年）。[20] P. Baraldi、 F. Mangili和 E. Zio，《基于高斯过程回归的核部件退化建模预测性维护方法》，《核能进展》，78，141（2015年）。

[21] X. Wu 和 T. Kozlowski, “基于多项式混沌代理模型的反应堆模拟逆不确定性量化”, 美国核学会汇刊。美国核学会, 美国路易斯安那州新奥尔良（2016年）。[22] Z. K. Hardy、 J. E. Morel和 C. Ahrens, “次临界金属系统的动态模态分解”, 《核科学与工程》, 193, 11, 1173（2019年）。[23] R. G. McClarren, “利用动态模态分解计算中子输运方程的时间特征值”, 《核科学与工程》, 193, 8, 854（2019年）。[24] A. Di Ronco、 C. Introini、 E. Cervi、 S. Lorenzi、 Y. S. Jeong、 S. B. Seo、 I. C. Bang、F. Giacobbo和 A. Cammi, “熔盐快堆堆芯稳定性分析的动态模态分解”, 《核工程与设计》, 362, 110529（2020年）。[25] M. Abdo、 R. Elzohery和 J. A. Roberts, “基于动态模态分解代理模型的同位素演化建模”, 《核能年鉴》, 129, 280（2019年）。[26] M. Abdo、 R. Elzohery和 J. A. Roberts, “利用动态模态分解分析LRA反应堆基准题”, 《美国核学会汇刊》, 119, 683（2018年）。[27] M. D. McKay、 R. J. Beckman和 W. J. Conover, “一种用于选择计算机程序输出分析中输入变量取值的三种方法比较”, 《技术计量学》, 42, 1, 55（2000年）。[28] S. A. Smolyak, “某些函数类张量积的求积与插值公式”, 《科学院院报》, 第148卷, 1042–1045, 俄罗斯科学院（1963年）。[29] M. Rathinam 和 L. R. Petzold, “重新审视本征正交分解”, 《SIAM数值分析杂志》, 41, 5, 1893（2003年）。[30] J. D. Edwards、 J. E. Morel和 D. A. Knoll, “热辐射扩散的TR/BDF2方法非线性变体”, 《计算物理学杂志》, 230, 4, 1198（2011年）。[31] P. Virtanen、 R. Gommers、 T. E. Oliphant、 M. Haberland、 T. Reddy、 D. Courna-peau、 E. Burovski、 P. Peterson、 W. Weckesser、 J. Bright、 S. J. van der Walt,

M. Brett、 J. Wilson、 K. J. Millman、 N. Mayorov、 A. R. J. Nelson、 E. Jones、R. Kern、 E. Larson、 C. J. Carey、 I. Polat、 Y. Feng、 E. W. Moore、 J. VanderPlas、D. Laxalde、 J. Perktold、 R. Cimrman、 I. Henriksen、 E. A. Quintero、 C. R. Harris、A. M. Archibald、 A. H. Ribeiro、 F. Pedregosa、 P. van Mulbregt和 SciPy 1.0Contributors, "SciPy 1.0: Python科学计算的基础算法", 《自然·方法》, **17**, 261（2020年）; 10.1038/s41592-019-0686-2。

[32] F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort, V. Michel, B. Thirion, O. Grisel, M. Blondel, P. Prettenhofer, R. Weiss, V. Dubourg, J. Vanderplas, A. Passos, D. Cournapeau, M. Brucher, M. Perrot, 和 E. Duchesnay, "Scikit-learn：Python 中的机器学习", 《机器学习研究杂志》, **12**, 2825（2011年）。

[33] A. C. Center, 《基准问题手册，ANL7416-Suppl. 1, 2》, （1977年）。