اعمال روش نیوتن–کریلف برای مدل سازی جریان دوفازی شار رانشی در یک کانال عمودی

حسن اسمعیلی*(۱) ، حسین کاظمی نژاد(۲)، حسین خلفی(۱)، سید محمد میروکیلی(۱) ، عارف رحیمیان(۱)

۱-پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده راکتور و ایمنی هسته ای

۲- پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده کاربرد پرتوها

چکیده: در این مقاله، یک روش عددی بمنظور مدل سازی جریان جوشش زیر سرد در یک کانال عمودی با استفاده از مدل شار رانشی ارئه شده است. سیستم معادلات غیر خطی با روش کاملا ضمنی و با استفاده از روش نیوتن–کریلف مستقل از ژاکوبین (JFNK) حل شده‌اند. بمنظور بهبود کارایی روش JFNK و پایداری عددی، پیش شرط ساز نیمه – ضمنی برپایه فیزیک مسئله پیاده‌سازی شده است. با مقایسه نتایج عددی با نتایج آزمایشگاهی مدل حاضر اعتبار سنجی شده و توافق خوبی بین آن‌ها بدست آمده است. نتایج نشان داده است که آهنگ همگرایی روش JFNK با پیش شرط ساز فیزیکی نیمه ضمنی نسبت به روشJFNK بدون پیش شرط ساز حدود ۵۸ درصد سریع‌تر است. همچنین تعداد تکرارها حدود ۶۲ ٪ کاهش می‌یابد.

کلید واژه‌ها: جریان دوفازی، مدل شار رانشی، روش نیوتن–کریلف

مقدمه:

در بسیاری از سیستم‌های مهندسی پدیده جریان‌های دو فازی به وفور اتفاق می‌افتد. امروزه در بسیاری از کاربردهای صنعتی مدل سازی عددی نقشی حیاتی دارد. به طور خاص در صنعت هسته‌ای برای طراحی و استفاده ایمن از راکتورهای هسته‌ای بهبود روش‌های محاسباتی دقیق و قوی بسیار مهم است. مسائل دو فازی را می‌توان با استفاده از مدل جریان همگن و یا مدل دو سیالی و یا مدل شار رانشی فرمول‌بندی کرد. روابط اصلی در مدل دو سیاله معادله جرم، انرژی و ممنتوم برای هر فاز است. این معادلات در RELAP5 [۲] ارائه شده‌اند. بدلیل پیچیدگی‌های ذاتی مسئله، اعمال مدل دو سیاله برای مدل‌سازی ترموهیدرولیک راکتورهای هسته‌ای بسیار مشکل است. پیچیدگی اعمال مدل دو سیاله را می‌توان بطور قابل ملاحظه‌ای با اعمال مدل شار رانشی برای مدل‌سازی جریان دوفازی، کاهش داد.

در سال‌های اخیر برای حل موثر مسائل بشدت غیرخطی از روش JFNK[1] استفاده می‌شود [۳]. روش JFNK به خودی خود روش موثری نیست. کلید موفقیت روش JFNK استفاده از یک پیش شرط ساز موثر و حدس اولیه خوب است. شیوه‌های مختلفی برای پیش‌شرط سازی روش JFNK وجود دارد که در مرجع [۳] بحث شده‌اند. انتخاب یک پیش شرط ساز مناسب می‌تواند بطور قابل ملاحظه‌ای تعداد زیرفضای کریلف را برای حصول به جواب کاهش دهد. بنابراین زمان محاسبات و همچنین فضای لازم برای ذخیره سازی کاهش می‌یابد.

[1] The Jacobian-free Newton-Krylov (JFNK) method

اخیرا توجه بسیاری به پیش شرط ساز بر پایه فیزیک مسئله معطوف شده است. پیش شرط ساز برپایه فیزیک مسئله[۲] (PBP) بطور معمول با نگاهی به رفتار فیزیکی مسئله و کسب بینشی از آن ایجاد می‌شود. در یک پیش شرط ساز برپایه فیزیک مسئله گفته می‌شود که هر روش حلی که تقریب نزدیکی از پارامترها را در یک گام زمانی بدست بدهد را می‌توان بعنوان پیش شرط ساز مورد استفاده قرار داد. یک پیش شرط ساز بر پایه فیزیک مسئله را می‌توان از جداسازی نیمه‌ضمنی معادلات حاکم بدست آورد [٤]. در این مطالعه، روش کمترین باقیمانده تعمیم یافته[۳](GMRES) [۳] بعنوان روش کریلف برای حل معادلات جریان دوفازی تک بعدی با استفاده از مدل شار رانشی در یک کانال عمودی اعمال شده است. همچنین از حل نیمه‌ضمنی برای پیش شرط سازی روش GMRES استفاده شده است.

توصیف مدل فیزیکی:

معادلات پایستگی حاکم در مدل شار رانشی از معادله جرم، ممنتوم و انرژی مخلوط و معادله پیوستگی فاز گاز تشکیل شده است که به صورت زیر تعریف می‌شوند [۵]:

معادله پیوستگی جرم مخلوط:

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_m v_m)}{\partial z}=0 \tag{۱}$$

معادله پیوستگی فاز گاز:

$$\frac{\partial(\alpha\rho_g)}{\partial t}+\frac{\partial(\alpha\rho_g v_m)}{\partial z}=\Gamma_g-\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\alpha\rho_g\rho_f}{\rho_m}\overline{V_{gi}}\right) \tag{۲}$$

معادله ممنتوم مخلوط:

$$\rho_m\frac{\partial v_m}{\partial t}+\rho_m v_m\frac{\partial v_m}{\partial z}=-\frac{\partial P}{\partial z}-\rho_m g_z-\frac{\partial}{\partial z}\left[\frac{\alpha\rho_g\rho_f}{(1-\alpha)\rho_m}\overline{V_{gi}}^2\right]-\frac{f_m}{2D}\frac{G_m^2}{\rho_m} \tag{۳}$$

معادله انرژی مخلوط:

$$\frac{\partial(\rho_m h_m)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_m h_m v_m)}{\partial z}=-\frac{\partial}{\partial z}\left[\frac{\alpha\rho_g\rho_f}{\rho_m}\Delta h_{fg}\overline{V_{gi}}\right]+\frac{q''\xi_h}{A}+\frac{\partial P}{\partial t}+\left[v_m+\frac{\alpha(\rho_f-\rho_g)}{\rho_m}\overline{V_{gi}}\right]\frac{\partial P}{\partial z} \tag{٤}$$

در معادلات فوق زیرنویس f, m و g بترتیب بیانگر فاز مخلوط، مایع و گاز هستند.

روش حل عددی:

---

[۲] Physics-based preconditioner (PBP)

[۳] Generalized minimum residual method (GMRES)

در این مطالعه روش حجم محدود برای جداسازی فضایی معادلات حاکم بر روی شبکه جابجا شده اعمال شده است. برای جداسازی فضایی از روش بالادست مرتبه اول و برای جداسازی زمانی از روش اویلر پسرو کاملا ضمنی استفاده شده است. برای محاسبه عبارت‌های مربوط به جابجایی از روش مرتبه اول بالادست استفاده شده است.

روش نیوتن-کریلف مستقل از ژاکوبین:

جداسازی کاملا ضمنی معادلات (۱) تا (٤) یک سیستم از معادلات غیر خطی را به دست می‌دهد. برای حل معادلات غیر خطی جداسازی شده جریان دوفازی در یک کانال جوشان عمودی از روش JFNK استفاده شده است. برای حل سیستم معادلات غیر خطی به شکل زیر از روش نیوتن استفاده می‌شود [۳]:

$$F(\boldsymbol{x}) = 0. \quad (۵)$$

در این معادله (۱۲)، F باقیمانده غیر خطی و $\boldsymbol{x}$ بردار مجهولات است. برای حل این معادله به روش نیوتن لازم است در هر گام مجموعه‌ای از معادلات خطی تصحیحی به فرم زیر حل شوند:

$$\boldsymbol{J}^k \delta \boldsymbol{x}^k = -F(\boldsymbol{x}^k) \quad (٦)$$

که $\boldsymbol{J}$ ماتریس ژاکوبین و k اندیکس تکرار نیوتن و $\delta \boldsymbol{x}^k$ بردار تصحیح است. معادله خطی (٦) بطور تقریب با استفاده از روش تکرار کریلف GMRES [۳] حل می‌شود. انتظار می‌رود که با استفاده از یک پیش شرط ساز، همگرایی الگوریتم GMRES سریع‌تر باشد. بنابراین برای رسیدن به جواب، به تعداد کمتری تکرار کریلف نیاز است که این امر تاثیر زیادی در بهبود اقتصاد محاسبات دارد.

بمنظور بهبود کارایی و آهنگ همگرایی روش حل، می‌توان بجای حل سیستم معادلات خطی (٦) سیستم معادلات خطی با پیش شرط ساز راست را حل کرد. استفاده از پیش شرط ساز راست را می‌توان بصورت زیر نوشت:

$$\boldsymbol{J}^k \boldsymbol{P}^{-1} \boldsymbol{P} \ \delta \boldsymbol{x}^k = -F(\boldsymbol{x}^k) \quad (۷)$$

که $\boldsymbol{P}$ ماتریس پیش شرط ساز است. در واقع $\boldsymbol{P}^{-1}$ تقریب ماتریس $\boldsymbol{J}^{-1}$ می باشد. در این مقاله، $\boldsymbol{P}$ ماتریس پش شرط سازی است که در ضمیمه الف تعریف و محاسبه می‌شود. ماتریس جدید بصورت زیر خواهد بود:

$$\boldsymbol{J}' = \boldsymbol{J}\boldsymbol{P}^{-1} \ \ \& \ \ \delta \boldsymbol{x}' = P \ \delta \boldsymbol{x} \quad \Rightarrow \ \boldsymbol{J}' \ \delta \boldsymbol{x}'^k = -F(\boldsymbol{x}^k) \quad (۸)$$

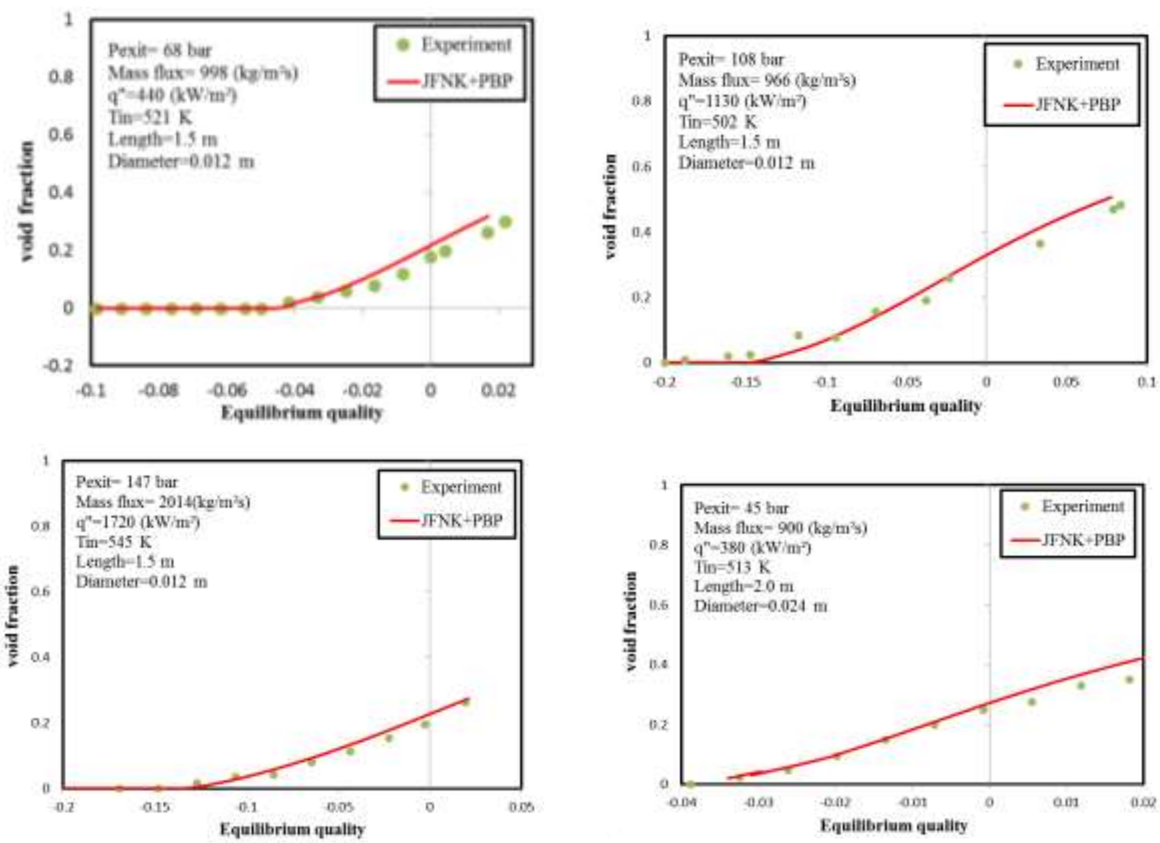
سرانجام، بردار $\delta \boldsymbol{x}^k$ در یک فرایند تکرار از روش GMRES بصورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\delta \boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{P}^{-1} \delta \boldsymbol{x}'^k \quad (۹)$$

در این مقاله از شکل دلتای معادلات نیمه‌ضمنی بعنوان PBP نیمه ضمنی برای پیش شرط سازی حلگر با روش کریلف یعنی GMRES استفاده شده است. این معادلات را می‌توان با روش حل عددی نیمه‌ضمنی [٦] حل کرد و سپس از این حل بعنوان پیش شرط ساز و همچنین حدس اولیه تکرارهای روش نیوتن کریلف استفاده نمود. لازم به یادآوری است که در هر گام زمانی ماتریس پیش شرط ساز تنها یک بار محاسبه می‌شود. در این پژوهش، شرایط مرزی اعمال شده شامل دما و شار جرمی ورودی و فشار در خروجی است.

نتایج عددی:

زمانی که یک روش عددی جدید پیشنهاد می‌شود یک روش ایده‌ال و محبوب، اعتبارسنجی نتایج عددی با داده‌های آزمایشگاهی است. به منظور تایید قابلیت‌های مدل حاضر و صحت‌سنجی عددی و اعتبارسنجی کد، مدل حاضر به چهار حالت تجربی مختلف از سری آزمایش‌های بارتولومی [۷] اعمال می‌شود. آزمایش‌های بارتولومی [۷] گستره وسیعی از شرایط را پوشش می‌دهند. معمولا برای اعتبارسنجی مدل‌های پیشنهادی برای مدل‌سازی جریان دوفازی زیرسرد در یک کانال عمودی از داده‌های تجربی بارتولومی استفاده می‌شود.



شکل (۱): مقایسه بین نتایج عددی و داده های تجربی

هدف از صحت‌سنجی عددی، مطالعه اثر روش جداسازی فضایی بالا دست مرتبه اول روی نتایج حاصل از مدل‌سازی عددی است. در حالت کلی، صحت سنجی عددی را می‌توان با بررسی آهنگ همگرایی روش‌های گسسته سازی زمانی و مکانی انجام داد. در آنالیز عددی، سرعتی که با آن همگرایی به سمت حد خود میل می‌کند، آهنگ همگرایی نام دارد. در حالت گذرا نمونه با فشار خروجی ۱۰۸ بار، به عنوان نمونه مرجع با تعداد حجم کنترل‌های مختلف مدل می‌شود. در این مدل‌سازی تعداد سلول‌ها از ۵ تا ۸۰ تغییر می‌کنند. نرم یک خطا یا نرم L-1 و آهنگ همگرایی فضایی به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$L_1 = \Delta z \sum_{i=1}^{N} \left| \alpha_{num,i} - \alpha_{ref,i} \right| \qquad (۱۰)$$

$$r = \frac{\log\left[L_{1,fine} / L_{1,coarse} \right]}{\log\left[\Delta z_{fine} / \Delta z_{coarse} \right]} \qquad (۱۱)$$

که L_1 بیانگر نرم یک خطا L-1 بین نتایج عددی مش‌بندی درشت و ریز و r آهنگ همگرایی فضایی است. زیرنویس ‘ref’ و‘fine’ و ‘coarse’ به ترتیب مشخص کننده حل مرجع، حل با مش ریز و حل با مش درشت هستند. نرم یک خطا یا نرم L-1 و آهنگ همگرایی فضایی کسر بخار حاصل از تعداد مش‌های مختلف در جدول ۱ خلاصه شده‌اند. همانطور که انتظار می‌رفت، برای روش بالادست که در این مقاله مورد استفاده قرار گرفت، آهنگ همگرایی حدود یک است.

جدول (۱): آهنگ همگرایی فضایی و نرم خطای L-1 برای حالت ۱۵

تعداد سلول	dz(m)	L-1 norm error (α)	آهنگ همگرایی
۵	۰/۳	۰/۰۵۳۴	۰/۸۲۳۵
۱۰	۰/۱۵	۰/۰۳۰۲	۰/۹۴۶۱
۲۰	۰/۰۷۵	۰/۰۱۵۷	۱/۱۴۳۵
۴۰	۰/۰۳۷۵	۷/۰۷۶۰e-۳	۱/۳۲۶۸
۸۰	۰/۰۱۸۷۵	۲/۸۲۰۸e-۳	-

عملکرد کلی عددی با توجه به زمان CPU در جدول ۲ و ۳ ارائه شده است. جدول ۲ نشان می‌دهد که روش JFNK با پیش شرط ساز PBP نیمه ضمنی ارائه شده در این مطالعه (JFNK+PBP) نسبت به JFNK بدون پیش شرط ساز، زمان CPU کمتری دارد این نتیجه نشان می‌دهد که JFNK+PBP نسبت به JFNK آهنگ همگرایی بیشتری دارد.

جدول (۲): زمان CPU برای حالت ۱۵ برای تعداد گره های مختلف

ردیف	روش	زمان CPU (s)				
		۵ گره	۱۰ گره	۲۰ گره	۴۰ گره	۸۰ گره
۱	JFNK	۰/۲۶۱۱	۰/۴۲۳۲	۰/۵۳۱۲	۰/۷۴۱۶	۰/۹۵۶۵
۲	JFNK + PBP	۰/۱۲۱۸	۰/۱۹۶۶	۰/۲۲۳۱	۰/۳۶۸۲	۰/۵۴۲۱

مزایای استفاده از پیش شرط ساز PBP برای کاهش میانگین تعداد تکرارها در هر گام زمانی و زمان CPU کمتر برای حل معادلات غیر خطی در جدول ۳ آورده شده است. جدول ۳ نشان می‌دهد که سرعت همگرایی روش JFNK+PBP نسبت به JFNK حدود ۵۸ درصد بیشتر است.

جدول(۳): تعداد تکرارها و زمان CPU برای حالت ۱۵

ردیف	روش	تعداد تکرارها	CPU (s)	تفاضل نسبی در CPU (٪)
۱	JFNK	۸	۰/۵۳۱۲	-
۲	JFNK + PBP	۳	۰/۲۲۳۱	۵۸

بحث و نتیجه‌گیری:

شبیه سازی جریان دو فاز یک موضوع اساسی از نظر ایمنی و بهره‌برداری از راکتورهای هسته‌ای است. به منظور بهبود روش‌های فعلی و روش‌های مورد استفاده برای شبیه‌سازی ترموهیدرولیک، تحقیقات گسترده‌ای صورت گرفته است. در این مقاله، روش نیوتن کریلف مستقل از ژاکوبین با پیش شرط ساز PBP نیمه‌ضمنی برای حل مسئله جریان دوفازی تک بعدی در یک کانال عمودی ارایه شده است. با مقایسه نتایج عددی با نتایج آزمایشگاهی مدل حاضر اعتبار سنجی شده و توافق خوبی بین آن‌ها بدست آمده است. آهنگ همگرایی روش JFNK با پیش شرط ساز فیزیکی نیمه ضمنی نسبت به روشJFNK بدون پیش شرط ساز حدود ۵۸ درصد سریع‌تر است. همچنین تعداد تکرارها حدود ٦٢ ٪ کاهش می‌یابد.

منابع

[١] Todreas, N.E., Kazimi, M.S., 1990. Nuclear Systems. I. Thermal Hydraulic Fundamentals. MIT, pp. 442–457, 537–546, 605–614.

[٢] ‘‘RELAP5/MOD3.3 Code Manual Volume I’’, NUREG/CR-5535 ed., U.S. Nuclear Regulatory Commission, December, (2001).

[٣] Y. Saad, Iterative Methods for Sparse Linear Systems, second ed., (2003).

[٤] J. Reisner, A. Wyszogrodzki, V. Mousseau, D. Knoll, An efficient physics-based preconditioner for the fully implicit solution of small-scale thermally driven atmospheric flows, J. Comput. Phys. 189 (2003) 30–44.

[٥] L. Zou, H. Zhao, H. Zhang, Numerical implementation, verification and validation of two-phase flow four-equation drift flux model with Jacobian free Newton-Krylov method, Ann. Nucl. Energy 87 (2015) 707-719.

[٦] D. Liles, W. H. Reed, A Semi-implicit Method for Two phase Fluid Dynamics, J. Comput. Phys., 26 (1978) 390-407.
[٧] G.G. Bartolomej, V.G. Brantov, Y.S. Molochnikov, Y.V. Kharitonov, V.A. Solodkij, An experimental investigation of the true volumetric vapor content with subcooled boiling tubes, Therm. Eng. 29 (1982) 132–135.

ضمیمه الف: جزئیات ماتریس پیش شرط ساز $\boldsymbol{P}$ به صورت زیر است:

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{D}_{\rho_m}^{P} & & & \\ \boldsymbol{L}_{v_m}^{P} & \boldsymbol{D}_{v_m}^{v_m} & & \\ \boldsymbol{L}_{h_m}^{P} & \boldsymbol{L}_{h_m}^{v_m} & \boldsymbol{D}_{h_m}^{h_m} & \\ \boldsymbol{L}_{\alpha}^{P} & \boldsymbol{L}_{\alpha}^{v_m} & & \boldsymbol{D}_{\alpha}^{\alpha} \end{bmatrix} \tag{الف-۱}$$

براساس جداسازی نیمه ضمنی معادلات (٤)-(۱) مولفه‌های ماتریس بلوکی بصورت زیر تعیین می‌شوند:

$$D_{\rho_m}^{P}(i,i-1)=\left(\frac{\rho_m B}{\Delta z}\right)_{i-\frac{1}{2}}^{n} \ \& \ D_{\rho_m}^{P}(i,i)=-\left[\left(\frac{\rho_m B}{\Delta z}\right)_{i-\frac{1}{2}}^{n}+\left(\frac{\rho_m B}{\Delta z}\right)_{i+\frac{1}{2}}^{n}\right] \ \& \ D_{\rho_m}^{P}(i,i+1)=\left(\frac{\rho_m B}{\Delta z}\right)_{i+\frac{1}{2}}^{n} \tag{الف-۲}$$

$$L_{v_m}^{P}(i,i+1)=1. \ \& \ L_{v_m}^{P}(i,i)=-1. \ \& \ D_{v_m}^{v_m}(i,i)=\rho_{m_{i+\frac{1}{2}}}^{\ n}\frac{\Delta z}{\Delta t} \tag{الف-۲}$$

$$L_{h_m}^{P}(i,i-1)=\left(\frac{\rho_m h_m B}{\Delta z}\right)_{i-\frac{1}{2}}+\frac{1}{\Delta z}\left[v_m+\frac{\alpha(\rho_f-\rho_g)}{\rho_m}\overline{V_{gi}}\right] \tag{الف-۳}$$

$$L_{h_m}^{P}(i,i)=\frac{-1}{\Delta t}\left(1-h_{m,i}\left(\frac{\partial\rho_m}{\partial P}\right)_i\right)-\frac{1}{\Delta z}\left[v_m+\frac{\alpha(\rho_f-\rho_g)}{\rho_m}\overline{V_{gi}}\right] \tag{الف-٤}$$

$$L_{h_m}^{v_m}(i,i)=\left(\frac{\rho_m h_m}{\Delta z}\right)_{i+\frac{1}{2}} \ \& \ L_{h_m}^{v_m}(i,i-1)=\left(\frac{\rho_m h_m}{\Delta z}\right)_{i-\frac{1}{2}} \tag{الف-۵}$$

$$D_{h_m}^{h_m}(i,i)=\frac{1}{\Delta t}\left[\rho_{m,i}+h_{m,i}\left(\frac{\partial\rho_m}{\partial h_m}\right)_i\right] \tag{الف-٦}$$

$$L_{\alpha}^{P}(i,i)=\left(\frac{\alpha}{\rho_g}\left(\frac{\partial\rho_v}{\partial P}\right)\right)_i\frac{\Delta z}{\Delta t} \tag{الف-۷}$$

$$L_{\alpha}^{v_m}(i,i-1)=-\left(\frac{1}{\rho_g}\right)_i(\alpha\rho_g)_{i-\frac{1}{2}} \ \& \ L_{\alpha}^{v_m}(i,i)=\left(\frac{1}{\rho_g}\right)_i(\alpha\rho_g)_{i+\frac{1}{2}} \ \& \ D_{\alpha}^{\alpha}(i,i)=\frac{\Delta z}{\Delta t} \tag{الف-۸}$$

که $i = 1,\dots, N$ شماره حجم کنترل محوری است. N تعداد کل حجم کنترل محوری است.