参数化高保真模型的快速求解方法

张纯禹*, 吴家桦, 陈威林, 罗秀沁

中山大学中法核工程与技术学院, 珠海 519082

*联系人, E-mail: zhangchy5@mail.sysu.edu.cn

收稿日期: 2018-08-16; 接受日期: 2018-09-19; 网络出版日期: 2019-06-14

国家自然科学基金-广东联合基金超级计算科学应用专项(编号: 20144500031650003)和广东省协同创新与平台环境建设专项(编号: 2015B090901051)资助项目

摘要 基于求解偏微分方程的高保真数值模拟已成为核能创新研究的重要手段. 然而, 即使借助超级计算机, 经典的高分辨率数值方法在处理需要多次求解或需要快速甚至实时求解的问题时仍然面临效率的挑战, 模型降阶是求解这类问题的有效手段. 针对参数化热-力耦合和参数化流动这两类核工程的基本问题, 本文分别归纳和推导了利用缩减基有限元方法和本征正交分解-伽辽金投影方法求解耦合问题和非线性问题的原理和步骤, 并通过 T 型管接头的热应力分布和后台阶流动两个典型算例对建立的降阶模型进行了验证. 结果表明, 在保证精度的前提下, 在线阶段降阶模型的计算效率提升了 3–5 个数量级. 高精度、高效率的模型降阶方法将是数值反应堆技术走向工程应用的重要技术手段.

关键词 有限元, 有限体积, 模型降阶

PACS: 02.30.Jr, 02.70.Dh, 46.15.-x

安全性和经济性是核能持续健康发展的重要保证. 为回答涉及反应堆安全性与经济性的诸多问题, 必须要能对反应堆设备在高温、辐照、腐蚀和机械载荷耦合作用下的行为进行定量、可靠的分析和预测. 为实现这一目标, 多个国家发起了以高分辨率多物理场模拟为主要技术特征的数值反应堆研究计划, 其中最为典型的是欧洲的 NUR 系列计划和美国 CASL 计划. 通过近 10 年持续不断的开发, 基于高保真模拟和高性能计算的数值反应堆已逐渐成型并开始在新一代堆型的研发中发挥重要作用. 然而, 即使借助超级计算机的并行计算能力, 经典的有限元方法、有限体积法和其

他采用高分辨率网格的数值方法在面对需要多次求解(如全堆逐棒(Pin-By-Pin)中子输运计算、全堆高分辨率热工水力计算或源项的反演计算)或需要快速甚至实时求解的问题(如污染物扩散的预测)时仍然面临效率的挑战. 对这些需要多次计算或需要快速计算的应用, 其求解效率必须要有 2–3 个数量级上的显著提升才能满足实际的需求. 尽管近年来计算能力获得了巨大的进步, 但受限于通讯开销, 仅通过并行计算技术还难以获得精细模型实时求解所需的加速效果.

上述需要多次计算或需要快速计算的应用的特点是问题的控制方程不变, 但其物理参数、边界条件甚

引用格式: 张纯禹, 吴家桦, 陈威林, 等. 参数化高保真模型的快速求解方法. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2019, 49: 114605

Zhang C Y, Wu J H, Chen W L, et al. Fast solution methods of parameterized high-fidelity models (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2019, 49: 114605, doi: 10.1360/SSPMA2018-00286

至求解区域等却不断变化. 若将这些变化的系数或条件视为参数, 则可用参数化的控制方程描述这些问题. 加速求解这类问题的最直接手段是应用各种降阶法 (Model Order Reduction, MOR) 降低模型的阶次, 大幅度减少需要求解的未知量个数. 其中缩减基有限元方法 (Reduced Basis Finite Element Method, RB-FEM) 近几年获得了快速的发展^[1,2]. 该方法具有高精度、高效率等优点, 在求解弹性力学问题、传热问题等经典问题上获得了非常成功的应用, 对大规模问题完全实现了实时求解. 在反应堆物理领域, 张纯禹等人^[3,4]利用缩减基有限元方法构建了压水堆中子输运的缩减模型, Sartori 等人^[5]构建了铅冷堆的中子动力学模型, 分别实现了三维堆芯中子输运问题的近实时求解.

除了结构强度和核子输运计算外, 准确地预测冷却剂的温度和流速是反应堆设计的另一项核心任务. 进行全堆高分辨率的热工水力计算需要求解三维 N-S (Navier-Stokes) 方程. 采用缩减基有限元方法对 N-S 方程进行降阶时, 输运项和缩减基函数的内积会导致三线形 (Trilinear) 项的出现, 这给推导模型降阶方法和编制计算程序带来了较大的困难. 此外, 反应堆内冷却剂的流动非常复杂, 一般需要采用流线迎风 Petrov-Galerkin (Streamline Upwind Petrov-Galerkin, SUPG) 格式等具有稳定项的有限元方法, 依赖于局部速度的稳定项给应用缩减基有限元方法带来了更大的困难. 和有限元方法不同, 有限体积法在控制体积内直接对控制方程进行积分, 不需要全局的基函数以及局部的稳定项. 因此, 基于有限体积法的模型降阶方法如本征正交分解方法 (Proper Orthogonal Decomposition, POD) 更合适流动问题的求解^[6,7]. 本征正交分解-伽辽金投影方法^[8] (Proper Orthogonal Decomposition-Galerkin Projection, POD-Galerkin) 结合了经典的 POD 方法和空间投影方法, 因此在数学形式上更为严谨, 在精度上也更有优越性.

如上所述, 单独求解结构强度、固体传热以及中子输运等问题的模型降阶方法研究已经取得了显著的进展. 然而, 如何将模型降阶方法应用于耦合方程和非线性方程的求解仍需深入研究. 本文以参数化热-力耦合问题和参数化流动问题这两个核工程中的基础问题为研究对象, 首先推导热-力耦合问题的缩减基有限元求解方法, 然后介绍本征正交分解-伽辽金投影方法求解 N-S 方程的原理, 最后通过 T 型接头的热应力分布和

后台阶流动两个典型算例对两种方法的精度和效率进行验证.

1 参数化热-力耦合问题和流动问题的快速求解方法

1.1 热-力耦合问题的快速求解

1.1.1 参数化控制方程

不失一般性, 本文仅考虑热-弹耦合问题. 其控制方程为

$$\sigma_{ij,j} + f_i = \rho \ddot{u}_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad x \in \Omega, \quad t \in I, \quad (1)$$

$$\rho c \frac{\partial \theta}{\partial t} + k \Delta \theta + \beta T_0 \dot{\varepsilon}_{ij} = g, \quad x \in \Omega, \quad t \in I, \quad (2)$$

$$\beta = \frac{E \alpha}{1 - 2\nu}, \quad (3)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = u_{i,1} + u_{2,2} + u_{3,3}, \quad (4)$$

并假定各向同性线弹性本构关系:

$$\sigma_{ij} = (\lambda \operatorname{div}(\mathbf{u}) - \beta \theta) \delta_{ij} + G(u_{i,j} + u_{j,i}), \quad (5)$$

其中, $\Omega \in \mathbb{R}^n$ ($n=1, 2, 3$) 为作用域, I 为作用时间段, $\mathbf{u}=(u_1, u_2, u_3)$ 为位移场, θ 为温度, $\mathbf{f}=(f_1, f_2, f_3)$ 为体积力, T_0 为参考温度, g 为体热源, ρ 为密度, c 为比热容, k 为热导率, α 为线性膨胀系数, E 为杨氏模量, ν 为泊松比, λ 和 G 分别为拉梅常数.

考虑到大部分实际问题中材料的热膨胀过程可视为准静态过程, 因此可以忽略式(1)和(2)中的加速度项, 即

$$\sigma_{ij,j} + f_i = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad x \in \Omega, \quad t \in I, \quad (6)$$

$$\rho c \frac{\partial \theta}{\partial t} + k \Delta \theta = g, \quad x \in \Omega, \quad t \in I. \quad (7)$$

此外, 初始条件和热边界条件为

$$\theta(x, y, z, 0) = \theta_0, \quad t = 0, \quad (8)$$

$$\theta(x, y, z, t) = \theta_s, \quad x \in \partial_D \Omega, \quad t \in I, \quad (9)$$

$$k \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial n} \Big|_{\partial_q \Omega} = q(x, y, z, t), \quad x \in \partial_q \Omega, \quad t \in I, \quad (10)$$

$$k \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial n} \Big|_{\partial_h \Omega} = h(\theta + T_0 - T_\infty), \quad x \in \partial_h \Omega, \quad t \in I, \quad (11)$$

其中, θ_s 为已知的边界温度, q 为已知的热流密度, h 为

对流换热系数, T_∞ 为环境温度, $\partial_D \Omega$, $\partial_q \Omega$ 和 $\partial_h \Omega$ 分别为第一类、第二类和第三类边界, 并且 $\partial_D \Omega \cup \partial_q \Omega \cup \partial_h \Omega = \partial \Omega$.

力学边界条件为

$$\sigma_{ij} n_j = t_i, \quad x \in \partial_{t_i} \Omega, \quad t \in I, \quad (12)$$

$$u_i = u_{i0}, \quad x \in \partial_{u_i} \Omega, \quad t \in I, \quad (13)$$

其中, t_i 为已知的边界作用力分量, u_{i0} 为已知位移分量, $\partial_{u_i} \Omega$ 和 $\partial_{t_i} \Omega$ 分别为第一类和第二类边界, 并且 $\partial_{t_i} \Omega \cap \partial_{u_i} \Omega = \emptyset$ 且 $\partial_{t_i} \Omega \cup \partial_{u_i} \Omega = \partial \Omega$.

在热应力计算以及热边界条件的反演等典型核工程问题中, 体热源 g 、边界热流密度 q 、对流换热系数 h 以及环境温度 T_∞ 等条件经常变化, 若将这些物理量视为可变的参数, 上述方程即为参数化的控制方程. 记封闭的参数空间为 $\mathbb{P} = \mathbb{R}^{n_p}$, 其中 n_p 为参数的个数, 参数 $\mu \in \mathbb{P}$ 对应的待求场量记为 $X(\mu)$.

1.1.2 基于仿射分解的降阶有限元模型

定义 $V = \{v \in H^1(\Omega), v|_{\partial \Omega} = 0\}$, 其中 H^1 为 Sobolev 空间. 引入边界条件后的方程(6)和(7)的弱形式为

$$\sum_{j=1}^3 \int_{\Omega} \sigma_{ij} v_i dV = \int_{\partial \Omega} t_i v dS + \int_{\Omega} f_i v dV, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \rho c \frac{\partial \theta}{\partial t} v dV + \int_{\Omega} k \theta v dV \\ &= - \int_{\partial \Omega_q} \frac{q}{k} v dS \\ & \quad - \int_{\partial \Omega_h} \frac{h}{k} (\theta + T_0 - T_\infty) v dS + \int_{\Omega} g v dV, \end{aligned} \quad (15)$$

其中, $\forall v \in V$ 为测试函数, $i=1, 2, 3$.

方程(14)和(15)的近似解可表示为基函数的线性组合:

$$u_i(t) \approx u_{i\delta}(t) = \sum_{j=1}^{N_\delta} u_j^i(t) N_j, \quad (16)$$

$$\theta(t) \approx \theta_\delta(t) = \sum_{j=1}^{N_\delta} \theta_j(t) N_j, \quad (17)$$

其中, $N_j (1 \leq j \leq N_\delta)$ 为形式已知的基函数, u_j^i 和 θ_j 是待求的未知数, N_δ 为基函数的个数.

在经典的 Galerkin 有限元方法中, 测试函数 v_δ 仍采

用同样的基函数进行展开:

$$v_\delta = \sum_{j=1}^{N_\delta} \alpha_j N_j, \quad (18)$$

其中, α_j 为任意的常数. 将式(16)–(18)代入式(14)和(15)并利用 α_j 的任意性, 则可将连续的方程转化为离散的线性方程组:

$$[C]^\mu [\dot{X}]^\mu + [K]^\mu [X]^\mu = [F]^\mu, \quad (19)$$

其中,

$$[X]^\mu = \begin{bmatrix} U_1^\mu \\ U_2^\mu \\ U_3^\mu \\ \theta^\mu \end{bmatrix}, \quad (20)$$

$$[F]^\mu = \begin{bmatrix} F_1^\mu \\ F_2^\mu \\ F_3^\mu \\ F_4^\mu \end{bmatrix}, \quad (21)$$

质量矩阵 $[C]^\mu \in \mathbb{R}^{4N_\delta \times 4N_\delta}$ 、刚度矩阵 $[K]^\mu \in \mathbb{R}^{4N_\delta \times 4N_\delta}$ 以及载荷向量 $[F]^\mu \in \mathbb{R}^{4N_\delta}$ 均和参数 μ 有关, 其具体表达式请见附录.

经典的有限元方法一般采用形式简单但通用的多项式函数作为基函数, 这导致只有采用数量巨大的基函数才能较好地逼近复杂问题的真实解. 为降低问题的自由度, 缩减基有限元方法采用典型参数对应的普通有限元解构造近缩减基空间(构造方法见下节), 即

$$V_{\text{RB}} = \text{span}\{X(\mu_1), \dots, X(\mu_N)\}, \quad (22)$$

其中, N 是缩减基空间中基函数的数目. 为使各个基函数之间的线性无关性, 通常还要采用 Gram-Schmidt 正交化过程对上述基进行处理:

$$V_{\text{RB}} = \text{span}\{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N\}. \quad (23)$$

则采用这种缩减基的近似解可表示为

$$X_{\text{RB}}^\mu = \sum_{j=1}^N X_j^{\text{RB}}(\mu) \xi_j, \quad (1 \leq j \leq N). \quad (24)$$

采用和经典有限元方法同样的步骤, 可将方程(14)和(15)转化为线性方程组:

$$[C]_{\text{RB}}^\mu [\dot{X}]_{\text{RB}}^\mu + [K]_{\text{RB}}^\mu [X]_{\text{RB}}^\mu = [F]_{\text{RB}}^\mu, \quad (25)$$

质量矩阵 $[C]_{\text{RB}}^\mu \in \mathbb{R}^{4N \times 4N}$ 、刚度矩阵 $[K]_{\text{RB}}^\mu \in \mathbb{R}^{4N \times 4N}$ 以及载荷向量 $[F]_{\text{RB}}^\mu \in \mathbb{R}^N$.

通过采用复杂的缩减基函数使得 $N \ll N_\delta$, 线性方程组(25)的求解可以大大加速. 然而, 和作用于局部单元的普通基函数不同, 缩减基函数的作用域为整个求解域, 这导致组装矩阵时的计算量仍然是 $\sim O(N_\delta^2)$. 观察质量矩阵 $[C]^\mu$ 、刚度矩阵 $[K]^\mu$ 以及载荷向量 $[F]^\mu$ 的具体形式(附录)可以发现, 系统矩阵和载荷向量可分解为参数无关部分和参数相关部分(限于篇幅原因, 不再列出每项的具体形式), 即

$$[C]^\mu = \sum_{q=1}^{Q_c} \theta_c^q(\mu) [C_q], \quad (26)$$

$$[K]^\mu = \sum_{q=1}^{Q_k} \theta_k^q(\mu) [K_q], \quad (27)$$

$$[F]^\mu = \sum_{q=1}^{Q_f} \theta_f^q(\mu) [F_q], \quad (28)$$

其中, $\theta_c^q: \mathbb{P} \rightarrow \mathbb{R}$, $\theta_k^q: \mathbb{P} \rightarrow \mathbb{R}$ 和 $\theta_f^q: \mathbb{P} \rightarrow \mathbb{R}$ 仅和参数 $\mu \in \mathbb{P}$ 相关, 而 $[C_q]: \mathbb{V} \times \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}^{4N_\delta \times 4N_\delta}$, $[K_q]: \mathbb{V} \times \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}^{4N_\delta \times 4N_\delta}$ 和 $[F_q]: \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}^{4N_\delta}$ 和 μ 无关.

考虑到缩减基有限元采用的基函数为经典有限元的解:

$$\xi_f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{4N_\delta} b_i^j N_i(\mathbf{x}). \quad (29)$$

因此双线性形式的系统矩阵和线性形式的载荷向量可写为如下形式:

$$[C]_{\text{RB}}^\mu = \mathbf{B}^T [C]^\mu \mathbf{B}, \quad (30)$$

$$[K]_{\text{RB}}^\mu = \mathbf{B}^T [K]^\mu \mathbf{B}, \quad (31)$$

$$[F]_{\text{RB}}^\mu = \mathbf{B}^T [F]^\mu, \quad (32)$$

其中, $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{4N_\delta \times N}$ 为将缩减基映射到经典基上的转换矩阵, $\mathbf{B}(i, j) = b_i^j$. 将式(26)–(28)分别代入式(30)–(32)可得

$$[C]_{\text{RB}}^\mu = \sum_{q=1}^{Q_c} \theta_c^q(\mu) \mathbf{B}^T [C_q] \mathbf{B} = \sum_{q=1}^{Q_c} \theta_c^q(\mu) [C_q]_{\text{RB}}, \quad (33)$$

$$[K]_{\text{RB}}^\mu = \sum_{q=1}^{Q_k} \theta_k^q(\mu) \mathbf{B}^T [K_q] \mathbf{B} = \sum_{q=1}^{Q_k} \theta_k^q(\mu) [K_q]_{\text{RB}}, \quad (34)$$

$$[F]_{\text{RB}}^\mu = \sum_{q=1}^{Q_f} \theta_f^q(\mu) \mathbf{B}^T [F_q] = \sum_{q=1}^{Q_f} \theta_f^q(\mu) [F_q]_{\text{RB}}, \quad (35)$$

其中, $[C_q]_{\text{RB}} \in \mathbb{R}^{4N \times 4N}$, $[K_q]_{\text{RB}} \in \mathbb{R}^{4N \times 4N}$ 和 $[F_q]_{\text{RB}} \in \mathbb{R}^{4N}$ 与参数无关, 因此可以预先计算并存储. 这样对任意的参数 μ , 仅通过简单的代数运算(即 $\theta_c^q(\mu)$, $\theta_k^q(\mu)$ 和 $\theta_f^q(\mu)$)即可快速构造 $[C]_{\text{RB}}^\mu$, $[K]_{\text{RB}}^\mu$ 和 $[F]_{\text{RB}}^\mu$.

从以上推导可见, 控制方程可进行仿射分解是有限元模型可降阶的前提. 借助于方程的仿射分解可使得缩减模型的矩阵组装与载荷向量组装与普通有限元模型的自由度个数 N_δ 无关, 因此缩减基有限元模型的求解效率显著提升. 对不能直接分解的问题, 可采用经验插值^[1,2](Empirical interpolation method, EIM)等数值方法进行近似但仍足够精确的仿射分解.

1.1.3 缩减基空间的构造

选择具有代表性的典型解构造合适的缩减基空间是对参数化模型进行降阶的核心. 本文选择贪婪算法(Greedy Algorithm)以迭代的方式逐步构造缩减基空间.

定义缩减基求解的误差:

$$\|X_{\text{RB}}(\mu) - X_\delta(\mu)_V\| \leq \eta_{\text{en}}(\mu), \quad \forall \mu \in \mathbb{P}. \quad (36)$$

贪婪算法每次迭代都从参数样本中选出利用缩减基有限元求解导致最大误差的参数, 然后计算该样本对应的普通有限元解并将之补充至当前缩减基空间. 通过不断增加缩减基的个数逐步提高缩减基有限元求解的精度, 直至在整个参数空间内的最大求解误差小于设定的容限. 上述整个流程如图1所示. 在第 n 次迭代中, 仅需计算挑选出的第 n 个参数样本对应的普通有限元解, 因此构造缩减基空间的计算量远低于POD方法.

贪婪算法需要从所有的参数样本中选择导致最大求解误差的参数样本, 因此误差的计算是影响缩减基空间构造效率的主要因素. 为保证样本具有足够的覆盖性, 样本空间中的样本个数一般较多. 虽然理论上可以通过求解每个样本参数的高精度解来直接计算缩减基的解的误差, 但这种方法对复杂的大规模问题并

图 1 (网络版彩图) 基于贪婪算法的缩减基空间构造流程图
Figure 1 (Color online) Flowchart of construction of the reduced basis space.

不适用. 现代的缩减基有限元方法通常利用严格的后验误差估算(A Posteriori Error Estimation)来计算缩减基有限元方法的求解误差 $\eta_{\text{en}}(\mu)$. 后验误差估算的核心是利用残差计算误差的上界, 可以证明缩减基方法的求解误差 $\eta_{\text{en}}(\mu)$ 满足^[1]:

$$\eta_{\text{en}}(\mu) = \frac{\|\tilde{r}_\delta(\mu)\|_V}{\alpha_{\text{LB}}^{1/2}(\mu)}, \quad (37)$$

其中, $\|\tilde{r}_\delta(\mu)\|_V$ 为残差的对偶范数, $\alpha_{\text{LB}}(\mu)$ 为双线性形式的强制性常数(Coercivity Constant)的下界, 因此只要求得 $\|\tilde{r}_\delta(\mu)\|_V$ 和 $\alpha_{\text{LB}}(\mu)$ 即可利用式(37)得到缩减基有限元方法的解相对经典有限元方法的解的误差. 由于控制方程中的双线性形式和线性形式均可进行仿射分解, 容易验证残差及其Riesz表示也能进行仿射分解, 因此可采用类似计算系统矩阵和载荷向量的方法预先计算参数无关部分, 然后通过简单的代数运算即可得到任意参数样本对应的残差的对偶范数. 对强制性常数的下界 $\alpha_{\text{LB}}(\mu)$ 有3种常见的快速求解方法. 其中最简单的最小 θ 法: 即选择一个典型的参数作为参考, 通过求解系统矩阵的最小特征值得到对应的参考强制常数, 然后利用最小的 θ_a^q 计算 $\alpha_{\text{LB}}(\mu)$. 这种方法容易实现,

但结果偏保守. 选择多个参数作为参考可以使 $\alpha_{\text{LB}}(\mu)$ 更接近其真实下界, 这种方法称为多参数最小 θ 法. 更精确的方法是将 $\alpha_{\text{LB}}(\mu)$ 的求解视作优化问题, 通过连续约束方法(Successive Constraint Method, SCM)获得目标函数的极小值^[1].

1.2 流动问题的快速求解

1.2.1 控制方程

本文仅考虑不可压缩流体, 其运动控制方程为

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nabla \cdot \nu \nabla \mathbf{u} = -\nabla p, \quad (38)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (39)$$

其中, $\mathbf{u}$ 和 p 分别是流体的速度和压强, ν 是运动学黏度系数. 如果采用有限元方法, 式(38)中的输运项在转换为弱形式后为三线性形式:

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}, \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in V. \quad (40)$$

这给推导其降阶形式带来较大的困难. 而采用有限体积法则不需要引入测试函数, 因此在数学形式上更为简单.

将控制方程(38)在控制体积内进行积分:

$$\int_{V_i} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} dV + \int_{V_i} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} dV - \int_{V_i} \nabla \cdot \nu \nabla \mathbf{u} dV + \int_{V_i} \nabla p dV = 0, \quad (41)$$

其中, V_i 为第 i 个控制体. 利用高斯定理可将在控制体上的积分转化为控制体表面上的积分. 以非线性对流项为例:

$$\begin{aligned} \int_{V_i} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} dV &= \int_{S_i} (\mathbf{dS} \cdot \mathbf{u}_f) \cdot \mathbf{u}_f \\ &\approx \sum_f (\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{u}_f) \cdot \mathbf{u}_f \\ &= \sum_f \mathbf{F}_f \cdot \mathbf{u}_f, \end{aligned} \quad (42)$$

其中, $\mathbf{S}_f$ 为组成控制体的第 f 个表面, $\mathbf{u}_f$ 为该表面中心点上流体的速度, $\mathbf{F}_f = \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{u}_f$ 为通过该表面的质量流量. 若以控制体中心的速度和压力为基本未知量, 则可通过合适的插值算法获得控制体表面中心上的速度和压力, 这样积分形式的控制方程可转化为以控制体中心上的速度和压力为未知量的离散形式:

$$\mathbf{A}\dot{\mathbf{u}}_\delta + \mathbf{B}(\mathbf{u})\mathbf{u}_\delta - \nu \mathbf{C}\mathbf{u}_\delta + \mathbf{D}p_\delta = 0, \quad (43)$$

$$\mathbf{E}\mathbf{u}_\delta = 0, \quad (44)$$

其中, $\mathbf{u}_\delta$ 和 p_δ 分别为控制体中心上的速度和压力, $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$, $\mathbf{D}$ 和 $\mathbf{E}$ 为整体组装后的矩阵, 其具体形式不再列出.

1.2.2 POD-Galerkin方法

和贪婪算法不同, POD方法利用奇异值分解(Singular Value Decomposition, SVD)从不同时刻、不同参数的诸多解映照中筛选出能量最高、最具代表性的模态, 然后通过Gram-Schmidt正交化过程构造作用在整个求解域上的基函数:

$$V_u = [\boldsymbol{\phi}_1, \boldsymbol{\phi}_2, \dots, \boldsymbol{\phi}_u^r] \in \mathbb{R}^{N_u \times N_u}, \quad (45)$$

$$V_p = [\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_p^r] \in \mathbb{R}^{N_p \times N_p}, \quad (46)$$

其中, V_u 和 V_p 分别为速度和压力的缩减基空间, N_u 和 N_p 分别为速度和压力的缩减基的个数. 这样速度和压力的近似解可表示为

$$\mathbf{u}^r \approx \sum_{i=1}^{N_u^r} a_i(t, \mu) \boldsymbol{\phi}_i(\mathbf{x}), \quad (47)$$

$$p^r \approx \sum_{i=1}^{N_p^r} b_i(t, \mu) \chi_i(x), \quad (48)$$

其中, 待求系数 a_i 和 b_i 仅和时间及方程的参数有关.

通过将控制方程投影到缩减基空间:

$$\left\langle \boldsymbol{\phi}_i, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nabla \cdot \nu \nabla + \nabla p \right\rangle_{L^2(\Omega)} = 0, \quad (49)$$

$$\langle \chi_i, \nabla \cdot \mathbf{u} \rangle_{L^2(\Omega)} = 0. \quad (50)$$

可以将偏微分方程转化为以待求的系数为未知量的常微分方程组:

$$\mathbf{A}_i \dot{\mathbf{a}} + \mathbf{B}_i(\mathbf{a})\mathbf{a} - \nu \mathbf{C}_i \mathbf{a} + \mathbf{D}_i \mathbf{b} = 0, \quad (51)$$

$$\mathbf{E}_i \mathbf{a} = 0, \quad (52)$$

其中,

$$\mathbf{A}_{ij} = \langle \boldsymbol{\phi}_i, \boldsymbol{\phi}_j \rangle_{L^2(\Omega)}, \quad (53)$$

$$\mathbf{B}_{ijk} = \langle \boldsymbol{\phi}_i, \nabla \cdot (\psi_j, \boldsymbol{\phi}_k) \rangle_{L^2(\Omega)}, \quad (54)$$

$$\mathbf{C}_{rij} = \langle \boldsymbol{\phi}_i, \Delta \boldsymbol{\phi}_j \rangle_{L^2(\Omega)}, \quad (55)$$

$$\mathbf{D}_{rij} = \langle \boldsymbol{\phi}_i, \nabla \chi_j \rangle_{L^2(\Omega)}, \quad (56)$$

$$\mathbf{E}_{rij} = \langle \chi_i, \nabla \cdot \boldsymbol{\phi}_j \rangle_{L^2(\Omega)}. \quad (57)$$

$\nabla \cdot (\psi_j, \boldsymbol{\phi}_k)$ 用于表示对流项:

$$\begin{aligned} \int_{V_i} (\boldsymbol{\phi}_j \cdot \nabla) \boldsymbol{\phi}_k dV &= \int_{S_i} (d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\phi}_j) \cdot \boldsymbol{\phi}_k \\ &\approx \sum (\mathbf{S}_f \cdot \boldsymbol{\phi}_{j,f}) \cdot \boldsymbol{\phi}_{k,f} \\ &= \sum \psi_{j,f} \cdot \boldsymbol{\phi}_{k,f}. \end{aligned} \quad (58)$$

方程(51)和(52)的自由度为 $N_u + N_p \ll N_\delta$, 因此相比全阶模型其求解效率会有显著的提升.

综上所述可以发现, 无论是缩减基有限元方法还是POD-Galerkin方法, 在求解参数化问题时都可分为离线和在线两个阶段: 离线阶段完成缩减基(模态)空间的构造, 并计算系统矩阵和载荷向量中的参数无关部分; 在线阶段根据离线阶段预先计算和存储的数据, 通过简单的代数运算即可得到任意参数对应的系统矩阵和载荷向量.

2 应用

2.1 热-力耦合问题

2.1.1 问题简介

作为不同管道之间的连接部件, T形管接头(图2)的热应力分布是核电管道的设计中重点校核的对象. 假定其内表面的热流已知, 外表面通过自然对流周围环境进行热交换.

不失一般性, 将所有热学和力学物理量均设为可变的参数, 取值范围见表1. 此外, 假定时间间隔 $I = [0, 30]$, 并且采用时间步长恒定为 $\Delta t = 0.1$ 的时间后差方法.

采用线性六面体单元剖分上述结构, 共生成44000个单元(图3).

2.1.2 降阶模型及计算结果

设定相对误差误差容限为 1×10^{-7} , 采用随机方式生成3000个参数样本. 由于参数多达8个, 通过贪婪算法构建缩减基空间的计算花费约为46 h(Inter®Xeon®

图 2 T形管接头(a)和尺寸(b)
Figure 2 Schematic of T-pipe (a) and the dimensions (b).

表 1 模型参数及取值范围

Table 1 Parameters and the bounds

参数	最小值	最大值
ρc (N mm ⁻² K ⁻¹)	10	30
G (N/mm ²)	3×10^5	4×10^5
λ (N/mm ²)	5×10^5	6×10^5
β (N/mm ²)	10	30
k (N s ⁻¹ K ⁻¹)	0	5
h/k (mm ⁻¹)	10	30
q/k (K/mm)	0	5
$(T_\infty - T_0)h/k$ (K/mm)	100	300

E3处理器, 4GB RAM, 操作系统为Ubuntu虚拟机).

为验证降阶减模型的计算效率和精度, 任意选用一组具有代表性的参数(表2)利用降阶模型进行计算. 分别使用10, 30, 60和100个缩减基函数进行在线阶段的计算, 其相对误差(与普通有限元解对比)如表3所示. 随着所使用的基函数的数量增加, 最大相对误差迅速下降, 充分表明利用后验误差选择基函数的有效性. 借助于缩减基有限元方法在线-离线分解的优良特性,

图 3 T型管接头有限元网格
Figure 3 Finite element mesh of the T-pipe.

表 2 验证参数取值

Table 2 Values of the parameters

参数	最大值
ρc (N mm ⁻² K ⁻¹)	10
G (N/mm ²)	3.8×10^5
λ (N/mm ²)	5.7×10^5
β (N/mm ²)	30
k (N s ⁻¹ K ⁻¹)	1
h/k (mm ⁻¹)	20
q/k (K/mm)	2
$(T_\infty - T_0)h/k$ (K/mm)	200

对任一组物理参数开展在线计算的平均耗时约为 0.0155 s, 而进行普通有限元计算的平均耗时约为 1400 s, 降阶模型在线阶段的计算实现了近90000倍的加速.

2.2 流动问题

2.2.1 问题简介

本节采用标准的后台阶问题(图4)对POD-Galerkin方法的精度和效率进行验证. 可变参数为雷诺数, 其取值范围设为[1, 500]. 模型的左侧入口速度为1 m/s, 右侧为出口, 其他边设为固壁边界条件.

2.2.2 降阶模型及计算结果

随机生成50个雷诺数样本, 进行POD分析后, 速度大小的前6阶模态的累计贡献和空间分布如表4所示. 利用降阶模型, 计算雷诺数为3.5, 35和350时的速度场(图5), 可以发现降阶模型的结果与全阶模型的结果之

表 3 降阶模型的应力结果的相对误差

Table 3 Relative errors by the reduced order models

缩减基个数	Von-Mises应力的相对误差
10
30
60
100

图 4 (网络版彩图)后台阶模型示意图

Figure 4 (Color online) Schematic of the back-step problem.

间的差别很小. 雷诺数为350的降阶模型的结果误差分布见图6, 最大误差均不超过1%. 在充分保证精算精度

图 5 (网络版彩图)不同雷诺数下降阶模型(ROM)和全阶模型(FOM)的速度大小对比

Figure 5 (Color online) Comparison of the velocity magnitudes by the ROM and the FOM at Reynolds number of 3.5, 35 and 350.

的前提下, 降阶模型的计算耗时仅约为全阶模型的0.1%.

3 结论

对需要多次计算或需要快速计算的参数化模型, 缩减基有限元方法是一种高效、精确的求解方法. 通过仿射分解可将问题的求解分为离线阶段和在线阶段: 离线阶段完成参数无关部分的计算, 这个阶段虽然计算量较大, 但仅需运行一次; 在线阶段根据离线阶段

表 4 速度大小前6阶模态的累计贡献及空间分布**Table 4** Cumulative contribution and spatial distribution of the first six modes of the velocity magnitude

模态阶数	累计贡献 (%)	空间分布
1	97.0459
2	99.8497
3	99.9862
4	99.9979
5	99.9996
6	99.9999

图 6 (网络版彩图)雷诺数为350时x, y方向速度分量的误差分布**Figure 6** (Color online) Relative error of the velocity components by the reduced order model at Reynolds number of 350.

预先计算和存储的数据, 通过简单的代数运算即可得到系统矩阵和载荷向量, 同时由于解的自由度已大大减少, 因此可以实现几个数量级的效率提升. 对包含非线性项的参数化N-S方程, 有限体积框架内的本征正交分解-伽辽金投影方法是一种有效的快速求解方法. 利用这两种行之有效的模型降阶方法构建参数化的高保真模型将是数值反应堆技术走向工程应用的重要途径.

参考文献

- Hesthaven J S, Rozza G, Stamm B. Certified Reduced Basis Methods for Parametrized Partial Differential Equations. Cham: Springer, 2016
- Quarteroni A, Manzoni A, Negri F. Reduced Basis Methods for Partial Differential Equations: An Introduction. Cham: Springer, 2016
- Zhang C, Chen G. Fast solution of neutron transport SP_3 equation by reduced basis finite element method. *Ann Nucl Energy*, 2018, 120: 707–714
- Zhang H Y, Chen G. Fast solution of neutron diffusion problem by reduced basis finite element method. *Ann Nucl Energy*, 2018, 111: 702–708
- Sartori A, Cammi A, Luzzi L, et al. A reduced basis approach for modeling the movement of nuclear reactor control rods. *ASME J Nucl Rad Sci*, 2016, 2: 021019
- Holmes P, Lumley J L, Berkooz G. Turbulence, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry. New York: Cambridge University Press, 1996
- Sirovich L. Turbulence and the dynamics of coherent structures. III. Dynamics and scaling. *Quart Appl Math*, 1987, 45: 583–590
- Lorenzi S, Cammi A, Luzzi L, et al. POD-Galerkin method for finite volume approximation of Navier-Stokes and RANS equations. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2016, 311: 151–179

附录

$$(C_{44})_{pl} = \int_{\Omega^e} \rho c N_l N_p dV, \quad (a1)$$

$$(K_{11})_{pl} = \int_{\Omega^e} ((\lambda + 2G)N_{p,1}N_{l,1} + GN_{p,2}N_{l,2} + GN_{p,3}N_{l,3})dV, \quad (a2)$$

$$(K_{22})_{pl} = \int_{\Omega^e} ((\lambda + 2G)N_{p,2}N_{l,2} + GN_{p,1}N_{l,1} + GN_{p,3}N_{l,3})dV, \quad (a3)$$

$$(K_{33})_{pl} = \int_{\Omega^e} ((\lambda + 2G)N_{p,3}N_{l,3} + GN_{p,1}N_{l,1} + GN_{p,2}N_{l,2})dV, \quad (a4)$$

$$(K_{ij})_{pl} = \int_{\Omega^e} \lambda N_{p,i} N_{l,j} + G N_{p,j} N_{l,i} dV, \quad i \neq j, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (a5)$$

$$(K_{i4})_{pl} = - \int_{\Omega^e} \beta N_{l,i} N_{p,i} dV, \quad i = 1, 2, 3, \quad (a6)$$

$$(K_{44})_{pl} = \int_{\Omega^e} k N_{l,j} N_{p,j} dV + \int_{\partial\Omega_h^e} \frac{h}{k} N_{l,i} N_{p,i} dS, \quad (a7)$$

$$(F_i)_p = \int_{\partial\Omega_{t_i}^e} t_i^n N_p dS + \int_{\Omega^e} f_i N_p dV, \quad i = 1, 2, 3, \quad (a8)$$

$$(F_4)_p = - \int_{\partial\Omega_q^e} \frac{q}{k} N_p dS - \int_{\partial\Omega_h^e} \frac{h}{k} (T_0 - T_\infty) N_p dS + \int_{\Omega^e} g N_p dV. \quad (a9)$$

Fast solution methods of parameterized high-fidelity models

ZHANG ChunYu^{*}, WU JiaHua, CHEN WeiLin & LUO XiuQin

Sino-French Institute of Nuclear Engineering and Technology, Sun Yat-Sen University, Zhuhai 519082, China

High-fidelity simulation based on solving partial differential equations has become an indispensable approach in innovative research of nuclear energy. However, due to the prohibitively high computation cost, it is yet unfeasible to run simulations on the whole reactor core level with all the physics resolved on fine meshes, especially in the analysis which need carry out many times of calculations. Model order reduction strategies are promising ways to achieve significant speedups by replacing the original large-scale model by a reduced order model of substantially smaller scale. Two effective model order reduction techniques, i.e., the reduced basis finite element method and the POD-Galerkin method, are studied and applied in the present study to solve the transient thermo-elastic problem and the fluid dynamics problem, respectively. For the former, the boundary conditions, the physical parameters and the body heat source are treated as parameters. The greedy-POD algorithm is applied to construct reduced basis space and the for the latter, the Reynolds number is treated as a parameter. The pure POD method is applied to construct the basis space. During on the online stage, three to five orders of computation speed up has been achieved by using the built reduced order models compared with that by the full order models while the accuracy of the results is well ensured. It is demonstrated that model order reduction techniques will be a practical way to deploy numerical reactors.

finite element method, finite volume method, model order reduction

PACS: 02.30.Jr, 02.70.Dh, 46.15.-x

doi: [10.1360/SSPMA2018-00286](https://doi.org/10.1360/SSPMA2018-00286)