

基于节块展开法的 Jacobian-Free Newton Krylov 联立求解物理-热工耦合问题

周夏峰 李富 郭炯

Jacobian-Free Newton-Krylov based on nodal expansion method for neutronic-thermal hydraulic coupling problem

Zhou Xia-Feng Li Fu Guo Jiong

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 65, 092801 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.092801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.092801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I9>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

蒙特卡罗临界计算全局计数效率新算法研究

[Algorithm researches for efficient global tallying in criticality calculation of Monte Carlo method](#)

物理学报.2016, 65(6): 062801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.062801>

反应堆蒙特卡罗临界模拟中均匀裂变源算法的改进

[Modified uniform-fission-site algorithm in Monte Carlo simulation of reactor criticality problem](#)

物理学报.2015, 64(5): 052801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.052801>

一类广义飞秒脉冲激光对纳米金属传导模型的同伦解法

[Homotopic mapping solving method of transfers model with a class of generalized femtosecond pulse laser for nano metal](#)

物理学报.2014, 63(24): 240201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.240201>

变系数 Whitham-Broer-Kaup 方程组的对称、约化及精确解

[Exact solutions of Whitham-Broer-Kaup equations with variable coefficients](#)

物理学报.2014, 63(20): 200203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.200203>

K(mnp)方程多-Compacton 相互作用的数值研究

[Numerical investigation on the interaction between multi-Compacton of K\(mnp\) equation](#)

物理学报.2014, 63(18): 180206 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.180206>

基于节块展开法的Jacobian-Free Newton Krylov联立求解物理-热工耦合问题^{*}

周夏峰[†] 李富 郭炯

(清华大学核能与新能源技术研究院, 先进核能技术协同创新中心, 先进反应堆工程与安全教育部重点实验室, 北京 100084)

(2015年9月14日收到; 2016年1月10日收到修改稿)

目前反应堆物理热工耦合程序通常采用固定点迭代思路, 这可能导致部分工况收敛速度慢, 甚至出现不收敛的现象, 严重影响了计算效率. 基于此, 本文将高效的粗网节块展开法(NEM)与Jacobian-Free Newton-Krylov(JFNK)方法结合, 成功地开发出了一套新方法NEM_JFNK, 实现了联立求解物理热工耦合问题. 首先将NEM推广到热工问题的求解, 之后使用NEM来离散物理-热工耦合问题的所有控制方程, 使得所有变量都能在粗网格下进行离散, 从而大大减小求解问题的规模; 其次将NEM离散后的方程经过某些特殊的处理, 成功地嵌入JFNK的计算框架, 最终开发出了基于线性预处理的NEM_JFNK, 即LP_NEM_JFNK. 此外, 为了充分利用原有的迭代程序, 避免JFNK残差方程的重新建立, 本文还开发了无需重构残差方程的NEM_JFNK, 即NRC_NEM_JFNK, 并实现“黑箱”耦合. 文中以一维中子-热工模型为例, 给出LP_NEM_JFNK和NRC_NEM_JFNK数学模型, 并对计算结果进行分析. 结果表明: 新方法无论是收敛速度还是计算效率都具有明显优势.

关键词: 节块展开法, Jacobian-Free Newton-Krylov, 物理热工耦合问题, 联立求解

PACS: 28.41.Ak, 02.30.Jr, 02.30.Mv

DOI: 10.7498/aps.65.092801

1 引言

随着核电站设计和安全要求的提高, 需要更加精确的模拟结果, 且反应堆结构复杂、温度变化剧烈, 各个区域之间以及多个物理场之间相互耦合, 要想得到精细的数值结果, 计算量将会大幅增加, 且需要开发新的耦合方法, 这就给数值模拟带来了新的挑战^[1]. 然而, 现有软件通常需要采用较细的网格划分才能达到所需计算精度, 且相互之间的耦合计算采用固定点迭代(fixed-point iteration, FPI)的思路或者各个独立程序通过界面传递耦合参数的方法来完成, 比如文献[2, 3]就采用上述耦合方法. 但该方法可能导致部分工况收敛速度慢, 甚至出现不收敛现象^[4]. 基于此, 需要开发更加高

效、稳定、精确的数值方法.

节块展开法(NEM)能够在粗网下得到精确数值解, 很大程度上提高了计算效率, 其已广泛应用于反应堆物理计算^[5]. 为了充分利用NEM的计算优势, 我们希望将NEM推广到反应堆热工计算^[6], 目的就是为使用NEM来离散物理-热工耦合问题的所有控制方程, 使得所有变量都能在粗网格下进行离散, 大大减小求解问题的规模, 从而提高计算效率. 此外, 为了保证耦合问题的收敛速率, 近年来国际上开始尝试采用Jacobian-Free Newton Krylov(JFNK)来联立求解耦合问题^[7], 同步更新所有物理量. JFNK是一种Newton方法^[8]和Krylov子空间方法(通常为GMRES)的组合方法, 并巧妙地使用差分来近似矩阵-向量乘, 从

^{*} 国家科技重大专项(批准号: ZX06901)、国家自然科学基金(批准号: 11375099)和国家自然科学基金青年科学基金(批准号: 11505102)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: zhou-xf11@mails.tsinghua.edu.cn

而在保证 Newton 方法局部全局收敛特性的同时, 又大大减少了计算量. 但目前在我国核领域对该方法研究仍然较少, 且国内外学者普遍是有限差分法 (FDM) 或者基于有限体积法 (FVM) 的离散格式 [4,7,9] 开展 JFNK 方法的研究. 而基于 NEM 离散格式的 JFNK 尚未见报道. 两者的区别主要在于: 基于 FDM/FVM 的 JFNK 方法的离散变量仅仅是离散网格平均值或者网格点值, 其对应的残差方向很容易通过离散方程得到, 且不同物理场之间耦合项传递的变量也仅仅是网格的平均值或者网格点值, 其处理相对容易; 而基于 NEM 的 JFNK, 其离散变量不仅包含网格的平均值, 还包含各个方向的横向积分变量以及高阶展开系数, 选取哪些变量来建立对应的残差方程, 是需要解决的核心问题之一. 因为选取的变量过多, 对应的残差方程就会多, 计算量相应地增加; 选取的变量少, 计算精度就会下降. 此外, 为了保证耦合问题的计算精度, 针对基于 NEM 的 JFNK 方法, 不同物理场之间的耦合项如何传递高阶展开系数也给残差方程的建立以及计算方法的稳定性带来了新的挑战. 本文研究的核心就是如何将 NEM 和 JFNK 结合, 以保证复杂紧耦合问题的精度、计算效率和收敛性, 从而能够高精度、高效率地得到问题的数值解.

因此, 依据 NEM 和 JFNK 的各自优势, 本文成功地将 NEM 与 JFNK 结合, 开发出一套新方法——NEMJFNK, 即使用 NEM 离散物理-热工耦合问题的所有控制方程, 之后将 NEM 的离散方程嵌入 JFNK 计算框架, 开发出基于线性预处理的 NEM_JFNK(LP_NEM_JFNK), 具体数学模型参见第 2 部分. 此外, 为了充分利用原有迭代程序, 本文还开发了无需重构残差方程的 NEM_JFNK (即 NRC_NEM_JFNK), 见第 3 部分, 且实现了“黑箱”耦合. 不同方法的计算结果及分析见第 4 部分.

2 LP_NEM_JFNK 计算模型

2.1 物理-热工耦合模型

为了更加清楚地介绍 NEM_JFNK, 反映不同层次的方法的组合关系, 而弱化空间离散化的复杂性, 文中采用了一维平板反应堆模型为例进行说明, 并且假定特定流量的流体流过平板反应堆, 带走反应堆产生的热量. 为保证模型具有一定的代表

性, 文中的各个关系式以及控制方程均采用压水堆的典型模型, 如图 1 所示.

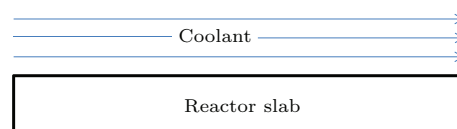


图 1 平板反应堆示意图

Fig. 1. Geometry of reactor slab.

中子控制方程:

$$-D(x) \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \Sigma_a(x) \phi(x) = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \nu \Sigma_f(x) \phi(x), \quad (1)$$

其中, $\phi(x)$ 为中子通量, k_{eff} 为有效增值因子, $D(x)$ 为中子扩散系数, $\Sigma_a(x)$ 为中子吸收截面, $\nu \Sigma_f(x)$ 为中子的 Nu 裂变截面.

此处, 假设反应堆产生的热量瞬间全部传递给流体, 忽略反应堆内的导热和流固界面处的对流换热过程, 也就是说, 反应堆裂变产生的热量直接作为流体控制方程的热源.

流体控制方程:

$$W \frac{dT(x)}{dx} - \frac{\lambda(x) \cdot A}{c_p(x)} \frac{dT(x)}{dx^2} = \frac{S'(x)}{c_p(x)}, \quad (2)$$

其中, W 为质量流量 (已知量); c_p 为比热容; λ 为导热系数; A 为横截面积 (已知量); S' 为热源, 来自于反应堆产生的热量. 方程 (1) 和方程 (2) 的各个参数及变量之间具有复杂的耦合关系, 如下所示:

$$D(x) = D^{\text{ref}} + \frac{\partial \Sigma_a}{\partial \rho} [\rho(x) - \rho^{\text{ref}}], \quad (3)$$

$$\Sigma_a(x) = \Sigma_a^{\text{ref}} + \frac{\partial \Sigma_a}{\partial \rho} [\rho(x) - \rho^{\text{ref}}], \quad (4)$$

$$\nu \Sigma_f(x) = \nu \Sigma_f^{\text{ref}} + \frac{\partial \nu \Sigma_f}{\partial \rho} [\rho(x) - \rho^{\text{ref}}], \quad (5)$$

$$Q_r = \bar{C} \cdot \int \kappa \Sigma_f(x) \phi(x) dx, \quad (6)$$

$$\kappa \Sigma_f(x) = \kappa \Sigma_f^{\text{ref}} + \frac{\partial \kappa \Sigma_f}{\partial \rho} [\rho(x) - \rho^{\text{ref}}], \quad (7)$$

$$S'(x) = \bar{C} \cdot \kappa \Sigma_f(x) \phi(x), \quad (8)$$

其中, 上标 ref 代表耦合问题的参考值, 为已知量; ρ 为流体的密度, Q_r 为整个反应堆的功率 (已知量); $\kappa \Sigma_f(x)$ 为 Kappa 裂变截面; p 为反应堆系统的压力; $\rho(x)$, $\lambda(x)$ 和 $c_p(x)$ 需要根据当时的压力 p 以及温度 $T(x)$, 通过插值表插值得到. 方程 (1)—(8) 就构成了本文的物理热工耦合模型. 由此可见, 各个变量和参数之间具有极其复杂的耦合关系.

2.2 NEM离散方法

NEM的基本思路就是将多维问题通过横向积分技术转化为多个一维问题, 之后将一维问题中的变量进行基函数展开, 各个展开系数通过边界处的通量连续、流连续条件以及 Galerkin 权重残差等式计算得到, 最终形成一系列的离散方程. 各个方向间的一维问题再通过横向泄漏耦合起来. 而本文研究的是一维问题, 所以不需要横向积分技术(但仍按照求解多维问题的框架进行 NEM 离散, 使得推导过程同样适用于多维问题). 在进行 NEM 离散之前, 先将方程 (1) 做如下变化:

$$-D(x)\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \left(\Sigma_a(x) - \frac{1}{k_{\text{eff}}}\nu\Sigma_f(x)\right)\phi(x) = 0. \quad (9)$$

这样处理的原因是: 在传统的 NEM 方法中, k_{eff} 的求解通常采用幂迭代的方法, 即通过不断迭代更新裂变源, 最终达到收敛的目的. 而 JFNK 是一种联立求解方法, 需要同步更新所有变量, 因此为了将 NEM 和 JFNK 结合, 就需要将 NEM 中存在的迭代过程展开, 即方程 (9) 的处理. 但仍需要补充一个 k_{eff} 的控制方程, 此处选取的是文献 [10] 的关系式:

$$-\frac{1}{2}\phi(x)^T\phi(x) + \frac{1}{2} = 0. \quad (10)$$

其中等 (10) 式表达的含义是: 要求通量 $\phi(x)$ 的 2 范数归一. 用 NEM 求解方程时, 计算区域被分为 K 个节块, 节块尺寸为 $[-h_k, h_k]$, $k = 1, \dots, K$. 局部坐标在节块中心, h_k 为节块 k 半宽度, 如图 2 所示.

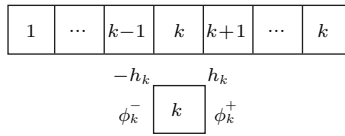


图2 节块划分示意图

Fig. 2. Nodal discretization for the NEM.

之后将方程 (2) 和 (9) 中的 $\phi(x)$, $T(x)$ 和 $S'(x)$ 在节块 k 内用一系列基函数进行展开, 其中 $D(x)$, $\Sigma_a(x)$, $\nu\Sigma_f(x)$, $\lambda(x)$ 和 $c_p(x)$ 分别取节块的平均值 $\bar{D}_k$, $\bar{\Sigma}_{a,k}$, $\nu\bar{\Sigma}_{f,k}$, $\bar{\lambda}_k$ 和 $\bar{c}_{p,k}$.

$$\phi_k(x) = \sum_{n=0}^4 a_n^k f_n^k(x),$$

$$T_k(x) = \sum_{n=0}^4 t_n^k g_n^k(x),$$

$$S'_k(x) = \sum_{n=0}^2 s_n^k f_n^k(x), \quad (11)$$

其中基函数 $f_n^k(x)$ 和 $g_n^k(x)$ 满足的条件以及具体表达式分别见文献 [5, 11]; 展开系数 a_n^k , t_n^k 通过节块 k 的平均值 $\bar{\phi}_k$, $\bar{T}_k$, 节块 k 两边界表达式 $\phi_k^\pm = \phi_k(x = \pm h_k)$, $T_k^\pm = T_k(x = \pm h_k)$, 以及 Galerkin 权重残差等式计算得到:

$$\begin{aligned} a_0^k &= \bar{\phi}_k, \quad t_0^k = \bar{T}_k, \\ a_1^k &= \phi_k^+ - \phi_k^-, \quad t_1^k = T_k^+ - T_k^-, \\ a_2^k &= \phi_k^+ + \phi_k^- - 2\bar{\phi}_k, \quad t_2^k = T_k^+ + T_k^- - 2\bar{T}_k, \\ a_3^k &= \frac{10Pe_k}{60 + Pe_k}a_1^k, \quad t_3^k = \frac{2h_k}{W \cdot \bar{c}_{p,k}}s_1^k, \\ a_4^k &= \frac{35Pe_k}{140 + Pe_k}a_2^k, \\ t_4^k &= \frac{\bar{\lambda}_k A \cdot \left(-t_2^k + \frac{h_k}{3W}s_1^k + \frac{h_k \bar{\lambda}_k \cdot A}{W^2 \bar{c}_{p,k}}s_2^k\right)}{2\bar{c}_{p,k} \left[h_k W - \frac{\bar{\lambda}_k \cdot A}{\bar{c}_{p,k}} \tanh\left(\frac{h_k W \cdot \bar{c}_{p,k}}{\bar{\lambda}_k \cdot A}\right)\right]}, \end{aligned} \quad (12)$$

其中,

$$Pe_k = \frac{4(h_k)^2}{D_k} \left(\bar{\Sigma}_{a,k} - \frac{1}{k_{\text{eff}}} \nu \bar{\Sigma}_{f,k} \right).$$

且根据等式 (8), (11) 和 (12) 可知:

$$\begin{aligned} s_1^k &= \bar{C} \cdot \kappa \Sigma_{f,k} (a_1^k - a_3^k/10) \\ &= \frac{60\bar{C}\kappa\Sigma_{f,k}}{60 + Pe_k} \cdot (\phi_k^+ - \phi_k^-), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} s_2^k &= \bar{C} \cdot \kappa \Sigma_{f,k} (a_2^k - a_4^k/35) \\ &= \frac{140\bar{C}\kappa\Sigma_{f,k}}{140 + Pe_k} \cdot (\phi_k^+ + \phi_k^- - 2\bar{\phi}_k). \end{aligned} \quad (14)$$

由此可见: 所有的展开系数都能表示为关于平均值 $\bar{\phi}_k$, $\bar{T}_k$ 和节块边界值 $\phi_k^\pm$, $T_k^\pm$ 的关系式. 之后通过相邻节块边界值连续和边界流连续, 即可得到关于边界值 ϕ_{k-1}^+ , ϕ_k^+ 和 ϕ_{k+1}^+ 的离散关系式:

$$\begin{aligned} Aw \cdot \phi_{k-1}^+ + Ap \cdot \phi_k^+ + Ae \cdot \phi_{k+1}^+ - Bp \cdot \bar{\phi}_k \\ - Be \cdot \bar{\phi}_{k+1} = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

也可得到关于 T_{k-1}^+ , T_k^+ 和 T_{k+1}^+ 的离散关系式, 并结合 (13) 和 (14) 式, 最终得到以下离散方程:

$$\begin{aligned} Cw \cdot T_{k-1}^+ + Cp \cdot T_k^+ + Ce \cdot T_{k+1}^+ - Dp \cdot \bar{T}_k \\ - De \cdot \bar{T}_{k+1} - Ew \cdot \phi_{k-1}^+ - Ep \cdot \phi_k^+ - Ee \cdot \phi_{k+1}^+ \\ - Fp \cdot \bar{\phi}_k - Fe \cdot \bar{\phi}_{k+1} = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

其中, (15) 和 (16) 式各个项的系数由于文章篇幅有限, 并未给出具体的表达. 此外, 为了求解 (15) 和 (16) 式, 还需要建立平均值 $\bar{\phi}_k$, $\bar{T}_k$ 与节块边界值 $\phi_k^\pm$, $T_k^\pm$ 的额外关系式. 这些关系式通过分别在节块 k 内对方程 (2) 和 (9) 体积平均, 可得到以下离散形式:

$$gl \cdot \phi_k^+ + gr \cdot \phi_{k-1}^+ + G \cdot \bar{\phi}_k = 0, \quad (17)$$

$$ml \cdot T_k^+ + mr \cdot T_{k-1}^+ + nl \cdot \phi_k^+ + nr \cdot \phi_{k-1}^+ + M \cdot \bar{T}_k + N \cdot \bar{\phi}_k = 0. \quad (18)$$

最终将方程 (1) 和 (2) 离散为方程 (15)–(18), 而方程 (3)–(7), (10) 分别离散为以下形式:

$$\bar{D}_k - D^{\text{ref}} - \frac{\partial \Sigma_a}{\partial \rho} (\bar{\rho}_k - \rho^{\text{ref}}) = 0, \quad (19)$$

$$\bar{\Sigma}_{a,k} - \Sigma_a^{\text{ref}} - \frac{\partial \Sigma_a}{\partial \rho} (\bar{\rho}_k - \rho^{\text{ref}}) = 0, \quad (20)$$

$$\nu \bar{\Sigma}_{f,k} - \nu \Sigma_f^{\text{ref}} - \frac{\partial \nu \Sigma_f}{\partial \rho} (\bar{\rho}_k - \rho^{\text{ref}}) = 0, \quad (21)$$

$$Q_r - \bar{C} \cdot \sum_{k=1}^K (\kappa \bar{\Sigma}_{f,k} \bar{\phi}_k) = 0, \quad (22)$$

$$\kappa \bar{\Sigma}_{f,k} - \kappa \Sigma_f^{\text{ref}} + \frac{\partial \kappa \Sigma_f}{\partial \rho} (\bar{\rho}_k - \rho^{\text{ref}}) = 0, \quad (23)$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \bar{\phi}_k \cdot \bar{\phi}_k + \frac{1}{2} = 0. \quad (24)$$

由于 $\rho(x)$, $\lambda(x)$ 和 $c_p(x)$ 可根据当时压力 p 以及温度 $T(x)$ 通过插值表插值得到, 所以不需要离散. 此外离散方程 (1) 和 (2) 已经将方程 (8) 隐式地表达于其中, 即 (13) 和 (14) 式. 所以方程 (8) 也不需要显式离散. 最终 (15)–(24) 式构成了 NEM 最终的离散方程组.

2.3 基于线性预处理的 NEM_JFNK 方法——LP_NEM_JFNK

JFNK 是一种非线性 Newton 方法和 Krylov 子空间方法的组合方法, 即使用 Newton 方法将非线性问题进行局部线性化, 之后采用 Krylov 方法来求解线性化的方程组, 不断更新所求变量, 直到 Newton 步收敛. 但 Krylov 方法通常需要进行预处理, 否则收敛速度会非常的慢, 即

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{-1} \cdot \mathbf{J}\mathbf{a}^k \cdot \delta x^k &= -\mathbf{P}^{-1} \cdot \text{Res}(x^k), \\ x^{k+1} &= x^k + \delta x^k, \end{aligned} \quad (25)$$

其中

$$x^k = [\phi_k^+, \bar{\phi}_k, T_k^+, \bar{T}_k, \bar{C}, \bar{\rho}_k, \bar{D}_k, \bar{\Sigma}_{a,k}, \nu \bar{\Sigma}_{f,k}, \kappa \bar{\Sigma}_{f,k}]^T;$$

$\mathbf{J}\mathbf{a}^k$ 为第 k Newton 步的 Jacobian 矩阵, 显式建立 Jacobian 矩阵会花费大量的时间和精力; $\mathbf{P}$ 为预处理矩阵; $\text{Res}(x^k)$ 为第 k Newton 步残差. 然而 Krylov 方法仅仅需要 Jacobian 矩阵和向量乘, 而不需要 Jacobian 矩阵本身. 因此 JFNK 的一个核心思路就是: 使用有限差分近似 Jacobian 矩阵和向量乘, 而巧妙避免了 Jacobian 矩阵的显式建立:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^{-1} \cdot \mathbf{J}\mathbf{a}^k \cdot \mathbf{v} \\ \approx \frac{\mathbf{P}^{-1} \cdot \text{Res}(x^k + \varepsilon \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{P}^{-1} \cdot \text{Res}(x^k)}{\varepsilon}, \end{aligned} \quad (26)$$

其中, $\mathbf{v}$ 为 Krylov 子空间的基向量; ε 为有限差分近似的微扰量, ε 的选取有很多方法, 本文采用的是文献 [12] 的公式.

```

给定初值迭代值  $x^1$ 
For  $k=1,2,\dots$ , Newton_Steps, Do:
    计算残差方程  $\text{Res}(x^k)$  —— 其为离散关系式((15)–(24))
    的等式左边部分.

    If Newton收敛标准满足, break; End if

     $r_0 = -\mathbf{P}^{-1} \text{Res}(x^k)$ ,  $\beta = \|r_0\|_2$ ,  $v_1 = r_0/\beta$ 

    For  $j=1,2,\dots$ , Krylov_steps, Do:
         $w_j = \mathbf{J}\mathbf{a}^k \cdot v_j = \frac{\mathbf{P}^{-1} \cdot \text{Res}(x^k + \varepsilon \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{P}^{-1} \cdot \text{Res}(x^k)}{\varepsilon}$ 

        For  $i=1,2,\dots,j$  Do:
             $h_{i,j} = (w_j, v_i)$ ;  $w_j = w_j - h_{i,j}v_i$ 

        End do

         $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$ , 计算  $\min\|\beta e_1 - H_m y\|_2$ 

        If  $\min\|\beta e_1 - H_m y\|_2 \leq \text{收敛标准}$ ,  $m=j$ , break; End if

         $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$ 

    End do

     $y_m = \min_y\|\beta e_1 - H_m y\|_2$ ,  $\delta x^k = V_m y_m$ ,  $x^{k+1} = x^k + \delta x^k$ 

End do
    
```

图3 LP_NEM_JFNK 计算流程图

Fig. 3. Calculation flow diagram.

由 (25) 和 (26) 式可知: JFNK 方法中一个主要任务是建立残差方程 $\text{Res}(x^k)$. 而 NEM_JFNK 的核心就是: 残差方程 $\text{Res}(x^k)$ 由 NEM 的离散方程得到. 为了将 NEM 和 JFNK 结合, 已在 2.2 节中对 NEM 做了特殊处理. 此处 $\text{Res}(x^k)$ 为离散关系式 (15)–(24) 的左边部分. 此外, 由于本文 NEM_JFNK 中的预处理矩阵 $\mathbf{P}$ 是针对线性方程

组求解而构造的, 因此我们称该方法为基于线性预处理的NEM_JFNK, 即LP_NEM_JFNK. 其计算的基本流程如图3所示.

3 无须重构残差方程的NEM_JFNK方法——NRC_NEM_JFNK

为了得到NEM_JFNK的残差方程 $Res(x^k)$, 需要对原有NEM方法做特殊处理, 并且最终需要显式表达各个变量之间的离散关系式. 对于原有的NEM程序, 要想将NEM和JFNK结合起来, 实现NEM_JFNK联立求解物理热工耦合问题, 则需要对代码的框架和细节非常了解, 且需要对代码有较大的改动量. 那么我们能否尽可能地不改动原有代码, 或者说根本不需要知道原有代码的具体细节, 就能将NEM和JFNK结合, 实现NEM_JFNK呢? 也就是“黑箱”耦合. 基于此, 本文开发了无须重构残差方程的NEM_JFNK方法——NRC_NEM_JFNK, 来实现所谓的“黑箱”耦合.

原有的耦合程序都采用FPI的思路, 例如: 对于一个非线性方程 $0 = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$, 矩阵 $\mathbf{A}$ 和向量 $\mathbf{b}$ 均与所求变量 $\mathbf{x}$ 相关. FPI思路就是把 $\mathbf{A}$ 分为两个矩阵 $\mathbf{M}$ 和 $\mathbf{N}$, 即

$$\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}, \quad (27)$$

$$0 = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} \Leftrightarrow \mathbf{M} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{N} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{x}^p = \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{N} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b}), \quad (28)$$

其中 $\mathbf{x}^p$ 就是原有程序输出的结果. 对于残差方程 $Res(\mathbf{x}) = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$, 结合(27)和(28)式可得:

$$\begin{aligned} & \mathbf{M}^{-1}Res(\mathbf{x}) \\ &= \mathbf{M}^{-1}[\mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}] \Leftrightarrow \mathbf{M}^{-1}Res(\mathbf{x}) \\ &= \mathbf{M}^{-1}[\mathbf{N} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{b}] - \mathbf{x} \Leftrightarrow \mathbf{M}^{-1}Res(\mathbf{x}) \\ &= \mathbf{x}^p - \mathbf{x}. \end{aligned} \quad (29)$$

同理可得:

$$\begin{aligned} & \mathbf{M}^{-1}Res(\mathbf{x} + \varepsilon \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{x}^{p\varepsilon\mathbf{v}} - (\mathbf{x} + \varepsilon \cdot \mathbf{v}), \quad (30) \\ & \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{J}\mathbf{a} \cdot \mathbf{v} \\ & \approx \frac{\mathbf{M}^{-1}Res(\mathbf{x} + \varepsilon \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{M}^{-1}Res(\mathbf{x})}{\varepsilon} \\ &= \frac{\mathbf{x}^{p\varepsilon\mathbf{v}} - (\mathbf{x} + \varepsilon \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{x}^p + \mathbf{x}}{\varepsilon} \\ &= \frac{\mathbf{x}^{p\varepsilon\mathbf{v}} - \mathbf{x}^p}{\varepsilon} - \mathbf{v}, \end{aligned} \quad (31)$$

其中 $\mathbf{x}^p$ 和 $\mathbf{x}^{p\varepsilon\mathbf{v}}$ 分别为原程序在输入为 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{x} + \varepsilon \cdot \mathbf{v}$ 时的输出结果. 由(31)式可知: 此处只需要知道原有程序的输出结果, 并不需要知道程序是如何计算得到的, 从而实现了“黑箱”耦合. 此外, $\mathbf{J}\mathbf{a}^k \cdot \mathbf{v}$ 前面多了一项 $\mathbf{M}^{-1}$, 相当于对Krylov方法进行了左预处理, 由于 $\mathbf{M}$ 是 $\mathbf{J}\mathbf{a}^k$ 的一种合理近似, 所以这样的预处理反而会加速Krylov的收敛速度.

4 数值结果及分析

本文分别采用FPI法, LP_NEM_JFNK法以及无须重构残差方程的NRC_NEM_JFNK法计算文中的一维物理-热工耦合问题, 并对比各个方法的数值结果及效率. 该耦合问题的所有参数均采用典型的压水堆参数^[13]. 图4给出了不同方法计算的平均通量 $\bar{\phi}$ 、热功率 S' 、流体温度 $\bar{T}$ 、流体密度 $\bar{\rho}$ 、扩散系数 $\bar{D}$ 、吸收截面 $\bar{\Sigma}_a$ 、Nu裂变截面 $\nu\bar{\Sigma}_{f,k}$ 、Kappa裂变截面 $\kappa\bar{\Sigma}_f$ 的数值分布. 图中各个方法的数值结果完全一致, 由此可见开发的方法和程序的正确性.

为了对比三种方法的收敛特性, 此处的收敛准则为

$$\begin{aligned} & RMS_k / RMS_0 < 10^{-6}, \\ & RMS_k = \sqrt{\|Res_k\|_2 / N}, \end{aligned} \quad (32)$$

其中, RMS_k 为第Newton步的均方根误差, Res_k 为第Newton步的残差, N 为残差方程的个数. 图5给出了三种方法的收敛情况. 则LP_NEM_JFNK和NRC_NEM_JFNK的收敛速率明显高于FPI的收敛速率. 其中LP_NEM_JFNK的收敛速率最快. 为了比较LP_NEM_JFNK和NRC_NEM_JFNK每个Newton中线性方程组求解的收敛特性, 图6给出了两种方法对应每个Newton步中GMRES的迭代次数. 由图可知: LP_NEM_JFNK的GMRES的收敛速率明显高于NRC_NEM_JFNK. 表1给出了三种方法的整体数值特性, 可知LP_NEM_JFNK的收敛速率最快, 花费的时间最少, 其数值特性最优; 数值特性最差的是FPI, 其迭代次数明显多于其他两种方法, 这是造成效率降低的主要原因. NRC_NEM_JFNK的收敛速率以及计算效率虽然没有LP_NEM_JFNK那么突出, 但同样优于

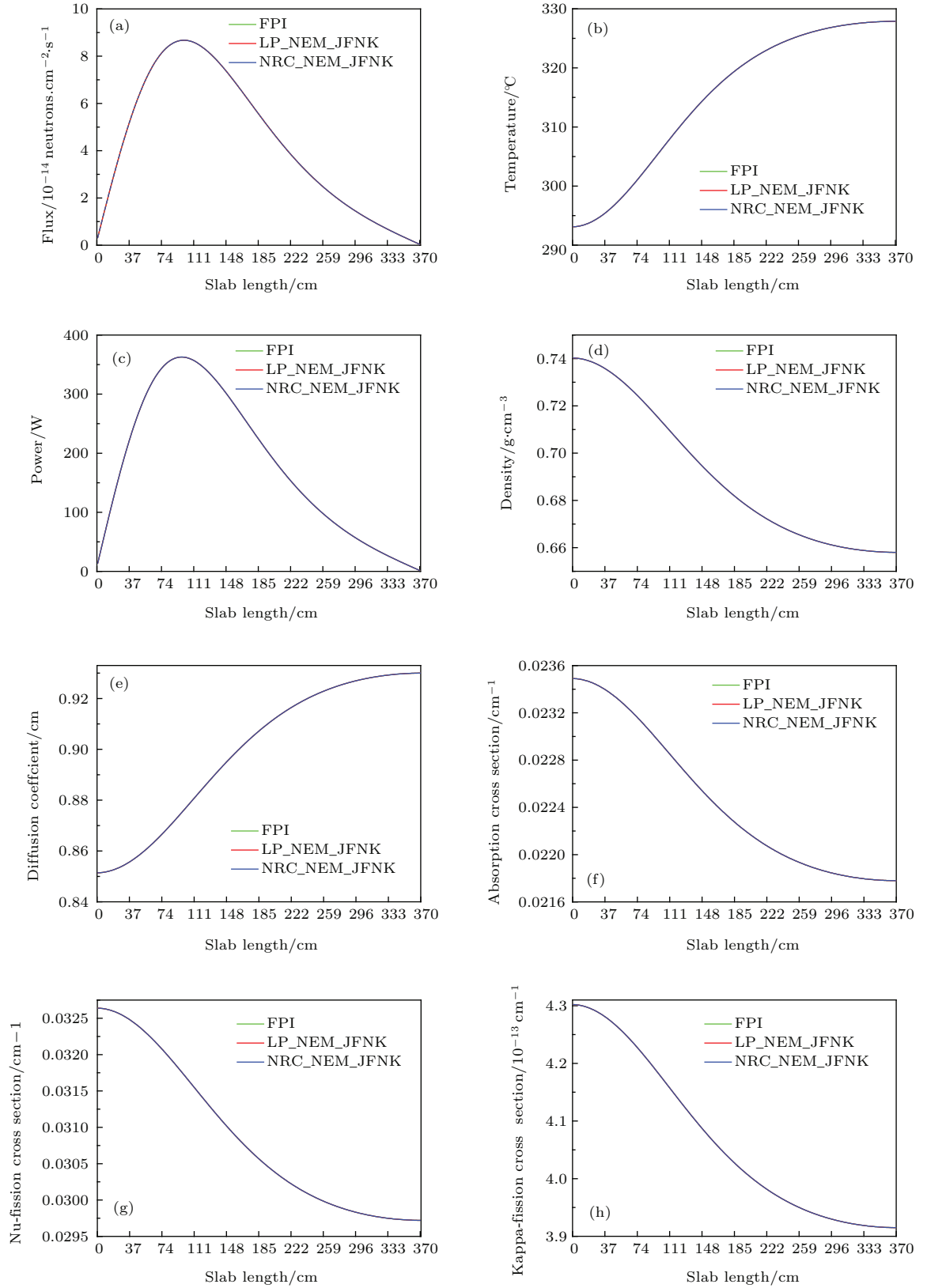


图4 (网刊彩色) 求解变量的数值解 (a) 平均通量 $\bar{\phi}$; (b) 流体温度 $\bar{T}$; (c) 热功率 S' ; (d) 流体密度 $\bar{\rho}$; (e) 扩散系数 $\bar{D}$; (f) 吸收截面 $\bar{\Sigma}_a$; (g) Nu 裂变截面 $\nu \bar{\Sigma}_{f,k}$; (h) Kappa 裂变截面 $\kappa \bar{\Sigma}_f$

Fig. 4. (color online) Numerical solution of variables: (a) Flux $\bar{\phi}$; (b) temperature $\bar{T}$; (c) thermal power S' ; (d) density $\bar{\rho}$; (e) diffusion coefficient $\bar{D}$; (f) absorption cross section $\bar{\Sigma}_a$; (g) Nu-fission cross section $\nu \bar{\Sigma}_{f,k}$; (h) Kappa-fission cross section $\kappa \bar{\Sigma}_f$.

FPI法, 其最大的优点就是可以实现黑箱耦合, 不需要了解原有代码的具体细节, 几乎不改动原有代码即可实现NEM和JFNK的结合, 从而提高计算效率.

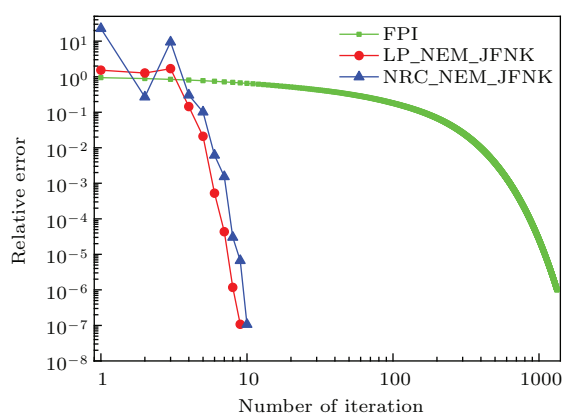


图5 (网刊彩色) 收敛特性对比

Fig. 5. (color online) Comparison of convergence property.

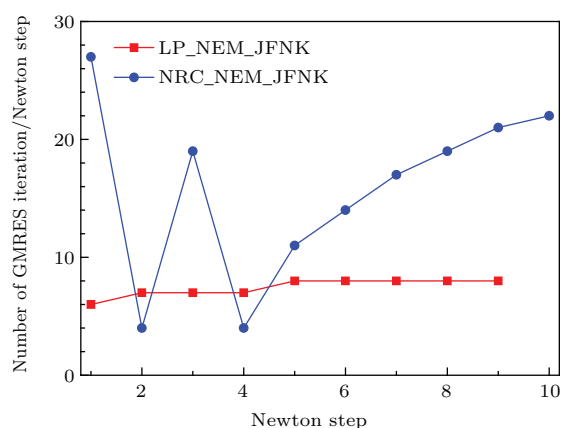


图6 (网刊彩色) 每个Newton步对应的GMRES迭代次数

Fig. 6. (color online) Comparison of iterative number for GMRES/Newton step.

表1 三种方法性能对比

Table 1. Performance comparison of three methods.

耦合方法	整体迭代次数	平均GMRES次数/Newton	时间 /s
FPI	1329	—	33.24
LP_NEM_JFNK	9	7.44	10.15
NRC_NEM_JFNK	10	15.80	12.12

5 总结

本文针对目前物理热工耦合程序中可能存在的收敛速度慢、计算效率低的现象, 把

高效的NEM与JFNK方法结合, 成功地开发出了一套新方法, 即NEM_JFNK. 在文中具体体现为基于线性预处理的NEM_JFNK方法——LP_NEM_JFNK和无需重构残差方程的NEM_JFNK方法——NRC_NEM_JFNK, 实现了联立求解物理热工耦合问题. 计算结果表明: 两种新方法的收敛速率和计算效率都明显优于传统的耦合计算方法. 其中LP_NEM_JFNK的效果最好, 而NRC_NEM_JFNK的计算效率虽然没有LP_NEM_JFNK那么突出, 但同样优于传统的耦合计算方法. 不过LP_NEM_JFNK最大的优点是其提供了一种黑箱耦合的思路, 我们不需要了解原有代码的具体细节, 几乎不需要改动原有代码, 即可实现NEM和JFNK的结合, 从而提高计算效率. 下一步工作是把该方法用于求解多维问题以及更实际的工程问题, 发现其中存在的新问题, 并做相应的改进.

参考文献

- [1] Ivanov K, Avramova M 2007 *Ann. Nucl. Energ.* **34** 501
- [2] Yin P F, Zhang R, Xiong J T 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 018102 (in Chinese) [殷鹏飞, 张蓉, 熊江涛 2013 物理学报 **62** 018102]
- [3] Nie T, Liu W Q 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 184401 (in Chinese) [聂涛, 刘伟强 2012 物理学报 **61** 184401]
- [4] Hooper R, Hopkins M, Pawlowski R, Carnes B, Harry K. M 2010 *Final Report on LDRD Project: Coupling Strategies for Multi-Physics Applications* (New Mexico: Sandia National Laboratories) p11
- [5] Lawrence R D 1986 *Prog. Nucl. Energ.* **17** 271
- [6] Zhou X F, Guo J, Li F 2015 *Nucl. Eng. Des.* **295** 567
- [7] Knoll D, Keyes D 2004 *J. Comput. Phys.* **193** 357
- [8] Wang Y, Wu W F, Fan Z 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 154303 (in Chinese) [王燕, 吴文峰, 范展 2014 物理学报 **63** 154303]
- [9] Zhang H 2015 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Tsinghua University) (in Chinese) [张汉 2015 博士学位论文 (北京: 清华大学)]
- [10] Gill D F 2009 *Ph. D. Dissertation* (Pennsylvania: Pennsylvania State University)
- [11] Zhou X F, Guo J, Li F 2016 *Ann. Nucl. Energ.* **88** 118
- [12] Brown P N, Saad Y 2004 *SIAM J. Sci. Comput.* **193** 357
- [13] Herman B Jacobian-Free Newton-Krylov Methods for Solving Nonlinear Neutronics/Thermal Hydraulic Equations https://github.com/bhermanmit/JFNK/blob/master/doc/writeup/JFNK_BRH.pdf [2015-09-14]

Jacobian-Free Newton-Krylov based on nodal expansion method for neutronic-thermal hydraulic coupling problem^{*}

Zhou Xia-Feng[†] Li Fu Guo Jiong

(Institute of Nuclear and New Energy Technology, Collaborative Innovation Center of Advanced Nuclear Energy Technology, Key Laboratory of Advanced Reactor Engineering and Safety of Ministry of Education, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 14 September 2015; revised manuscript received 10 January 2016)

Abstract

The traditional fixed-point iteration method is typically used for neutronics/thermal-hydraulics coupling problems in most nuclear safety analysis codes. But the fixed-point iteration method has a tendency to fail to be used in computing the coupling problems due to slow convergence rate in some cases and even no convergence, and thus resulting in a limited efficiency, especially for the tight-coupling and fast-transient problems. In addition, for the reactor thermal-hydraulic calculation, the traditional finite difference or volume method (FDM or FVM) is used. However, both FDM and FVM require fine mesh size to achieve the desired precision and thus also result in a limited efficiency for the large scale problems. In this paper, to ensure the accuracy, efficiency and convergence for large-scale and complicated coupling problems, the new methods-NEM_JFNK are successfully developed to simultaneously solve the neutronics /thermal-hydraulics coupling problems by combining the advantage of the efficient coarse nodal expansion method (NEM) and Jacobian-Free Newton-Krylov method (JFNK).

The NEM has been widely used in the reactor physics analysis due to its high efficiency and accuracy in the reactor physics analysis, and it has proved to be superior to FDM and FVM. To improve the efficiency and accuracy for the large scale problems, the NEM is first extended to thermal hydraulic problems from the reactor physics calculation. Then all the governing equations of the neutronics/thermal-hydraulics coupling problems can be discretized by the NEM and all the variables can be solved on the coarse meshes so that the size of coupling problems is greatly reduced. To ensure the high accuracy for the coupling problems on the coarse meshes, the high-order coefficients in NEM are successfully transferred between the coupling terms by our research. After that, to ensure the convergence of complicated coupling problems, JFNK based on the NEMs needs to be developed. However, the researches of JFNK based on the NEM in reactor analysis are less and the existing JFNK methods are mostly based on FVM or FDM or the finite element method. In this paper, the NEM discretization equations are successfully integrated into the framework of JFNK through the special treatment and the NEM_JFNK with linear-based preconditioner named LP_NEM_JFNK is also successfully developed. In addition, to take advantage of the existing code and avoid the construction of residual formulations, the non-residual construction NEM_JFNK named NRC_NEM_JFNK is presented and the “black-box” coupling method is achieved by NRC_NEM_JFNK so that the existing codes only need the simple modification to achieve the combination of the NEM and JFNK. Numerical results show LP_NEM_JFNK and NRC_NEM_JFNK outperform traditional fixed-point iteration method in the sense of convergence rate and efficiency. Further studies are needed to extend the NEM_JFNK method to the multi-dimensional neutronic/thermal hydraulic coupling problems in the high temperature gas-cooled reactor.

Keywords: nodal expansion method, Jacobian-Free Newton-Krylov, neutronic-thermal hydraulic coupling problems, simultaneous solution methods

PACS: 28.41.Ak, 02.30.Jr, 02.30.Mv

DOI: 10.7498/aps.65.092801

^{*} Project supported by the National Key Technology Research and Development Program of the Ministry of Science and Technology of China (Grant No. ZX06901), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11375099), and the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11505102).

[†] Corresponding author. E-mail: zhou-xf11@mails.tsinghua.edu.cn