

Expansión en Caos Polinómico como método de Cuantificación de la Incertidumbre en simulaciones CFD. Aplicación al benchmark Cold-Leg Mixing de la OECD/NEA

Y. Rivera, J.L. Muñoz-Cobo, C. Berna, A. Escrivá.
Instituto de Ingeniería Energética
Universitat Politècnica de València (UPV)
Camino de Vera s/n, 46022 València (Spain)
Tel: 0034-963879245, Email: yaridu@upv.es

Resumen – En este documento se presenta un estudio de la metodología de cuantificación de la incertidumbre mediante Expansión en Caos Polinómico (PCE por sus siglas en inglés). La teoría presentada es aplicada a un benchmark de la OECD/NEA denominado Cold-Leg Mixing. Este benchmark está basado en la instalación experimental que recibe el mismo nombre y está desarrollada por la Texas A&M University. Se muestran varios estudios de sensibilidad para optimizar el cálculo de la simulación. El modelo de turbulencia utilizado finalmente corresponde a un modelo tipo Large Eddy Simulation. Los resultados de la simulación muestran una buena concordancia con las medidas experimentales, en especial después de aplicar el PCE.

Palabras clave – CFD, Expansión en caos polinómico, cuadratura, colocación, benchmark, OECD/NEA, Cold-Leg Mixing.

1. INTRODUCCIÓN

La cuantificación de la incertidumbre en simulaciones CFD es una tarea muy importante hoy en día ya que nos permite conocer el error en los resultados de nuestra simulación estimando una determinada variabilidad en los parámetros de entrada del código. Existen diversas técnicas para llevar a cabo el cálculo entre los que destacamos el método de Wilks y el Caos Polinómico (PCE).

Desde la OECD/NEA se trabaja para ampliar los conocimientos en cuantificación de la incertidumbre en códigos CFD. El Instituto de Ingeniería Energética participa en el actual benchmark internacional Cold-Leg Mixing, basado en una instalación dirigida por la Universidad de Texas A&M. En dicha instalación se mezclan dos cantidades de agua por diferencia de densidad en una estructura que simula la rama fría y el downcomer de una central nuclear.

El objetivo de este documento es desarrollar una metodología de cuantificación de incertidumbre utilizando Expansión en Caos Polinómico y aplicarlo a las simulaciones basadas en el experimento Cold-Leg Mixing. Los resultados de la simulación en relación al “open test” muestran una buena coherencia con las medidas experimentales. Actualmente se dispone también de los resultados del “blind test” aunque de éstos todavía no se conocen los resultados experimentales.

2. EXPANSIÓN EN CAOS POLINÓMICO

La Expansión en Caos Polinómico o PCE (por sus siglas en inglés *Polynomial Chaos Expansion*) es un método de análisis de la incertidumbre de una determinada variable mediante un conjunto de polinomios. PCE pertenece al conjunto de métodos no intrusivos de cálculo de la incertidumbre en códigos CFD ya que permite llevar a cabo el análisis sin modificar el código utilizado. Esto es una increíble ventaja ya que constantemente crece el número y calidad de los códigos de fluidodinámica computacional comerciales.

La idea principal en la que se basa el Caos Polinómico es la siguiente: proyectar la respuesta de un sistema en una base ortogonal de polinomios. Una vez que se conozcan todos los coeficientes de expansión de los polinomios, se podrá calcular la media y la varianza del sistema. Se define $R(\mathbf{x})$ como la respuesta del sistema que depende de un conjunto n_u de parámetros inciertos de la simulación $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{n_u})$. Cada parámetro incierto lleva asociado una función densidad de probabilidad $p_i(x_i)$. La respuesta del sistema puede expresarse como una combinación lineal de una base ortogonal de funciones $\{\phi_j\}_{j=0}^{\infty}$ (Glaeser and Horst 2008; Askey and Wilson 1985) (3):

$$R(\mathbf{x}) = \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i \phi_i(\mathbf{x}) \quad (3)$$

En la práctica, estas series infinitas son truncadas a determinado orden q que depende del número n_u de parámetros inciertos. El número de términos, tal y como se muestra en (Glaeser and Horst 2008; Askey and Wilson 1985) corresponde a (4):

$$N = \frac{(n_u + q)!}{n_u! q!} \quad (4)$$

Utilizando el truncado de términos, la respuesta puede ser aproximada (5) de la siguiente manera:

$$R(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i \phi_i(\mathbf{x}) \quad (5)$$

Los distintos métodos de resolución de la Expansión en Caos Polinómico se diferencian en la forma de obtención de los coeficientes α_i . Cada uno de los métodos presenta distintas ventajas y limitaciones por lo que deberá elegirse uno atendiendo a cada escenario. Algunos de estos métodos son: muestreo aleatorio, cuadratura de Gauss o regresión lineal.

Una vez obtenidos los coeficientes de la expansión la media y la varianza se calculan fácilmente utilizando las ecuaciones (6) y (7). Estas ecuaciones se deducen utilizando la propiedad de ortogonalidad.

$$\mu = \langle R(\mathbf{x}) \rangle = \alpha_0 \quad (6)$$

$$\sigma^2 = \langle (R(\mathbf{x}) - \mu)^2 \rangle \approx \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i^2 \langle \phi_i^2 \rangle \quad (7)$$

Para seleccionar la base de polinomios se debe considerar la distribución de probabilidad $p_i(x_i)$ de los parámetros inciertos ya que se tiene que satisfacer la propiedad de ortogonalidad. Es por ello que, en primer lugar, se debe conocer el comportamiento de cada parámetro incierto. Este comportamiento se traduce en una distribución de probabilidad determinada que está asociada a un grupo específico de polinomios (Hosder and Walters 2010).

En este documento se presenta únicamente la técnica de cuadratura de Gauss para el cálculo de los coeficientes de expansión debido a que es una metodología muy interesante en determinadas situaciones para cálculos CFD.

3.1. Método de cuadratura de Gauss para resolución de la Expansión en Caos Polinómico

En este método, los coeficientes de expansión son calculados usando la relación:

$$\alpha_i = \frac{\langle R \phi_i \rangle}{\langle \phi_i^2 \rangle} \quad (9)$$

El denominador de la expresión anterior se puede calcular directamente como:

$$\langle \phi_i^2 \rangle = \int_{\mathbf{x}} \phi_i^2(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (10)$$

Por otro lado, los términos $\langle R\phi_i \rangle$ se obtienen utilizando métodos numéricos para evaluar la siguiente integral:

$$\langle R\phi_i \rangle = \int_{\mathbf{x}} R(\mathbf{x})\phi_i(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (11)$$

Cabe destacar que los límites de integración de las expresiones (10) y (11) dependen directamente del rango de soporte correspondiente a cada variable incierta. Como se mencionó previamente, hay diferentes métodos de cálculo de la integral anterior, siendo uno de éstos la cuadratura de Gauss (Weisstein 2009). Utilizando la cuadratura, la integral puede ser evaluada en m puntos expresando el valor de la integral en términos de integrales unidimensionales. La ecuación resultante es:

$$\langle R\phi_i \rangle = \int_{\mathbf{x}} R(\mathbf{x})\phi_i(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^m \omega_i R(\mathbf{x}_i)\phi_i(\mathbf{x}_i) \quad (12)$$

En la ecuación (12), ω_i corresponde a los pesos de los polinomios y m al número de simulaciones necesarias. Los puntos \mathbf{x}_i hacen referencia a las raíces de los polinomios ortogonales con función de peso $p(\mathbf{x})$. Aunque la nomenclatura es similar, no se debe confundir entre la función de peso de la cuadratura y las distintas funciones de probabilidad de los parámetros inciertos.

Tanto los pesos como las raíces pueden obtenerse analíticamente o encontrarse en tablas fácilmente en la literatura (Office of Nuclear Regulatory Research 1989). La ecuación (12) es exacta cuando los polinomios tienen igual o menor orden que $2m-1$. Usando las propiedades de cuadratura de Gauss, el mínimo número de puntos de evaluación (o simulaciones) necesarias es:

$$m = (q + 1)^{n_u} \quad (13)$$

Puede observarse en la ecuación (13) que, a mayor número de variables inciertas, mayor es el número de simulaciones necesarias, siguiendo una relación exponencial. Se puede deducir fácilmente que este método es adecuado siempre que el número de variables inciertas sea muy pequeño. Sin embargo, existen alternativas basadas en *sparse arrays*, que reducen considerablemente el número de simulaciones necesarias en los posibles escenarios con alto número de variables inciertas (Winokur 2013).

3. APLICACIÓN EXPANSIÓN EN CAOS POLINÓMICO AL BENCHMARK COLD-LEG MIXING

3.1. Descripción de la instalación Cold-Leg Mixing TAMU.

En la instalación experimental Cold-Leg Mixing dos fluidos estáticos se mezclan desde reposo debido a la diferencia de densidades que existe entre ellos. El recipiente con fluido pesado se encuentra a la izquierda y el de fluido ligero a la derecha. La unión entre ambos se realiza mediante una tubería denominada Cold-Leg con una válvula aproximadamente a la mitad de distancia entre ellos.

Inicialmente los fluidos se encuentran en reposo, a temperatura ambiental y a presión atmosférica. El tanque derecho está completamente cerrado y lleno de líquido. El tanque izquierdo se llena de fluido pesado hasta que la presión a ambos lados de la válvula sea igual a cero

Para mantener un índice de refracción uniforme de los fluidos ligeros y pesados, el agua del tanque derecho se mezcla con etanol para general el fluido ligero y el izquierdo se mezcla con sal para producir el fluido pesado. Esto proporciona, respectivamente, diferencias de densidad del 11% y del 19,7% entre fluidos pesados y ligeros, para el test abierto (conocidos los resultados) y el test cieg.

La diferencia de densidades fue el único parámetro incierto considerado debido a la alta importancia de éste en comparación con otras posibles variables inciertas. TAMU fue el encargado de ofrecer la media y la desviación estándar de la densidad de cada fluido (Tabla 1).

Tabla 1. Propiedades de los fluidos para el experimento Cold-Leg Mixing.

Fluidos	Densidad media [kg/m ³]	Desviación estándar en las medidas de densidad [kg/m ³]	Viscosidad media [Pa·s]	Error en las medidas de viscosidad [%]
Alta densidad	1112.3	24.73	0.001377	1.5
Baja densidad	920	21.65	0.002867	1.5

3.2. Metodología para la simulación del experimento, estudios de sensibilidad y resultados.

Para llevar a cabo las simulaciones se utilizó el software ANSYS con el código CFX®. Se seleccionó en este caso el modelo de turbulencia Large Eddy Simulation (LES) para llevar a cabo las simulaciones. Las simulaciones iniciales mostraron que los modelos basados en las ecuaciones RANS (Reynolds Average Navier Stokes) tendían a atenuar las velocidades en la interfase. Además, los resultados obtenidos para el experimento GEMIX revelaban la posibilidad de utilizar modelos de alto coste computacional (como LES) utilizando PCE-Cuadratura de Gauss. El mallado generado para este caso es de 1,7M de celdas hexaédricas orientadas en la dirección de movimiento de los fluidos.

Se llevaron a cabo distintos análisis de sensibilidad para encontrar el óptimo balance entre tiempo de simulación y precisión aceptable de los resultados. En primer lugar, encontramos el análisis de sensibilidad de malla. Para llevar a cabo este estudio se estudiaron las mallas de 1, 2 y 4 millones de celdas. Dado el gran tamaño del dominio de simulación, la malla de 1 millón se descartó dadas las exigencias de los modelos LES en los tamaños de celda. Las mallas por encima de 4 millones también fueron descartadas ya que la potencia computacional disponible no era suficiente para completar las simulaciones en un tiempo razonable. El tiempo computacional de cada simulación de 60 segundos con 16 núcleos para las mallas de 2 y 4 millones de celdas es de 5 y 10 días respectivamente.

En la Figura 1 se muestra la comparativa entre el perfil de velocidades en una de las zonas de medida del experimento y los mallados de 2 y 4M de celdas. Adicionalmente se incluye el resultado del modelo DES, basado en una combinación entre LES y RANS, que dista mucho de los resultados esperados. Dado que las diferencias son mínimas, se optó por utilizar el mallado de 2 millones.

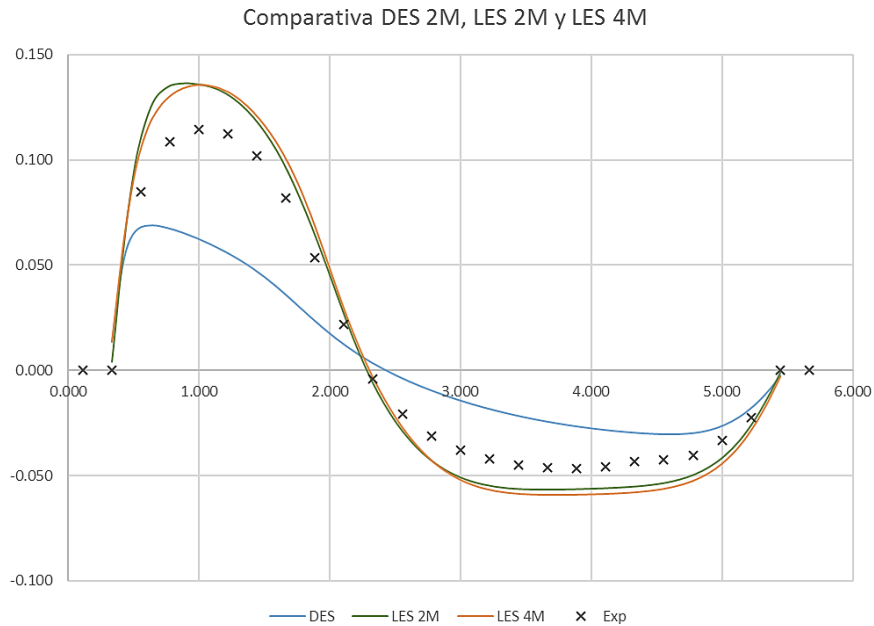


Figura 1. Comparativa del perfil de velocidades entre el experimento y los resultados de los modelos DES 2M, LES 2M y LES 4M.

Una vez decidido que se utilizaría un modelo LES de 2 millones de celdas se procedió a realizar un análisis de sensibilidad de los tres modelos LES implementados en ANSYS: Smagorinsky, Wale y Dynamic. Los resultados, como se muestran en la Figura 2 son muy próximos entre sí, pero calculando la distancia euclídea y la distancia de Mahalanobis entre experimento y cada simulación, se obtiene que el modelo que más se aproxima es el Smagorinsky.

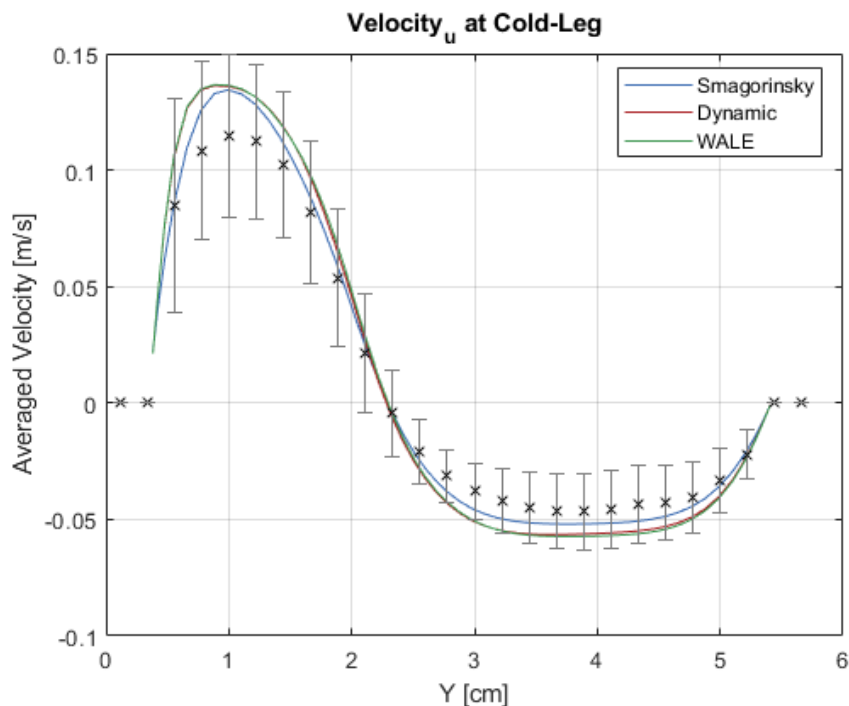


Figura 2. Comparativa del perfil de velocidades entre el experimento y los resultados de los modelos LES Smagorinsky, Dynamic y WALE.

Estaba previsto añadir un estudio de sensibilidad a uno de los parámetros que participan en el cálculo de la turbulencia de los modelos LES, conocido como C_w ó C_s dependiendo del modelo LES utilizado (Smagorinsky, WALE o Dynamic) de los tres incluidos en ANSYS CFX ®. Sin embargo, debido a las exigencias de entrega y los largos tiempos computacionales característicos de este tipo de simulaciones se decidió utilizar el valor estándar que aconseja el manual de usuario de ANSYS.

3.3. Cuantificación de la incertidumbre mediante Polinomial Chaos Expansion.

La variable incierta más importante que aparece en nuestra simulación es la diferencia entre la densidad del fluido de alta densidad y la del de baja (aproximadamente un 5% en la medida de cada densidad).

La incertidumbre en la diferencia de densidad entre fluidos sigue una distribución de probabilidad normal por lo que se utilizaron los polinomios de Hermite. Se seleccionó orden 4 para los polinomios por lo que fueron necesarias 5 simulaciones. Para poder aplicar el método correctamente, se llevó a cabo el siguiente cambio de variable:

$$x^{real}_i = \sqrt{2} \cdot \sigma \cdot x_i + \mu \quad (14)$$

En la ecuación (14), x_i corresponde con las raíces de los polinomios de 4º orden de Hermite y x^{real} con los valores reales a simular. Para poder calcular los coeficientes α_i de la ecuación (9), deben resolverse las siguientes integrales.

$$\langle \phi_i^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{x-\mu}{\sqrt{2} \cdot \sigma}\right)^2} \phi_i^2(x) dx^{real} \quad (15)$$

$$\langle R\phi_i \rangle = \int_X R(x)\phi_i(x) p(x) dx = \sum_{i=1}^m \omega_i R(x_i)\phi_i(x_i) \quad (16)$$

En la ecuación (16) $p(x)$ debe corresponder con e^{-x^2} . Teniendo en cuenta el cambio de variable anterior:

$$\begin{aligned} \langle R\phi_i \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{x^{real}-\mu}{\sqrt{2} \cdot \sigma}\right)^2} R(x^{real})\phi_i(x^{real}) dx^{real} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} R(\mu + \sqrt{2} \cdot \sigma \cdot x)\phi_i(\mu + \sqrt{2} \cdot \sigma \cdot x) dx \end{aligned} \quad (17)$$

Puede observarse que la ecuación (17) está lista para aplicar la Cuadratura de Gauss:

$$\langle R\phi_i \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^m \omega_i R(\mu + \sqrt{2} \cdot \sigma \cdot x_i)\phi_i(\mu + \sqrt{2} \cdot \sigma \cdot x_i) \quad (18)$$

La Figura 3 muestra la velocidad absoluta obtenida en una línea vertical en la tubería que une ambos tanques (Cold-Leg) a 0,7m de la válvula. Los resultados de la simulación con su banda de incertidumbre están representados por la línea azul y el sombreado, y los experimentales por puntos.

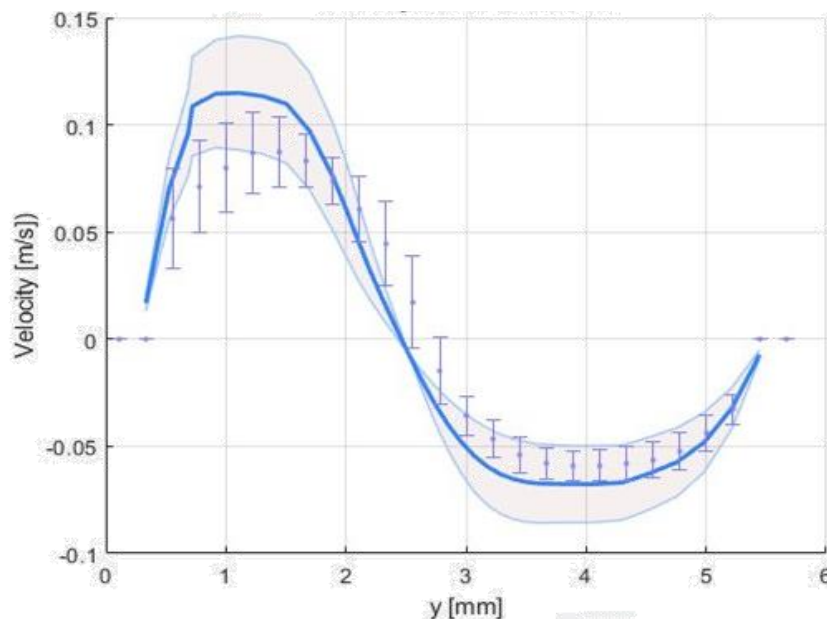


Figura 3. Velocidad en el sentido del flujo en la tubería. Los puntos corresponden al experimento y la línea azul las simulaciones LES mediante PCE-Cuadratura de Gauss.

Como se puede observar, la simulación se aproxima bastante bien a los resultados experimentales, aunque no recoge todos los puntos. Como se mencionó previamente, el modelo de turbulencia LES es muy eficaz en este tipo de situaciones, pero requiere un mallado muy fino y un paso de tiempo muy pequeño.

4. CONCLUSIONES

Este documento recoge los aspectos más importantes del método de cuantificación de la incertidumbre mediante Expansión en Caos Polinómico (PCE). Se han descrito la teoría detrás de esta metodología y se ha aplicado a un caso de simulación CFD termo-hidráulica nuclear, en concreto, a la simulación de un experimento llevado a cabo por Texas A&M University llamado Cold-Leg Mixing.

En este experimento, dos fluidos se mezclan por diferencia de densidades sin que ninguna otra variable (presión, temperatura) sea relevante en el movimiento de los mismos. De esta manera se comprueba la efectividad de los códigos CFD en predecir este comportamiento.

Para calcular la simulación se ha utilizado el código ANSYS CFX® aplicando un modelo de turbulencia tipo *Large Eddy Simulation* (LES). Se han llevado a cabo estudios de sensibilidad de mallado y sensibilidad al modelo de turbulencia (RANS, DES y los tres tipos LES implementados en CFX).

Se han llevado a cabo cinco simulaciones siguiendo la metodología PCE para calcular la incertidumbre de los resultados. Teniendo en cuenta esta incertidumbre, los resultados de la simulación tienen una buena concordancia con las medidas experimentales.

AGRADECIMIENTOS

Los autores de este trabajo desean destacar la contribución del plan de apoyo I+D del proyecto EXMOTRANSIN ENE2016-79489-C2-1-P.

REFERENCIAS

- Askey, Richard., and James Arthur Wilson. 1985. *Some Basic Hypergeometric Orthogonal Polynomials That Generalize Jacobi Polynomials*. American Mathematical Society.
- Glaeser, Horst, and Horst. 2008. "GRS Method for Uncertainty and Sensitivity Evaluation of Code Results and Applications." *Science and Technology of Nuclear Installations 2008*. Hindawi: 1–7. doi:10.1155/2008/798901.
- Hosder, Serhat, and R. W. Walters. 2010. "Non-Intrusive Polynomial Chaos Methods for Uncertainty Quantification in Fluid Dynamics." *48th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, no. January: 1–16. http://scholarsmine.mst.edu/mec_aereng_facwork/2634.
- Nuclear Regulatory Commission. 2007. "Acceptance Criteria for Emergency Core Cooling Systems for Light-Water Nuclear Power Reactors." <https://www.nrc.gov/reading-rm/doc-collections/cfr/part050/part050-0046.html>.
- Office of Nuclear Regulatory Research. 1989. "Best-Estimate Calculations of Emergency Core Cooling System Performance." *Regulatory Guide 1.157*. <https://www.nrc.gov/docs/ML0037/ML003739584.pdf>.
- Weisstein, E. 2009. *The CRC Concise Encyclopedia of Mathematics*. CRC Press.
- Winokur, Justin. 2013. "Smolyak Quadrature Tutorial," 75.