

TESIS CARRERA DE MAESTRÍA EN INGENIERÍA

**ACOPLAMIENTO MULTIESCALA EN CÁLCULOS
FLUIDODINÁMICOS**

Ing. Federico Agustín Caccia
Maestrando

Dr. Enzo Dari
Director

Miembros del Jurado

Dr.F. Teruel (Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo)
Dr.P. Zanocco (Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo)

5 de Julio de 2017

Departamento de Mecánica Computacional – Centro Atómico
Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

A todos aquellos que cuestionan lo incuestionable

Índice de símbolos

CFD: Fluidodinámica Computacional (*Computational Fluid Dynamics*)

DNS: Simulación numérica directa (*Direct Numerical Simulation*)

FEM: Método de Elementos Finitos (*Finite Element Method*)

PDE: Ecuación con Derivadas Parciales (*Partial Differential Equation*)

RANS: Promedio de Reynolds de Navier-Stokes (*Reynolds-Averaged Navier–Stokes*)

Índice de contenidos

Índice de símbolos	v
Índice de contenidos	vii
Índice de figuras	ix
Índice de tablas	xi
Resumen	xiii
Abstract	xv
1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Abordaje del modelado	2
1.2.1. Desglosado del sistema original en subsistemas acoplados	2
1.2.2. Sistema de ecuaciones a resolver	3
1.2.3. Métodos numéricos para la resolución de sistemas de ecuaciones de residuos	4
1.2.4. Problemas de evolución temporal	5
1.3. Objetivos y estructura de trabajo	5
2. Técnicas de acoplamiento	7
2.1. Paradigma maestro-esclavo	7
2.2. Códigos maestros utilizados	7
2.3. Formas de comunicación implementadas	7
2.4. Arquitectura de acoplamiento montada en códigos esclavos	7
3. Modelos fluidodinámicos utilizados	9
3.1. Modelos en Par-GPFEP	9
3.2. Modelos en Relap	9
3.3. Otros modelos cero-dimensionales	9

4. Aplicaciones en cálculos fluidodinámicos acoplados	11
4.1. Movimiento por fuerza boyante en un circuito cerrado	11
4.2. Análisis del segundo sistema de parada del reactor RA-10	11
4.3. Resolución de grandes redes hidráulicas	11
5. Extensión al problema neutrónico-termohidráulico	13
5.1. Descripción del código Newton	13
5.2. Acople neutrónico-termohidráulico	13
A. Formulación de las ecuaciones fluidodinámicas de PAR-GPFEP con el método de elementos finitos	15
B. Métodos de resolución de sistemas de ecuaciones no lineales	17
Bibliografía	19
Publicaciones asociadas	21
Agradecimientos	23

Índice de figuras

1.1. Esquema de descomposición en dominios disjuntos	3
--	---

Índice de tablas

Resumen

Los análisis de ingeniería actuales exigen estudios en sistemas cada vez más complejos. Éstos, a su vez, involucran subsistemas de características disímiles: principalmente diferentes tamaños y parámetros característicos. Por ejemplo, en los sistemas termohidráulicos es posible identificar distintos regímenes de flujo en tanques o en cañerías. En ciertas ocasiones solo es de interés el detalle en algunos componentes, necesitando modelar el resto del sistema para conservar la dinámica global. En este trabajo se estudia una técnica que permite acoplar el modelado detallado de sistemas fluídicos bi- y tri- dimensionales con sistemas fluídicos más sencillos uni-dimensionales o cero-dimensionales. Cada subsistema se halla acoplado a los demás mediante los valores que toman las variables en las interfaces que comparten entre sí. El problema a resolver se reduce entonces a un sistema de ecuaciones cuyo tamaño depende de la cantidad de incógnitas en cada interfaz. Estas ecuaciones dependen, a su vez, de la física de cada subsistema y en general resultan ser no lineales. Debido a esta característica, se investigan diferentes métodos de resolución iterativa. Sobre el final del trabajo se extiende la técnica a acoples multifísicos y se muestran algunos ejemplos de acoplamiento neutrónico-termohidráulico.

Palabras clave: ACOPLAMIENTO FUERTE, MODELADO MULTIESCALA, FLUIDODINÁMICA COMPUTACIONAL, MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS, ACOPLAMIENTO NEUTRÓNICO-TERMOHIDRÁULICO.

Abstract

Current engineering analyzes require studies in increasingly complex systems. These, in turn, involve subsystems of dissimilar characteristics: mainly different sizes and characteristic parameters. For example, in thermohydraulic systems it is possible to identify different flow regimes in tanks or pipelines. On some occasions it is only interesting to detail in some components, needing to model the rest of the system to preserve the global dynamics. In this work we study a technique that allows the coupling of the detailed modeling of bi- and three-dimensional fluidic systems with simplified one-dimensional or zero-dimensional fluidic systems. Each subsystem is coupled to the others by the values that the variables take on the interfaces they share with each other. The problem to be solved is then reduced to a system of equations whose size depends on the number of unknowns in each interface. These equations, in turn, depend on the physics of each subsystem and in general turn out to be non-linear. Due to this characteristic, different iterative resolution methods are investigated. On the end of the work the technique is extended to multiphysical couplings and some examples of neutron-thermohydraulic coupling are shown.

Keywords: STRONG COUPLING, MULTISCALE MODEL, COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS, FINITE ELEMENT METHOD, NEUTRONIC-TERMAL-HYDRAULIC COUPLINGS

Capítulo 1

Introducción

“Don’t get involved in partial problems, but always take flight to where there is a free view over the whole single great problem, even if this view is still not a clear one.”

— Ludwig Wittgenstein, 1889-1951

1.1. Motivación

La creciente sofisticación en los análisis de ingeniería demanda el estudio de sistemas cada vez más complejos. Un ejemplo actual de esto es el modelado de grandes componentes termohidráulicos de geometría muy compleja en la industria nuclear. Es notable la presencia de subsistemas de características muy diferentes: principalmente diferentes tamaños y regímenes de flujos. Si bien se necesita modelar y entender el sistema completo, solo es de interés el detalle en algunos subsistemas. Algunos, como las tuberías, se hallan muy bien caracterizados por modelos simple (ODE’s). Otros, en cambio, requieren un análisis detallado de flujo, y por ello es necesaria la simulación fluidodinámica computacional (CFD).

En este marco se justifica el desarrollo de una técnica numérica que permita desglosar el problema general para analizar cada subsistema por separado mediante condiciones de borde dinámicas. Como referencia a este enfoque se citan los trabajos desarrollados por J. S. Leiva y G. C. Buscaglia (2006) [1], P.J. Blanco et al. (2010) [2] y J. S. Leiva et al. (2011) [3].

1.2. Abordaje del modelado

1.2.1. Desglosado del sistema original en subsistemas acoplados

Dado un sistema S en un dominio Ω con borde Γ , es posible desglosar este dominio en N particiones y analizar diferentes subsistemas $S_i, i = 1, \dots, N$ por separado, acoplados entre sí mediante condiciones de borde en las uniones (método de descomposición de dominios disjuntos [4]). Las condiciones de borde originales del problema, impuestas sobre la curva Γ , ahora se imponen sobre cada fragmento de la curva. La Figura 1.1 presenta el esquema propuesto. La notación utilizada es la siguiente:

- S_i representa al subsistema $i, i = 1, \dots, N$.
- $U_{i,j}^k$ es la unión k entre subsistemas i y $j, k = 1, \dots, K_{i,j}$.
- $I_{S_i}^l$ es la interfaz local l del subsistema $i, l = 1, \dots, L_i$.
- Γ_i es la porción de frontera exterior en el subsistema $N, \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \dots \cup \Gamma_i \dots \cup \Gamma_N = \Gamma$. Notar que Γ_j puede ser nula para algún S_j .
- $(x_m)_{S_i}^{I_l}$ es el valor de la variable x_m en la interfaz l del subsistema $i, m = 1, \dots, M_i$.
- $(\bar{x})_{S_i}^{I_l}$ es el vector de incógnitas $\{x_1, x_2, \dots, x_{M_i}\}$ en la interfaz l del subsistema i .

En principio, existen tantas incógnitas como valores de variables en cada interfaz. Sin embargo, es posible notar que la unión $U_{i,j}^k$ que relaciona los sistemas S_i y S_j mediante las interfaces $I_{S_i}^{l_1}$ e $I_{S_j}^{l_2}$ respectivamente, define una relación de continuidad¹ entre las incógnitas $(x_m)_{S_i}^{I_{l_1}}$ y $(x_m)_{S_j}^{I_{l_2}}$, de tal forma que:

$$(x_m)_{S_i}^{I_{l_1}} = (x_m)_{S_j}^{I_{l_2}} \quad (1.1)$$

Estas relaciones reducen a la mitad la cantidad de incógnitas. Las demás ecuaciones se encuentran a partir del modelo de estudio de cada subsistema. Sean $(F_m)_i^l$ las relaciones funcionales que calculan el valor de las incógnitas $(x_m)_{S_i}^{I_l}$ en la interfaz l del subsistema i , a partir del valor de otras incógnitas y de los datos de contorno sobre la frontera exterior Γ_i :

$$(x_m)_{S_i}^{I_l} = (F_m)_i^l \left((\bar{x})_{S_i}^{I_1}, (\bar{x})_{S_i}^{I_2}, \dots, (\bar{x})_{S_i}^{I_{L_i}}, (\alpha_i(\Gamma_i)) \right) \quad (1.2)$$

¹ Las incógnitas que representan derivadas normales en la interfaz de acople pueden tomar signos opuestos según la convención. Por ejemplo, si el flujo de calor es una incógnita, y se define como flujo positivo a aquel que es saliente del subsistema, entonces la condición de continuidad implicará que:

$$(q'')_{S_i}^{I_{l_1}} = -(q'')_{S_j}^{I_{l_2}}$$

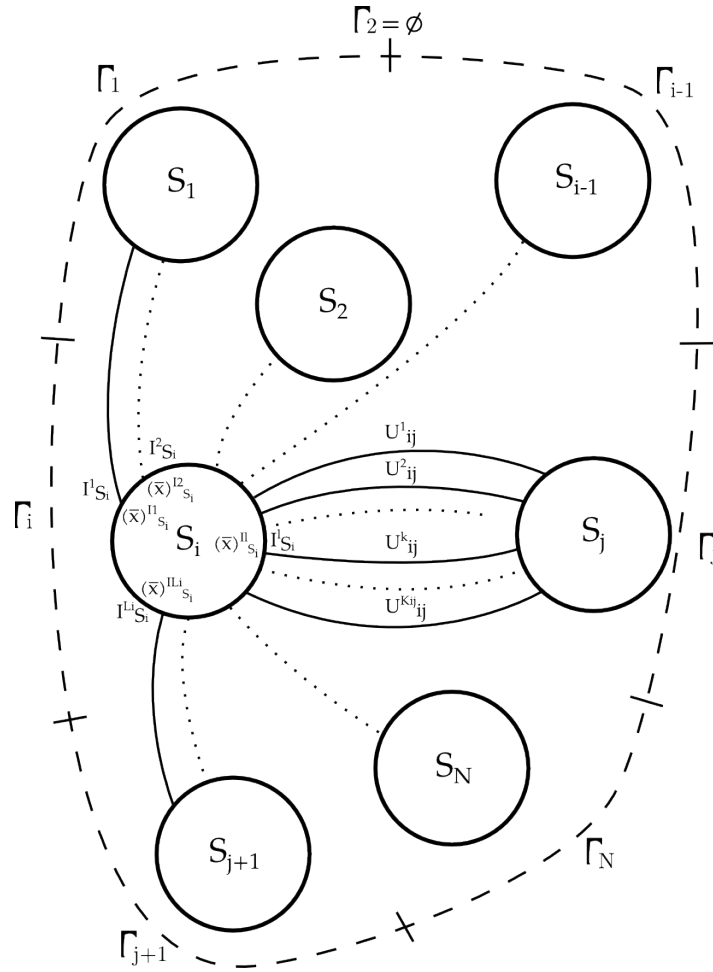


Figura 1.1: Esquema de subsistemas de estudio relacionados mediante condiciones de borde dinámicas en interfaces de acoplamiento.

donde $(\alpha_i(\Gamma_i))$ representa las condiciones de borde impuestas sobre la curva Γ_i . Notar que algunas de las dependencias pueden anularse dependiendo del modelo de estudio utilizado en cada subsistema ².

1.2.2. Sistema de ecuaciones a resolver

Restando el lado derecho en (1.2) a ambos lados, se obtienen relaciones del tipo:

$$(R_m)_i^l = (x_m)_{S_i}^{I_l} - (F_m)_i^l \left((\bar{x})_{S_i}^{I_1}, (\bar{x})_{S_i}^{I_2}, \dots, (\bar{x})_{S_i}^{I_{L_i}}, (\alpha_i(\Gamma_i)) \right) \quad (1.3)$$

para cada residuo en la incógnita m de cada interfaz l del subsistema i . Debido a las relaciones de continuidad (1.1), es posible descartar ecuaciones, seleccionándolas de tal

² Cuando la expresión es más sencilla y solo involucra el valor de otro tipo de condición de borde en la misma interfaz, la relación funcional recibe el nombre de operador *Steklov-Poincaré*. En matemática, el operador *Steklov-Poincaré* mapea el valor de una condición de borde de una PDE elíptica en un dominio al valor de otra condición de borde (por ejemplo, una condición de borde de tipo *Dirichlet* en una condición de borde de tipo *Neumann*). Usualmente, cualquiera de las dos condiciones determinan la solución.

forma que el sistema de ecuaciones en cada subsistema quede bien planteado, como se explica más adelante. La convergencia fuerte de los subsistemas acoplados necesita que los residuos sean nulos. El sistema global de ecuaciones restante se reduce a la siguiente expresión:

$$\bar{R} = \bar{0} \quad (1.4)$$

donde \bar{R} es el vector de residuos de las ecuaciones seleccionadas. En general estas relaciones son no lineales, y por lo tanto se resuelven de forma iterativa, a partir de un primer vector solución propuesto. Debido a que en cada subsistema solo han sobrevivido ciertas relaciones funcionales, van a tomar como dato solo algunos de estos valores propuestos. Es necesario por tanto seleccionar las ecuaciones de modo que el problema resulte bien planteado. Por ejemplo, si interesara calcular el campo de temperaturas en un subsistema dado, serían incógnitas la temperatura y el flujo de calor en cada una de sus interfaces. Sin embargo ambas no pueden ser impuestas como dato en el mismo subsistema. En general, cada subsistema debe recibir condiciones o bien de tipo *Dirichlet*, o bien de tipo *Neumann*, para cada ecuación.

1.2.3. Métodos numéricos para la resolución de sistemas de ecuaciones de residuos

Existen diferentes estrategias para hallar las raíces del sistema (1.4). La forma clásica es el conocido método *Dirichlet-to-Neumann*, que resuelve mediante iteraciones de tipo *Piccard*. En este método los valores tentativos para las condiciones de borde que son datos en cada subsistema no pueden elegirse arbitrariamente. Las interfaces $I_{S_i}^{l_1}$ y $I_{S_j}^{l_2}$ comunes a cada unión $U_{i,j}^k$ deben alternar condiciones de borde de tipo *Dirichlet* y de tipo *Neumann* para las ecuaciones que relacionan las mismas variables de estado en cada subsistema.

Aclarar bien este ejemplo. Por ejemplo, en el subsistema S_1 se calcula el campo de temperaturas a partir de una condición de tipo Neumann (flujo de calor) en la interfaz $I_{S_i}^{l_1}$. Luego el valor de temperatura resuelto en la interfaz, se fija como condición de borde de tipo *Dirichlet* en la interfaz $I_{S_2}^{l_2}$ de S_2 . A partir de este dato se calcula en S_2 el flujo de calor en la interfaz, que pasa nuevamente como condición de borde de tipo *Neumann* a S_1 , y así sucesivamente. En cierto tipo de problemas esta estrategia toma demasiadas iteraciones, y en algunos casos es divergente. Puede quedar estancada. Poner ejemplo iteraciones punto fijo.

Otra forma de resolver el problema es aplicando algún método para encontrar raíces a sistemas de funciones no lineales, como por ejemplo, el método *Newton*. Poner ecuaciones de newton. Éste método tiene orden de convergencia cuadrática. Haciendo

un desarrollo de Taylor de las ecuaciones de residuos y truncando los términos superiores al primer orden. El sistema de ecuaciones resultantes puede resolverse entonces mediante el método de Newton.

El problema es que para utilizar este método se requiere la construcción de la matriz jacobiana en cada iteración, lo cual es demasiado costoso. Una sencilla aproximación mediante diferencias finitas de primer orden de cada elemento de la matriz jacobiana requiere una primera resolución por parte de cada código para encontrar los residuos en la posición original, y luego otras tantas resoluciones extras como tantas incógnitas existan, ya que deben evaluarse perturbaciones en todas las variables. Si bien éstas evaluaciones son independientes entre sí y por lo tanto altamente paralelizables, este método es excesivamente costoso.

Una forma alternativa y elegante de resolver el sistema de ecuaciones antes planteado es mediante métodos *cuasi-Newton*. Estos métodos tienen convergencia superlineal, y por lo tanto se ubican entre los métodos presentados anteriormente en análisis de convergencia. Representan una mejora respecto del método de Newton ya que aproximan la matriz jacobiana sin necesidad de realizar evaluaciones extras. El método de Broyden es uno de ellos [5]. También existe otra variante del método, el método de Broyden Ortonormal. En esta versión se asegura que la resolución converge en N iteraciones, donde N es la dimensión de la matriz jacobiana [6]. en lineales?

1.2.4. Problemas de evolución temporal

En problemas de avance temporal la estrategia de selección de variables que son datos o incógnitas en cada interfaz puede variar en la evolución. Cabe resaltar también que no existe necesidad de que los cálculos en cada subsistema utilicen el mismo paso temporal. Cualquiera de los códigos podría utilizar subdivisiones del paso temporal del otro código, y establecer el acople sólo en pasos de tiempo determinados. Los valores para las condiciones de borde dinámicas entre los pasos de tiempo en los que efectivamente se intercambian datos, pueden interpolarse con valores previos.

Notar que la herramienta es incondicionalmente estable debido a que en cada paso de tiempo se asegura la convergencia fuerte de los valores de las variables en las interfaces de acople.

1.3. Objetivos y estructura de trabajo

Considerando la motivación y la formulación precedente, queda establecido el siguiente objetivo general de la maestría:

Implementar el acoplamiento fuerte entre modelos dimensionalmente heterogéneos, resolviendo cada subdominio por separado con códigos particulares, e imponiendo la interacción entre ellos sólo mediante condiciones de borde.

La estructura de la tesis es detallada a continuación. En el presente capítulo se han planteado las ecuaciones que surgen al dividir sistemas complejos mediante interfaces con condiciones de borde dinámicas, y se han presentado alternativas numéricas para la resolución de las mismas. En el Capítulo 2 se describen las diferentes formas de implementar el acoplamiento entre códigos que han sido investigadas e implementadas. En el Capítulo 3 se presentan los distintos códigos utilizados para realizar cálculos fluidodinámicos, se comentan sus modelos matemáticos y las implementaciones realizadas en ellos para efectuar acoplamientos. En el Capítulo 4 se muestran algunas aplicaciones de la herramienta estudiada. La primera es un sistema fluídico cerrado que se estudia subdividiéndolo en dos subsistemas, con dos interfaces de acople cada uno. El movimiento del fluido está gobernado por fuerzas naturales y por lo tanto interesa acoplar variables de caudal, presión, temperatura y flujo de calor en cada interfaz. El siguiente sistema de estudio es el vaciado del tanque reflector del reactor de investigación RA-10. Interesa analizar los tiempos de descarga ya que el mismo es diseñado como Segundo Sistema de Parada (SSP). Se abordan distintos modelos multiescala del mismo, para estudiar el detalle fluídico tridimensional en un componente del sistema, acoplando con condiciones de borde dinámicas a modelos cero-dimensionales que representan el resto del sistema. Al final del capítulo se presenta un estudio de redes hidráulicas con múltiples componentes, para demostrar la eficiencia de la herramienta en acoples de mayor escala. En éstos últimos ejemplos comentados, las variables incógnitas en las interfaces de acoplamiento son velocidades (o caudales) y fuerzas (presiones y tensiones de corte). En el Capítulo 5 se extiende la técnica de acople a problemas que involucran otros modelos físicos. Se describe el código maestro de acople multifísico desarrollado y se presentan ejemplos de aplicación en el problema neutrónico-termohidráulico.

Capítulo 2

Técnicas de acoplamiento

“”

— alguien, alguna vez

2.1. Paradigma maestro-esclavo

2.2. Códigos maestros utilizados

Dos códigos: Código coupling desarrollado previamente x, para acoplar pares D2N.

Visto que existen códigos cerrados incapaces de ser comunicados por MPI, o que exigen otra formulación de residuos, y durante la tesis se realizó un código más general, Newton, descrito en último capítulo. Con múltiples tipos de conexión (mpi-port, mpi-comm, I/O spawn and system), mappers, etc.

2.3. Formas de comunicación implementadas

mpi vs compartida, ver documentos/biblio-maestria/mpi

técnicas mpi-port, mpi-comm, I/O spawn and system implementación:

grupos, puertos,

spawn, barrier after spawn

system

2.4. Arquitectura de acoplamiento montada en códigos esclavos

Capítulo 3

Modelos fluidodinámicos utilizados

“The City’s central computer told you? R2-D2, you know better than to trust a strange computer. ”

— C-3PO, from Star Wars

3.1. Modelos en Par-GPFEP

Descripción general par-gpfep

Ecuaciones de fluidos, fem, formulación, estabilidad LBB, P1P1 turbulencia, modelos, law wall, estabilidad level set

Agregar sub sección detallando todas las implementaciones hechas en pargpfep, rutinas de integración, etc. Agregar evaluación rutinas en paralelo, (informe ipd).

3.2. Modelos en Relap

descripción general de modelos descripción de las ecuaciones del modelo usado
implementación de la conexión.

3.3. Otros modelos cero-dimensionales

balances de masa y energía cero-dimensionales

Notificar que la implementación de la conexión es similar a pargpfep.

Capítulo 4

Aplicaciones en cálculos fluidodinámicos acoplados

“Rule number one, do everything as possible to have a great life”

— anonymus

4.1. Movimiento por fuerza boyante en un circuito cerrado

4.2. Análisis del segundo sistema de parada del reactor RA-10

agregar resultados del tanque 3d y figuras, nombrar a ludmila

4.3. Resolución de grandes redes hidráulicas

Capítulo 5

Extensión al problema neutrónico-termohidráulico

“We build too many walls and not enough bridges.”

— Isaac Newton, 1643-1727

5.1. Descripción del código Newton

con toda la experiencia ganada se desarrolló el código newton, gral libre, open source, efficietn error handling, etc.

features: formas de conexión mappers, alphas betas gammas y deltas,

5.2. Acople neutrónico-termohidráulico

breve descripción de los códigos utilizados

acople relap fermi

acople fermi cr

acople relap puma

esquema de variables intercambiadas y mapeos

Apéndice A

Formulación de las ecuaciones fluidodinámicas de PAR-GPFEP con el método de elementos finitos

“Negociemos Don Inodoro”

— Fernando de la Rúa, 2001

Apéndice B

Métodos de resolución de sistemas de ecuaciones no lineales

“Negociemos Don Inodoro”

— Fernando de la Rúa, 2001

Bibliografía

- [1] Leiva, J. S., Buscaglia, G. C. Estrategias de acoplamiento entre códigos 0d/1d and códigos cfd 3d. *Mecánica Computacional*, **XXV**, 53–82, 2006. [1](#)
- [2] P.J. Blanco, J. L., Feijóo, R., Buscaglia, G. Black-box decomposition approach for computational hemodynamics: One-dimensional models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **200**, 1389–1405, 2010. [1](#)
- [3] Leiva, J. S., Blanco, P. J., Buscaglia, G. C. Partitioned analysis for dimensionally-heterogeneous hydraulic networks. *Multiscale Model. Simul.*, **9**, 872–903, 2011. [1](#)
- [4] Quarteroni, A. Introduction to domain decomposition methods. *6th Summer School in Analysis and Applied Mathematics*, 2011. [2](#)
- [5] Broyden, C. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations. *American Mathematical Society*, **19**, 577–593, 1965. [5](#)
- [6] Dennis, J., Shnabel, R. Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations. Society for industrial and applied mathematics, 1996. [5](#)

Publicaciones asociadas

1. Informes técnicos en Comisión Nacional de Energía Atómica:

- a) Rechiman, L.; Cantero, M.; Dari, E.; Caccia, F.; Chacoma, A. 2015. “Análisis hidrodinámico del Segundo Sistema de Parada del reactor RA10”. Reporte técnico CNEA IN-ATN40MC- Mayo de 2015, Bariloche, Argentina.

2. Publicaciones en revistas internacionales:

- a) Rechiman, L.; Cantero, M. ; Caccia, F.; Chacoma, A. and Dari, E. 2017. “Three-dimensional hydrodynamic modeling of the second shutdown system of an experimental nuclear reactor” ("Modelado hidrodinámico tridimensional del segundo sistema de parada de un reactor nuclear experimental"), Nuclear Engineering and Design, vol. 319, pp 163-175.

3. Presentaciones en congresos con publicación en actas:

- a) Caccia, F. and Dari. E. “Acoplamiento multiescala en cálculos fluidodinámicos”. XXII Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, 7-11 Noviembre 2016, Córdoba, Argentina.
- b) Rechiman, L.; Chacoma, A.; Caccia, F.; Dari E. and Cantero, M. “Validación del modelo multiescala del segundo sistema de parada del reactor nuclear experimental RA-10”. XXII Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, 7-11 Noviembre 2016, Córdoba, Argentina.

Agradecimientos

a mi familia, amigos, a sol, ludmila (ra10), guido(fermi), manuely alexis(puma),
fedezio(meio), compañeros de oficina, mecom, enzo

