

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 (Comisión Nacional de Energía Atómica & Instituto Balseiro,
Universidad Nacional de Cuyo)
Dr. P. García Martínez (Comisión Nacional de Energía Atómica & Universidad
Nacional de Cuyo)
Dr. P. Zanocco (Comisión Nacional de Energía Atómica & Instituto Balseiro,
Universidad Nacional de Cuyo)

11 de Septiembre de 2017

Departamento de Mecánica Computacional – Centro Atómico
Bariloche

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

Índice de símbolos

BOC: Principio De Ciclo (*Beginning Of Cicle*)
CFD: Fluidodinámica Computacional (*Computational Fluid Dynamics*)
DNS: Simulación Numérica Directa (*Direct Numerical Simulation*)
EOC: Fin De Ciclo (*End Of Cicle*)
FEM: Método de Elementos Finitos (*Finite Element Method*)
GPL: Licencia Pública General (*General Public License*)
MPI: Interfaz de Paso de Mensajes (*Message Passing Interface*)
PDE: Ecuación con Derivadas Parciales (*Partial Differential Equation*)
RANS: Promedio de Reynolds de Navier-Stokes (*Reynolds-Averaged Navier–Stokes*)
SAC: Sistema de Ajuste y Control
SSP: Segundo Sistema de Parada

Índice de contenidos

Índice de símbolos	iii
Índice de contenidos	v
Índice de figuras	vii
Índice de tablas	ix
Resumen	xi
Abstract	xiii
1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Abordaje del modelado	2
1.3. Objetivos y estructura de trabajo	9
2. Estrategia de resolución mediante acoplamiento de códigos	11
2.1. Paradigma maestro-esclavo	11
2.2. Modelos de comunicación	12
2.3. Códigos maestros utilizados	14
2.4. Arquitectura de acoplamiento montada en código <i>esclavo</i> comunicado por paso de mensajes	15
3. Ejemplos de aplicación	21
3.1. Fluidodinámica en una fuente fría de neutrones	21
3.2. Análisis del segundo sistema de parada de un reactor de investigación .	31
3.2.1. Estrategia de resolución	36
3.3. Resolución de redes hidráulicas de múltiples componentes	44
3.4. Extensión a problemas acoplados en modelos de núcleo	50
4. Conclusiones	65
4.1. Logros alcanzados	65

4.2. Trabajos futuros	67
A. Descripción del código maestro Coupling	69
A.1. Modelado de problemas acoplados	69
A.2. Metodología de resolución	70
A.3. Ejemplo de uso	71
B. Descripción del código maestro Newton	75
B.1. Principales características	75
B.2. Modelado de problemas acoplados	78
B.3. Metodología de resolución	79
B.4. Ejemplo de uso	81
C. Acoplamiento de Par-GPFEP	83
C.1. Implementación de la arquitectura de acoplamiento en Par-GPFEP .	83
C.2. El programa genbco	84
C.3. Ejemplo de uso de Par-GPFEP en forma acoplada	85
Bibliografía	87
Publicaciones asociadas	91

Índice de figuras

1.1. Esquema de sistema complejo analizado mediante el Método de Descomposición Disjunta de Dominios	3
1.2. Descomposición disjunta de dominios en el cálculo del campo de temperatura a lo largo de una barra unidimensional	4
2.1. Esquema de comunicación entre programas implementado	14
2.2. Esquema de acoplamiento entre programas implementado	18
3.1. Modelo de la fuente fría compuesto por un subsistema cero-dimensional y otro subsistema bi-dimensional.	22
3.2. Evolución del fluido en la cavidad bidimensional a bajo Richardson . . .	28
3.3. Evolución del fluido en la cavidad bidimensional a bajo Richardson . . .	29
3.4. Evaluaciones de residuos requeridas por diversos métodos numéricos para resolver los sistemas de ecuaciones planteados en el problema doblemente acoplado descripto de la fuente fría de neutrones.	30
3.5. Esquema del segundo sistema de parada del reactor RA10.	32
3.6. Evolución de la presión y del caudal volumétrico en la interfaz de acople . . .	37
3.7. Evolución del nivel de líquido en el <i>mockup</i> del tanque del reflector del reactor OPAL ante accionamiento del SSP	38
3.8. Evolución del nivel de líquido en el <i>mockup</i> del tanque del reflector del OPAL ante accionamiento del SSP considerando falla simple en diferentes válvulas	39
3.9. Evolución del nivel de líquido en el <i>mockup</i> del tanque del reflector del reactor OPAL ante accionamiento del SSP	40
3.10. Transitorio inicial de la descarga del tanque a través del arreglo de válvulas del <i>mockup</i> del reactor OPAL, con detalle de la evolución de la superficie libre	41
3.11. Evaluación de diferentes métodos numéricos no lineales en el problema del vaciado del tanque reflector del <i>mockup</i> del reactor OPAL	42
3.12. Eficiencia para diferentes esquemas de extrapolación en la generación de semillas	43

3.13. Descomposición disjunta de dominios en el modelado de redes hidráulicas	45
3.14. Comparación de diferentes métodos numéricos para la resolución de sistemas de redes hidráulicas	47
3.15. Comparación de diferentes esquemas de <i>Broyden</i> para la resolución de sistemas de redes hidráulicas con regímenes de flujo laminar	48
3.16. Comparación de diferentes métodos numéricos para la resolución de sistemas de redes hidráulicas con regímenes de flujo turbulento	49
3.17. Núcleo simple en análisis de acoplamiento neutrónico-termohidráulico utilizando <i>RELAP5</i> y <i>Fermi</i>	55
3.18. Instancias de cálculo de las variables relacionadas con cada programa <i>esclavo</i>	56
3.19. Evaluaciones de funciones en cada paso de quemado en cálculo con RELAP5 y Fermi	57
3.20. Modelo de núcleo del reactor CAREM-25	59
3.21. Modelo de núcleo del reactor CAREM-25	60
3.22. Modelo de núcleo del reactor CAREM-25	60
3.23. Evolución de la reactividad en el ciclo de quemado del reactor CAREM-25	61
3.24. Evaluaciones de funciones utilizando el método de <i>Picard</i> en cada paso de quemado en cálculo con RELAP5 y Fermi	62
3.25. Evaluaciones de funciones utilizando el método del punto fijo en cada paso de quemado en cálculo con RELAP5 y Fermi	63
A.1. Definición del problema de acoplamiento en el SSP de un reactor de investigación	71
B.1. Instancias de cálculo de las variables relacionadas con cada programa <i>esclavo</i>	79

Índice de tablas

3.1. Principales resultados del cálculo para el análisis de la fuente fría variando la magnitud de la fuente interna y la altura del sistema de enfriamiento	28
3.2. Principales resultados del cálculo para el análisis de la fuente fría variando la longitud de cañerías del sistema de enfriamiento	29
3.3. Parámetros del subsistema del tanque del reflector con acople de sección de red hidráulica	34
3.4. Evaluaciones totales y tiempo total requerido por cada método no lineal en cálculo de quemado con RELAP5 y Fermi	57
3.5. Evaluaciones totales y tiempo total requerido por cada método no lineal en cálculo de quemado con RELAP5 y Fermi	62

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, FLUJO MULTIFASE, 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 neutronic-thermohydraulic coupling are shown.

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

Capítulo 1

Introducción

“No se involucre en problemas parciales, siempre tome vuelo hacia donde hay una vista libre sobre el gran problema único, incluso cuando esta visión todavía no sea clara.”

— 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 problemas complejos en subsistemas que puedan ser analizados 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

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 Disjunta de Dominios [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 $S_i, l = 1, \dots, L_i$.
- 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 I_l del subsistema $S_i, m = 1, \dots, M_i$.
- $(\bar{x})_{S_i}^{I_l}$ es el vector de incógnitas $\{x_1, x_2, \dots, x_{M_i}\}$ en la interfaz l del subsistema i .

La idea ahora es resolver los subsistemas por separado, pero en principio esto no es posible porque las condiciones de borde de las interfaces de acople son desconocidas. Es decir, existen tantas incógnitas como 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 necesarias para despejar las incógnitas se encuentran a partir del modelo de estudio de cada subsistema. Sean $(\mathcal{F}_m)_i^l$ las relaciones funcionales que calculan el valor de las

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 sistema complejo analizado mediante el Método de Descomposición Disjunta de Dominios.

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 . Se tiene que:

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

donde los valores $\alpha_i(\Gamma_i)$ representan las condiciones de borde impuestas sobre la curva Γ_i . Estas relaciones $(\mathcal{F}_m)_i^l$, básicamente, mapean condiciones de borde de un tipo, que son impuestas como datos, en condiciones de borde de otro tipo. Notar que algunas de las dependencias pueden anularse dependiendo del modelo de estudio utilizado en cada subsistema. Cuando la expresión 1.2 es más sencilla y solo involucra el valor de otro tipo de condición de borde para la misma interfaz, la relación funcional recibe el nombre de operador *Steklov-Poincaré*². Considerando estas ecuaciones, el problema

² 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.

general abordado mediante el Método de Descomposición Disjunta de Dominios queda bien definido.

Estrategia de resolución del acoplamiento

Una vez planteadas las ecuaciones del problema, es necesario definir una estrategia de resolución. A continuación se propone un problema didáctico para comprender las estrategias de acoplamiento posteriormente cometandas.

Problema: Cálculo de temperaturas con el Método de Descomposición Disjunta de Dominios

Se desea resolver un problema de cálculo de campo de temperatura mediante el Método de Descomposición Disjunta de Dominios. El sistema global de análisis es una barra unidimensional de longitud L con condiciones de borde homogéneas, fuente interna de energía f y conductividad térmica k . El modelo matemático utilizado es el siguiente:

$$\begin{cases} -k\Delta u = f \\ u|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases} \quad (1.3)$$

Resolver el problema particionando el dominio original $[0, L]$ en los subdominios $[0, c]$ y $[c, L]$ como se muestra en la Figura 1.2:

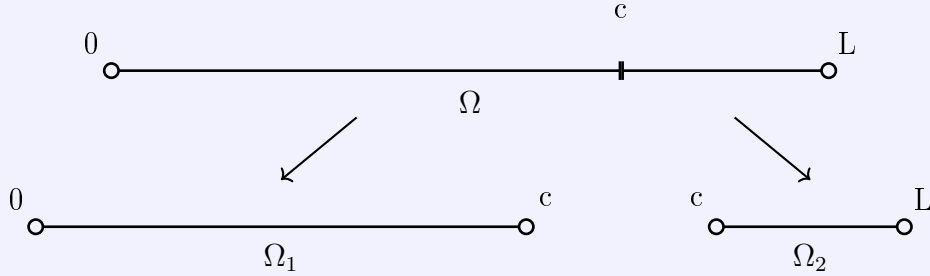


Figura 1.2: Descomposición disjunta de dominios en el cálculo del campo de temperatura a lo largo de una barra unidimensional.

El método consiste en la resolución de 1.3 en cada subdominio, pero la condición de borde en $\partial\Omega$ ahora aplica solo sobre el borde original del dominio. Para que cada problema quede bien planteado es necesario imponer una condición de borde extra en el punto de acople c de cada subsistema. Esta decisión depende de la estrategia empleada para resolver el acoplamiento.

La forma clásica de resolución es el método *Dirichlet-to-Neumann*. Este método es un método explícito de simple implementación, que resuelve el acoplamiento mediante iteraciones de tipo *Picard*. En el método *Dirichlet-to-Neumann*, es necesario decidir qué subsistema va a ser resuelto en primera instancia, y qué tipo de condición de borde se le va a aplicar. Estas primeras decisiones son arbitrarias. En la resolución del ejemplo se decide comenzar con el subsistema de la izquierda e imponer una temperatura

$(T^{guess})_{S_1}$ (condición *Dirichlet*) en su interfaz de acople. Luego de realizar el cálculo de temperaturas queda definido un flujo de calor a través de esta interfaz. Es decir, uno de los valores de las incógnitas en la interfaz de acople se calcula como función del valor de la otra incógnita, que fue supuesta como dato, a partir de la relación 1.2. En este caso la relación recibe el nombre de operador *Steklov-Poincaré* y se define como:

$$(q^{''calc})_{S_1} = \mathcal{N}_1((T^{guess})_{S_1}) \quad (1.4)$$

donde \mathcal{N} es el operador que mapea condiciones de borde de tipo *Dirichlet* en condiciones de borde de tipo *Neumann* y $(q^{''calc})_{S_1}$ es el flujo de calor calculado. En base a la relación de continuidad 1.1 este flujo de calor se impone en el segundo subsistema como condición de borde. Esta condición define nuevamente una temperatura $(T^{calc})_{S_2}$ en la interfaz de acople, mediante el operador *Steklov-Poincaré* definido en este subdominio:

$$(T^{calc})_{S_2} = \mathcal{D}_2((q^{''calc})_{S_1}) \quad (1.5)$$

donde \mathcal{D} es el operador que mapea condiciones de borde de tipo *Neumann* en condiciones de borde de tipo *Dirichlet*. Si $(T^{calc})_{S_2}$ coincide con $(T^{guess})_{S_1}$ inicialmente supuesta, los resultados están convergidos y entonces finaliza el cálculo. En caso contrario, el proceso debe repetirse, pero ahora se impone $(T^{calc})_{S_2}$ al primer subsistema. El cálculo continúa así hasta que los valores $\{(q^{''calc})_{S_1}, (T^{calc})_{S_2}\}$ convergen en iteraciones contiguas.

Si inicialmente se hubiera impuesto una condición de tipo *Neumann* en el primer subdominio, necesariamente al segundo subdominio debería habersele impuesto una condición de tipo *Dirichlet*, ya que la variable calculada en la interfaz de acople por el primer subsistema hubiera sido una temperatura. Es decir, al utilizar el método *Dirichlet-to-Neumann*, la elección de un tipo de frontera en un subdominio dado determina el tipo de frontera en el subdominio contiguo, para las ecuaciones que relacionan las mismas variables de estado en ambos subsistemas (aquí solo existe una única variable de estado, la temperatura). Esta característica es un poco restrictiva, ya que no permitiría, por ejemplo, que todos los subproblemas de análisis se resuelvan con condiciones de borde de tipo *Dirichlet*.

Sin embargo esta no es la única desventaja del método *Dirichlet-to-Neumann*. Otra desventaja es que en general requiere demasiadas iteraciones para converger [5]. En algunos problemas el método puede quedar estancado, iterando en series de valores que se repiten en ciclo. Y en otros casos el método es divergente (sin ir más allá, para un cierto conjunto de parámetros del problema ejemplo analizado, el método diverge, ver [6]).

Existen formas alternativas para resolver el acoplamiento. Una de ellas es utilizar

el método del punto fijo. En este método, inicialmente se propone un vector semilla $\{T^{guess}, q''^{guess}\}$ con valores para todas las incógnitas al mismo tiempo. Se decide arbitrariamente el tipo de condición de borde impuesta a cada subsistema, con la condición de que deben cubrir todos los valores de cálculo. En el ejemplo presentado, alguno de los subsistemas debe calcular $\{T^{calc}$ y otro $\{q''^{calc}$. Luego se computan los residuos $(r_m)_i^l$ entre los valores propuestos y los valores calculados para cada variable.

$$(r_m)_i^l = (x_m^{guess})_{S_i}^{I_l} - (x_m^{calc})_{S_i}^{I_l} \quad (1.6)$$

donde m es el índice de incógnita, l de la interfaz e i del subsistema. Considerando que el primer subsistema se resuelve con condiciones de borde de tipo *Dirichlet* y el segundo con condiciones de borde de tipo *Neumann* el sistema de residuos queda:

$$\begin{cases} (r_{q''})_{S_1}^1 = (q''^{guess}) - (q''^{calc})_{S_1} \\ (r_{q''})_{S_2}^1 = (T^{guess}) - (T^{calc})_{S_2} \end{cases} \quad (1.7)$$

La convergencia fuerte de los subsistemas acoplados requiere que estos residuos sean nulos, y por lo tanto se busca el siguiente resultado:

$$\bar{r}(\bar{x}^{guess}) = \bar{0} \quad (1.8)$$

donde \bar{r} es el vector de residuos de las ecuaciones, y \bar{x}^{guess} es el vector que contiene los valores $(x_m^{guess})_{S_i}^{I_l}$ propuestos. Comúnmente en el primer cálculo esto no sucede, y por lo tanto es necesario realizar iteraciones hasta obtener convergencia. En el método del punto fijo, los valores calculados conforman directamente el vector semilla para cada nueva iteración. Es decir, en la iteración n , se utiliza como semilla \bar{x}_n^{guess} el resultado de la iteración previa \bar{x}_{n-1}^{calc} . Si bien este método tiene similares desventajas al método *Dirichlet-to-Neumann* porque es otro método explícito, acelera el tiempo de cálculo ya que permite resolver los diferentes subsistemas de estudio al mismo tiempo.

Otra alternativa para resolver el acoplamiento es hacerlo en forma implícita. En este caso las elecciones para las condiciones de borde en cada subsistema son independientes entre sí. En el ejemplo presentado, ambos subsistemas podrían tener fronteras tipo *Dirichlet*. Al igual que en el método del punto fijo, se propone un vector semilla $\{T^{guess}, q''^{guess}\}$ con valores para todas las incógnitas al mismo tiempo. Ambos subsistemas imponen el valor T^{guess} como condición de borde en sus interfaces de acoplamiento, y calculan el valor del flujo de calor en la misma interfaz, mediante los operadores de *Steklov-Poincaré* \mathcal{N}_1 y \mathcal{N}_2 :

$$\begin{cases} (q''_{calc})_{S_1} = \mathcal{N}_1((T^{guess})_{S_1}) \\ (q''_{calc})_{S_2} = \mathcal{N}_2((T^{guess})_{S_2}) \end{cases} \quad (1.9)$$

Finalmente, se computan los residuos:

$$\begin{cases} (r_{q''})_{S1}^1 = (q''^{guess})_{S1} - (q''^{calc})_{S1} \\ (r_{q''})_{S2}^1 = (q''^{guess})_{S2} - (q''^{calc})_{S2} \end{cases} \quad (1.10)$$

Como en 1.8, también se busca que los residuos sean nulos, pero en este caso en las iteraciones que pueden llegar a requerirse para obtener la convergencia deseada las semillas sucesivas se generan mediante algún método numérico de mayor orden de convergencia. Esta estrategia es robusta, evade el problema de quedar estancada proponiendo series de valores que se repiten en serie y debido a los mayores órdenes convergencia reduce los tiempos de cálculo. En la siguiente sección se comentan diferentes métodos numéricos que pueden utilizarse para generar estas semillas.

Métodos numéricos para la resolución de sistemas de ecuaciones de residuos

Existen diferentes métodos numéricos para hallar las raíces del sistema de ecuaciones 1.8.

Los métodos más eficientes para la resolución de sistemas de ecuaciones de residuos son métodos implícitos, en los que la semilla para cada iteración no es directamente el resultado obtenido en la iteración previa. De ahora en adelante para simplificar la notación se usa \bar{x}_n en lugar de \bar{x}_n^{guess} . Haciendo un desarrollo de Taylor de las ecuaciones de residuos alrededor del punto \bar{x}_n , truncando los términos superiores al primer orden, y evaluando en $\bar{x} = \bar{x}_{n+1}$ se tiene:

$$\bar{r}(\bar{x}_{n+1}) = \bar{r}(\bar{x}_n) + \nabla \bar{r}(\bar{x}_n)(\bar{x}_{n+1} - \bar{x}_n) \quad (1.11)$$

donde $\nabla \bar{r}(\bar{x}_n)$ es la matriz jacobiana del sistema \mathbb{J} evaluada en el punto \bar{x}_n , cuyo elemento J_{ij} debe evaluarse como $J_{ij} = \frac{\partial r_i}{\partial x_j}$. Suponiendo que \bar{x}_{n+1} tiende a la raíz buscada se ha de cumplir que $\bar{r}(\bar{x}_{n+1}) = 0$. Sustituyendo en 1.11 y operando algebraicamente se llega a la siguiente expresión:

$$\bar{r}(\bar{x}_n) = -\mathbb{J}(\bar{x}_n)(\bar{x}_{n+1} - \bar{x}_n) \quad (1.12)$$

Para hallar la solución \bar{x}_{n+1} simplemente hay que resolver el sistema:

$$\bar{x}_{n+1} = \bar{x}_n - \mathbb{J}^{-1}(\bar{x}_n)\bar{r}(\bar{x}_n) \quad (1.13)$$

que es el método de iterativo *Newton-Raphson*. La principal ventaja de este método es que tiene orden de convergencia cuadrática, pero la desventaja 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 numerosas evaluaciones. Cada elemento $J_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial x_j}$ puede aproximarse mediante diferencias finitas a primer orden como:

$$J_{ij} \approx \frac{r_i(\bar{x}_j + \Delta \bar{x}_j) - r_i(\bar{x}_j)}{\|\Delta x_j\|} \quad (1.14)$$

donde $\Delta \bar{x}_j$ es un vector que contiene valores nulos en todos sus elementos excepto en el elemento de la posición j , cuyo valor es la diferencia incremental para la variable j . La construcción de la matriz jacobiana con éste método requiere una evaluación del vector residuo \bar{r} en el punto \bar{x} y luego N_{unk} evaluaciones extras, donde N_{unk} es la cantidad total de incógnitas. Es decir, en total, se requieren $N_{unk} + 1$ evaluaciones. Si bien estas evaluaciones son independientes entre sí y por lo tanto altamente paralelizables, este método requiere excesivos recursos de cálculo.

Una forma alternativa y elegante de resolver el sistema de ecuaciones planteado en 1.8 es mediante métodos *quasi-Newton*. La característica principal de estos métodos es que aproximan la matriz jacobiana sin necesidad de realizar evaluaciones extras en todas las iteraciones, y por lo tanto tienen una ventaja fuerte frente al método de *Newton-Raphson*. Además, en general tienen mayor orden de convergencia que los métodos mediante iteraciones de *Picard*.

El método de *Broyden* es uno de estos métodos [7]. La matriz jacobiana \mathbb{B}_n en la iteración n es aproximada mediante una matriz \mathbb{B}_n que se construye solo en función del valor de los vectores incógnitas \bar{x}_{n-1} y \bar{x}_n , de los vectores residuos \bar{r}_{n-1} y \bar{r}_n , y de la matriz de la iteración previa \mathbb{B}_{n-1} :

$$\mathbb{B}_n = \mathbb{B}_{n-1} + \frac{\Delta \bar{r}_n - \mathbb{B}_{n-1} \Delta \bar{x}_n}{\|\Delta \bar{x}_n\|^2} \Delta \bar{x}_n^T \quad (1.15)$$

donde $\Delta \bar{r}_n = \bar{r}_n - \bar{r}_{n-1}$ y $\Delta \bar{x}_n = \bar{x}_n - \bar{x}_{n-1}$. Existe una variante del método, el método *Broyden ortonormal* [8], que aproxima la matriz \mathbb{B}_n en función de una base vectorial de residuos previos calculados. Este método asegura la convergencia en una cantidad finita de iteraciones para sistemas lineales, (la cantidad de iteraciones requerida es la dimensión de la matriz jacobiana). Ambos métodos tienen convergencia superlineal [9].

Otro métodos *quasi-Newton* muy utilizados son el método de la secante (*chord method*) [9] y el método de *Shamanskii* de tipo m . El primero calcula la matriz jacobiana solo en la primer iteración y la utiliza sin actualizaciones en el resto de las iteraciones. El segundo también calcula la matriz jacobiana en la primer iteración, y vuelve a calcularla cada m iteraciones. Este método también tiene convergencia superlineal [9].

Existe también un conjunto de métodos conocidos como métodos *Newton-Krylov* [9] para la resolución del sistema 1.8. Estos métodos no requieren el cálculo de matriz jacobiana (*matrix-free methods*). Sin embargo, en cada paso de iteración de resolución del sistema no lineal (*outer iteration*) requieren múltiples iteraciones del método de

Krylov (*inner iterations*), y en cada una de ellas calculan variaciones en las direcciones de descenso seleccionadas, lo cual implica múltiples evaluaciones de funciones. Por este motivo estos métodos resultan altamente costosos.

En la resolución de sistemas de ecuaciones no lineales mediante cualquiera de los métodos implícitos puede utilizarse una técnica de aceleración conocida en la bibliografía como *line searching* [9]. Esta técnica consiste en búsquedas del mínimo a lo largo de la última dirección de cambio en cada iteración, empleando evaluaciones de funciones extras.

Problemas de evolución

En problemas de evolución la estrategia es permitir que cada subsistema avance por separado acoplando sus resultados mediante las ecuaciones 1.8 solo cada ciertos pasos. Esto se permite porque cada subsistema podría requerir subpasos de evolución diferentes³. Notar que no es necesario mantener la misma estrategia de selección de condiciones de borde para cada interfaz a lo largo de la evolución. Las variables que son datos o incógnitas para cada subdominio pueden irse alternando, seleccionando diferentes ecuaciones 1.2 a resolver en diferentes pasos de acople. Debido a la convergencia fuerte de los valores de las variables en las interfaces de acople, el método es incondicionalmente estable a lo largo de la evolución.

1.3. Objetivos y estructura de trabajo

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

Desarrollar una estrategia de resolución de problemas complejos formulados mediante el Método de Descomposición Disjunta de Dominios que permita resolver subproblemas separados con códigos de cálculo específicos, manteniendo la interacción entre ellos solo 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 plantear problemas complejos mediante el Método de Descomposición Disjunta de Dominios, y se han presentado alternativas numéricas para la resolución de las mismas. En el Capítulo 2 se describe la estrategia

³ Distintos subdominios pueden tener diferentes requisitos sobre el parámetro de evolución, dependiendo de la física implicada. Algunos, por ejemplo, podrían experimentar transitorios fluidodinámicos, en los que es de interés mantener por debajo de algún valor ciertos parámetros numéricos (como el número de *Courant*) proporcionales al paso de tiempo. Otros, en cambio, podrían estar siendo resueltos mediante métodos complejos que consumieran elevados recursos temporales, por tanto sería de interés utilizar subpasos evolutivos mayores.

para la resolución de problemas acoplados mediante diferentes programas de cálculo. Se presenta la estructura de comunicación definida y se describen las implementaciones necesarias para su funcionamiento. En el [Capítulo 3](#) se muestran algunas aplicaciones de la herramienta estudiada. La primera aplicación es un sistema fluídico cerrado gobernado por fuerzas de convección natural, que representa una fuente fría de neutrones y se estudia subdividiéndolo en dos subsistemas, con dos interfaces de acople cada uno. El siguiente sistema de estudio es el vaciado del tanque reflector de un reactor de investigación. Interesa analizar el tiempo de descarga ya que el mismo es diseñado como sistema de seguridad. 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 un modelo cero-dimensional que representa el resto del sistema. El tercer sistema de análisis es un modelo de redes hidráulicas con múltiples componentes. Con este estudio se busca demostrar la eficiencia de la herramienta en acoples fluidodinámicos de mayor escala. Sobre el final del capítulo se extiende la herramienta a problemas multifísicos que engloban el acoplamiento fuerte de múltiples fenómenos. Se analizan dos ejemplos de acoplamiento neutrónico-termohidráulico.

Capítulo 2

Estrategia de resolución mediante acoplamiento de códigos

“Construimos demasiadas murallas y no suficientes puentes.”

— Sir Isaac Newton, 1643-1727

2.1. Paradigma maestro-esclavo

La estrategia general para la resolución de problemas acoplados mediante el Método de Descomposición Disjunta de Dominios es comentada a continuación. Los problemas parciales pertenecientes a distintos subdominios se resuelven con diferentes códigos específicos. Cada uno de estos códigos recibe valores de condiciones de borde y en base a ellos se encarga de calcular el valor de las incógnitas en las interfaces de acople mediante las ecuaciones 1.2. Existe un único programa que acopla los resultados. Este programa se abstrae completamente de la física implicada en cada subsistema. Simplemente recibe los valores para las incógnitas calculados por los diferentes programas y con ellos resuelve el sistema de ecuaciones de residuos 1.8. En base a estos residuos propone¹ nuevos valores para las incógnitas en las interfaces de acople y los comunica nuevamente a los demás programas. Este tipo de comunicación utilizado recibe el nombre de *maestro-esclavo* [10], en el cual existe un programa *maestro* que tiene el control unidireccional sobre los demás programas, que actúan bajo el rol de *esclavos*. Además del envío y recepción de valores de variables, son funciones del código *maestro* el envío de órdenes a sus *esclavos* de comenzar el cálculo en un dado paso de evolución, reiniciar el cálculo o incluso abortar.

Cabe notar que cada código *esclavo* podría ejecutarse en varios procesos, paralelizando sus cálculos, ya sea mediante memoria compartida como mediante memoria

¹ Esta propuesta reside en el método de resolución de ecuaciones no lineales seleccionado, ver sección 1.2.

distribuida. Incluso podrían lanzarse diferentes procesos del código *maestro* en la resolución de algún problema. Debido a la complejidad en destinatarios de mensajes, cantidades y tipos de variables a compartir, es necesario definir una estrategia clara de comunicación que permita acoplar diversos códigos de manera genérica, segura y eficaz. La estrategia definida es comentada en la siguiente sección.

2.2. Modelos de comunicación

La configuración *maestro-esclavo* requiere la ejecución de múltiples programas independientes. Al mismo tiempo, cada código podría estar corriendo en forma paralelizada². Debido a esta complejidad es necesario planificar la estrategia de comunicación considerando la distribución del cálculo en múltiples procesadores, con el objetivo de no perder generalidad en la herramienta desarrollada. Los modelos de comunicación implementados son los siguientes:

- Paso de mensajes: este modelo es implementado para comunicar procesos de programas en los cuales es posible modificar sus códigos fuente.
- Lectura y escritura de archivos de entrada y salida: este modelo es implementado para comunicar procesos de programas en los cuales no es posible modificar sus códigos fuente.

En ambos casos los programas esclavos se comunican solo con el programa *maestro*. Si bien estos modelos involucran comunicaciones remotas que son más lentas que las comunicaciones locales, en general su latencia es despreciable frente al tiempo de cálculo de los procesos *esclavos*.

Paso de mensajes

En sistemas de memoria distribuida, el paso de mensajes es un método de programación utilizado para realizar el intercambio de datos entre procesos [11]. El paso de mensajes involucra la transferencia de datos desde un proceso que envía a otro proceso que recibe. El proceso que envía, necesita conocer la localización, el tamaño y el tipo de los datos, así como el proceso destino.

Estas funcionalidades se implementaron siguiendo el protocolo del estándar Interfaz de Paso de Mensajes (MPI, por sus siglas en inglés). MPI es una especificación de paso de mensajes aceptada como estándar por todos los fabricantes de computadores.

² En general, cada programa *esclavo* es un programa que ya ha sido utilizado y validado para algún tipo de cálculo. Si el código está paralelizado, en base a estudios de *speedup* podría tenerse cierta experiencia en su modo de ejecución óptimo para alguna tarea dada. Esta ejecución podría requerir múltiples nodos en un clúster, por ejemplo.

El objetivo principal de MPI es proporcionar un estándar para escribir programas (lenguajes C, C++, Fortran) con paso de mensajes. De esta forma, se pretende mejorar la portabilidad, el rendimiento, la funcionalidad y la disponibilidad de las aplicaciones.

Se utilizaron dos implementaciones alternativas. En la primera, cada código *esclavo*, así como el código *maestro*, es ejecutado de manera independiente, y luego se establecen los comunicadores de acuerdo a las rutinas establecidas en el estándar MPI 2.0. En estas rutinas el código *maestro* publica una serie de puertos a los cuales cada código *esclavo* debe conectarse. Una vez aceptadas las conexiones, los programas pueden intercambiar mensajes con él siguiendo una lógica preestablecida. Cuando ya no es necesario que los programas continúen comunicándose, se cierran las conexiones.

En la otra implementación, todos los programas son ejecutados en simultáneo. En este tipo de ejecuciones todos los procesos cuentan con un único comunicador original, `MPI_COMM_WORLD`, y por ello es necesario crear nuevos grupos de procesos y de comunicadores. Una vez establecidos los comunicadores, los programas ya pueden intercambiar mensajes con el código *maestro* siguiendo la misma lógica que se establecerá para ambos modelos. Si bien esta implementación no es posible para nuevas conexiones una vez que los programas han sido ejecutados, son mucho más seguras, ya que no dependen del éxito de encontrar los puertos requeridos para las conexiones.

Lectura y escritura de archivos de entrada y salida

La comunicación mediante lectura y escritura de archivos se implementó para demostrar la capacidad de acoplar códigos cuyos códigos fuente no son capaces de ser modificados. La idea principal es ejecutar corridas simples del código *esclavo* cada vez que se requiera su evaluación. En problemas de evolución, estas corridas simples solo viven para realizar un cálculo entre dos pasos de evolución acoplados. Las corridas son administradas por el código *maestro*. El código *maestro* escribe en el archivo de entrada del programa *esclavo* todos los parámetros necesarios para la ejecución del cálculo, ordena su ejecución, espera a que este termine y luego realiza una búsqueda de los valores de las variables de interés en archivos de salida.

Es necesario notar que este modelo de comunicación no es tan eficiente como el de intercambio de mensajes, ya que la lectura y escritura de archivos consume mayores recursos de tiempo, por lo que, siempre que fuera posible, es recomendable implementar el otro modelo. Además, requiere la programación de rutinas extra específicas dedicadas a la escritura de archivos de entrada y lectura de archivos de salida de distintos códigos *esclavos*.

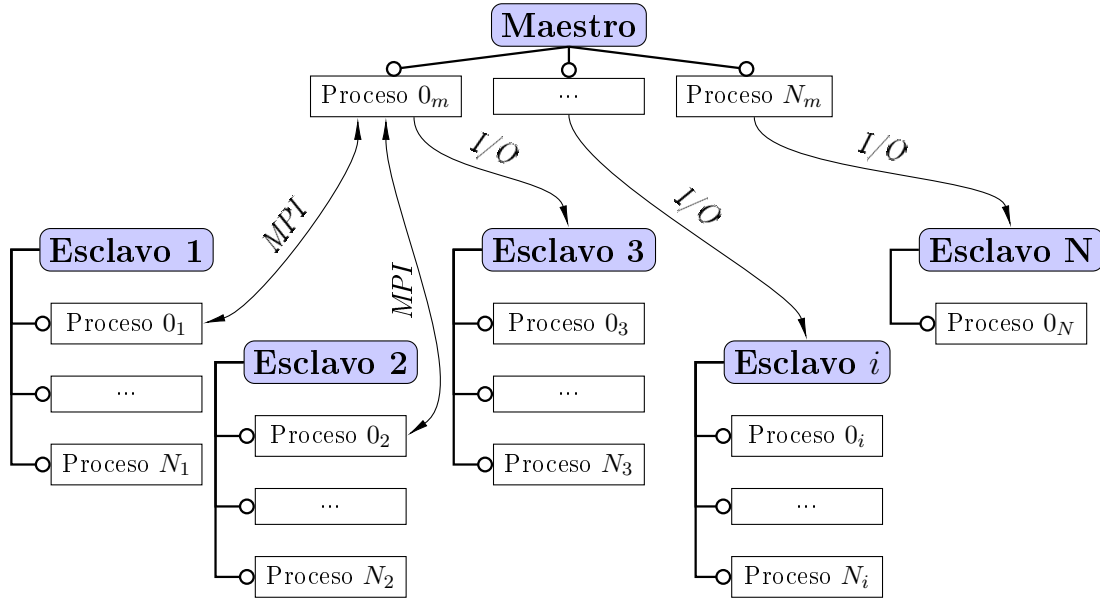


Figura 2.1: Esquema de comunicación entre los programas *esclavos* y el programa *maestro* implementado en el acoplamiento de códigos. Los *esclavos* se comunican solo con el *maestro* y no intercambian datos entre sí. Se utilizan dos modelos de comunicación diferentes. En el primero, cada código *esclavo* es comunicado con el código *maestro* a por paso de mensajes (indicado como *MPI*). Como podrían correr en modo serial o paralelo, solo sus procesos *raíces* establecen la comunicación con el proceso *raíz* del programa *maestro*. En el segundo modelo de comunicación, los códigos *esclavos* son directamente *ejecutados* por el programa *maestro* en uno o varios procesos. En este modelo, la comunicación se establece solo mediante lectura y escritura de archivos (indicado como *I/O*).

Estructura de comunicación implementada

Se desarrollaron funciones híbridas con la finalidad de cubrir todas las formas de comunicación descritas en la sección previa. En el caso de comunicación por intercambio de mensajes, la estrategia definida es establecer comunicación siempre entre un único proceso del código *maestro*, el proceso *raíz*, y un único proceso de cada código *esclavo* (sus propios procesos *raíces*³). En el caso de comunicación por manejo de archivos, la estrategia definida paraleliza las responsabilidades entre todos los procesos lanzados del código *maestro*. El esquema 2.1 resume la estrategia de comunicación.

2.3. Códigos maestros utilizados

En este trabajo se utilizaron dos códigos *maestros* que cumplen con la estrategia de acoplamiento descrita previamente. El primer código *maestro* utilizado es el código **Coupling** [1] [2] [3]. **Coupling** utiliza los modelos de comunicación por paso de mensaje entre programas ejecutados de manera independiente. El código está diseña-

³ Es responsabilidad del código *esclavo* la comunicación de los datos recibidos por el proceso *raíz* a los demás procesos.

do de tal forma que los códigos acoplados resuelvan las ecuaciones 1.2 para pares de incógnitas en las interfaces. Cada par de incógnitas debe contener una variable que corresponda a una condición de borde de tipo *Dirichlet* y otra variable que corresponda a una condición de borde de tipo *Neumann*. Con la idea de extender estas capacidades al acoplamiento de programas que pudieran ser ejecutados en simultáneo, al acoplamiento de programas por lectura y escritura de archivos, y al acoplamiento de programas cuyos cálculos no dependieran exclusivamente de condiciones de borde dinámicas, sino también de otros parámetros del sistema que estuvieran acoplados⁴, se desarrolló un código más genérico de acoplamiento, el código **Newton** [12]. En los Apéndices A y B se describen las principales características de ambos códigos.

2.4. Arquitectura de acoplamiento montada en código *esclavo* comunicado por paso de mensajes

En general, el código *esclavo* es un programa de cálculo particular que no ha sido diseñado para mantenerse acoplado a otro código. En esta sección se demuestra cómo mediante unas mínimas modificaciones en sus rutinas es posible implementar un acoplamiento eficiente por paso de mensajes.

Las acciones de acoplamiento se reúnen en cuatro instancias diferentes:

1. al principio del programa;
2. al principio de cada paso de evolución acoplado;
3. al finalizar cada paso de evolución acoplado;
4. al finalizar el programa.

En cada una de estas instancias el programa *esclavo* debe llamar a una función específica de acoplamiento. El programador podría definir una nueva variable *booleana* que a modo de bandera indique cuándo se está realizando un cálculo acoplado para realizar los llamados o evadirlos. Los problemas que no involucran evolución de variables pueden ser tratados como problemas con un solo paso de evolución. A continuación se describen las instancias de acoplamiento.

Acoplamiento en instancia 1: al principio del programa

En esta instancia es necesario establecer la comunicación *MPI* entre el proceso *raíz* del código *esclavo* y el código maestro. Si ambos programas han sido ejecutados en forma independiente los pasos a realizar son los siguientes:

⁴ Estas capacidades se extendieron con el objetivo de resolver problemas que involucraran distintos modelos físicos dentro del mismo dominio de cálculo (ver 3.4).

- búsqueda del puerto publicado por el proceso *raíz* del programa *maestro*;
- conexión del proceso *raíz* del programa esclavo a este puerto y creación del comunicador.

Si, en cambio, los programas han sido ejecutados en simultáneo, los pasos a realizar son los siguientes:

- creación de grupo global de procesos;
- creación de subgrupo local de procesos;
- creación de un comunicador dentro del subgrupo previo, necesario para el paso de mensajes dentro del programa;
- creación de un grupo entre el proceso *raíz* del programa esclavo y el proceso *raíz* del programa *maestro*;
- creación de un comunicador en el grupo previo, necesario para el paso de mensajes de acople.

Una vez implementada la comunicación, el código *esclavo* puede recibir datos generales (como parámetros de evolución iniciales, cantidad de pasos de evolución, cantidad de incógnitas en interfaces de acople, cantidad de interfaces de acople, etc.), y chequear la consistencia con los datos propios del programa. Si es necesario, los datos locales pueden ser cambiados notificando al usuario.

Acoplamiento en instancia 2: al principio de cada paso de evolución acoplado

La estrategia de acoplamiento se define entre el parámetro de evolución inicial $t_{coup,0}$ y el parámetro final $t_{coup,N}$, con $N+1$ pasos de acoplamiento cada $\Delta t_{coup} = \frac{t_{coup,N} - t_{coup,0}}{N}$. La solución para $t_{coup,0}$ es la condición inicial del problema, y es dato para todos los programas. Antes de resolver la solución para $t_{coup,1}$, se llama a las funciones de acoplamiento correspondientes a la instancia 2, en las cuales se reciben los valores de condiciones de borde necesarios. En base a estos valores, el programa *esclavo* resuelve las ecuaciones implicadas en el subdominio correspondiente. Este proceso debe repetirse previo al cálculo de cada instancia i acoplada en $t_{coup,i}$.

Es posible que cada código *esclavo* utilice subpasos de evolución Δt_{local} locales (como se explicó en el apartado 1.2), por lo cual requerirá valores extras para las condiciones de borde en estos pasos. En estos casos, se implementa una estrategia de interpolación de valores entre la solución acoplada previa, y los valores recibidos para el siguiente paso acoplado.

Acoplamiento en instancia 3: al finalizar cada paso de evolución acoplado

Una vez resuelto cada Δt_{coup} , el programa *esclavo* envía al programa *maestro* los valores de las incógnitas calculadas en las interfaces de acoplamiento. Tras este envío, el programa *esclavo* queda en espera de la orden para continuar. Si el programa *maestro* estuviera conectado a otros códigos *esclavos*, en esta instancia también debe recepcionar los valores de las incógnitas calculados ellos. Una vez que recibió todos los valores calculados para las incógnitas de acoplamiento, resuelve las ecuaciones de residuos 1.8. Si el módulo del residuo cae por debajo de cierta tolerancia prefijada el código *maestro* acepta los resultados y envía a sus *esclavos* la orden de continuar con el cálculo. En caso contrario, puede enviarles la orden de volver a calcular el mismo paso de acoplamiento, o incluso de abortar.

Acoplamiento en instancia 4: al finalizar el programa

Antes de finalizar el programa, es necesario cerrar las conexiones, liberar los grupos y los comunicadores establecidos. El programa *esclavo* debe recibir una orden para ejecutar estas acciones.

La Figura 2.2 esquematiza las instancias 1, 2, 3 y 4 en la resolución de un problema sencillo en que se acoplan dos programas *esclavos* al programa *maestro*. En este ejemplo, las variables $\{x, y\}$ son las incógnitas de acoplamiento. La estrategia definida consiste en imponer al primer subdominio un valor *guess* para x y al segundo subdominio un valor *guess* para y . En primer lugar se establecen los comunicadores entre el programa *maestro* y los programas *esclavos*. **Maestro** es el programa que se ocupa de proponer los valores *guess* y de enviarlos a los *esclavos*. El programa **Esclavo 1** resuelve cada paso de evolución acoplado Δt_{coup} en función del valor x_{guess} recibido, y envía a **Maestro** el valor y calculado a partir de él. El programa **Esclavo 2** calcula x en función de y_{guess} y también envía el resultado a **Maestro**. Notar que cada código i puede utilizar una discretización de N_i subpasos de evolución locales para resolver cada Δt_{coup} . Luego de que **Maestro** recibe los valores calculados, resuelve las ecuaciones de residuos y decide si los resultados están convergidos o si es necesario continuar con las iteraciones dentro del paso de evolución. Una vez asegurada la convergencia, se actualiza el parámetro de evolución y se procede a resolver el paso siguiente. Cuando el parámetro de evolución alcanza el valor final t_f , se termina el cálculo y se procede a la liberación de comunicadores.

En problemas que implican la resolución de casos estacionarios, es decir, sin evolución de variables, el esquema de abordaje es idéntico. En la Figura 2.2 podría pensarse que se resuelve un único paso temporal ficticio, sin la necesidad de imponer condiciones

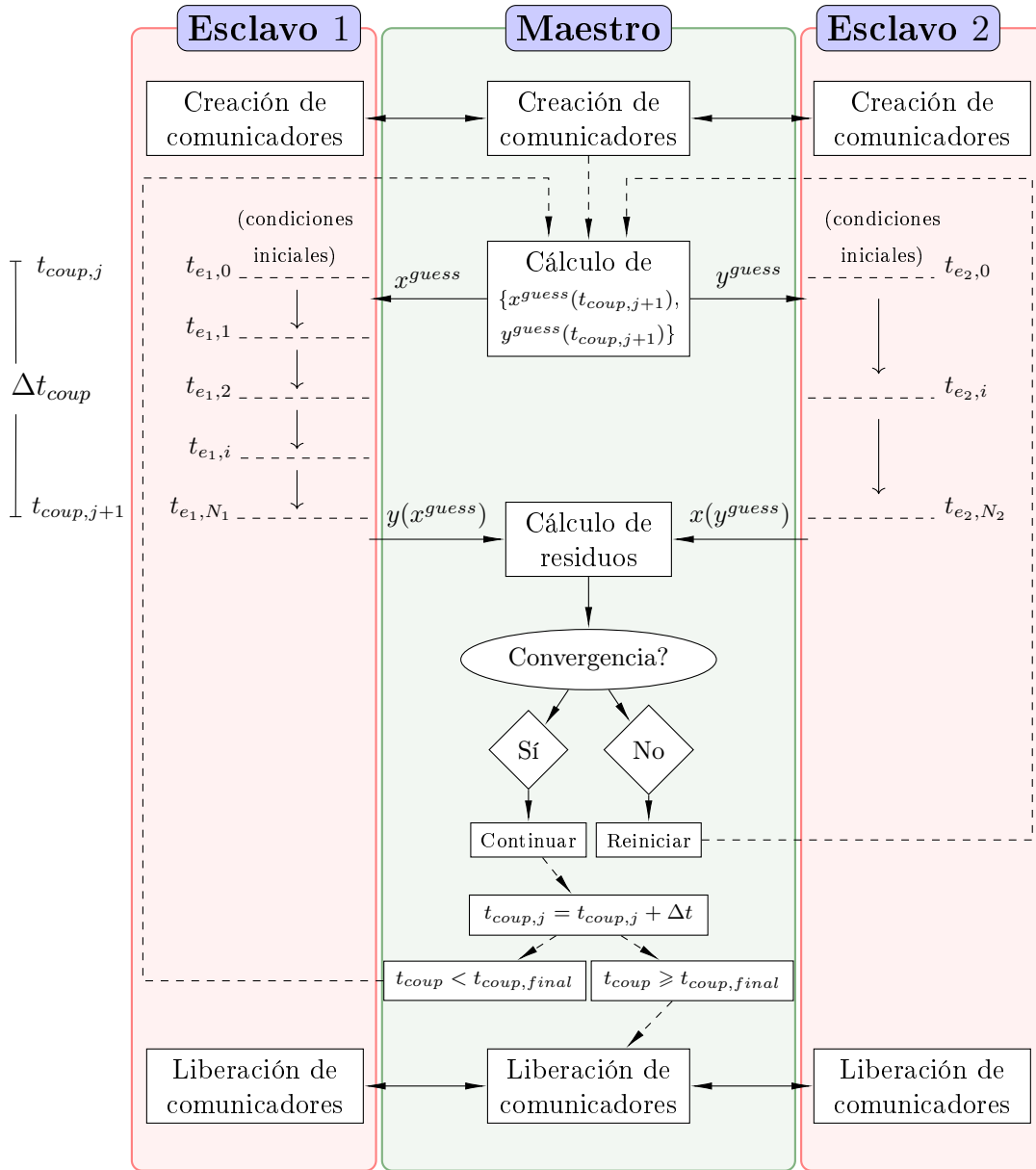


Figura 2.2: Esquema de acoplamiento entre el programa *maestro* y los programas *esclavos*. En el ejemplo, cada código *esclavo* resuelve ecuaciones diferenciales en distintos subsistemas. Estos subsistemas están acoplados entre sí en alguna interfaz en las que las variables $\{x, y\}$ son incógnitas. Los cálculos se acoplan cada Δt_{coup} , pero cada programa utiliza subpasos de cálculos locales. Una vez generados los comunicadores, el código **Esclavo 1** recibe como *guess* para el tiempo $t_{coup,1}$ la variable x^{guess} . El código **Esclavo 2** recibe alternativamente como *guess* para el tiempo $t_{coup,1}$ la variable y^{guess} . Al finalizar Δt_{coup} ambos programas devuelven al programa **Maestro** las variables conjugadas calculadas. **Maestro** computa los residuos entre los valores *guess* previamente propuestos y los valores recibidos. Si el residuo no supera cierta tolerancia prefijada, envía la orden de reinicio a cada programa *esclavo*, para volver a calcular el mismo paso de acoplamiento, tras lo cual enviará nuevos valores *guess* propuestos. En caso contrario, cuando los resultados convergen, envía la orden de continuación, y ambos *esclavos* prosiguen con el cálculo para el siguiente paso de evolución. Al finalizar el cálculo se liberan los comunicadores.

iniciales.

Cuando la comunicación entre programas se realiza mediante manejo de archivos, se respeta la misma estructura de acoplamiento, exceptuando las instancias relacionaadas a la creación y liberación de comunicadores, que son reemplazadas por instancias de manejo de archivos. El código *maestro* escribe los valores *guess* para las variables de acoplamiento en el archivo de entrada del código *esclavo*, y luego ordena su ejecución. El código *esclavo* solo vive para resolver Δt_{coup} , es decir, finaliza una vez que escribe los valores calculados en algún archivo de salida, que luego será leído por el código *maestro*.

Capítulo 3

Ejemplos de aplicación

3.1. Fluidodinámica en una fuente fría de neutrones

Presentación del problema

Como primer ejemplo se presenta un sistema que modela el movimiento de un fluido en régimen de convección natural a través de una fuente fría de neutrones alojada próxima al núcleo de un reactor de investigación [13]. El sistema se estudia analizándolo en dos subsistemas separados, definiendo dos interfaces de acople, y en cada una de ellas dos pares de variables dinámicas. El primer subsistema se utiliza para estudiar el comportamiento bidimensional en la cavidad de la fuente fría, donde el fluido modera los neutrones recibidos desde el núcleo del reactor, incrementando su temperatura. Este fenómeno se modela a través de una fuente interna en el fluido. El segundo subsistema representa el circuito de enfriamiento en el cual el fluido disipa energía a través de un intercambiador de calor. El comportamiento en este subsistema queda bien descrito con balances cero-dimensionales. Ambos subsistemas se comunican mediante dos conexiones, una ubicada en la parte inferior y la otra en la parte superior, definiendo un circuito cerrado en el que el flujo queda completamente dominado por convección natural. En la Figura 3.1 puede apreciarse un diagrama del sistema completo.

Subsistemas de estudio

El primer subsistema analizado es la cavidad donde los neutrones son moderados y es estudiada mediante un modelo bidimensional, con una longitud de lado $L_0 = 0,3 \text{ m}$, y área de las secciones a la entrada y a la salida de $A_1^1 = A_1^2 = 0,03 \text{ m}^2$. La diferencia de altura Δz entre la entrada y la salida es de $\Delta z = 0,4 \text{ m}$, ya que el subsistema incluye porciones de cañería en ambos extremos. El fluido de trabajo es deuterio líquido. Sus parámetros son: $\rho_0 = 163 \text{ Kg/m}^3$ a la temperatura de referencia T_{ref} , $\mu = 2,8 \cdot 10^{-5} \text{ Kg/ms}$, $c_p = 6333,6 \text{ J/KgK}$, $k = 0,136 \text{ W/mK}$ y $\beta = 1,32 \cdot 10^{-2} \text{ K}^{-1}$. Se considera

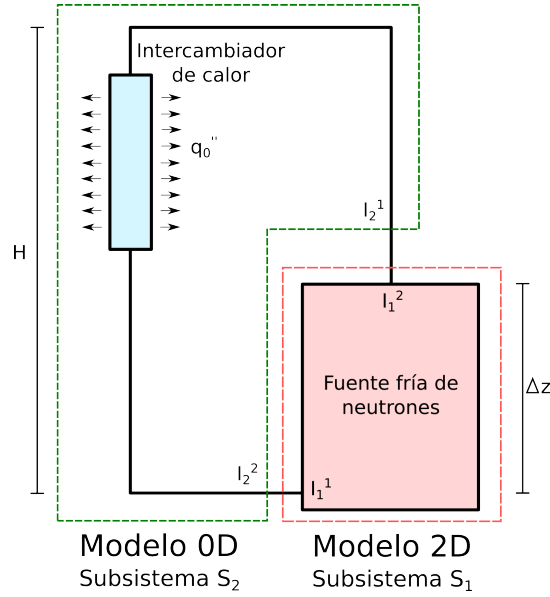


Figura 3.1: Modelo de la fuente fría de neutrones analizada. El subsistema S_1 es una cavidad con una fuente de energía interna y se estudia con un código bi-dimensional. El subsistema S_2 es el circuito de enfriamiento y se estudia con un código cero-dimensional. El sistema completo es abordado mediante la estrategia de Descomposición Disjunta de Dominios con condiciones de borde dinámicas para las interfaces I_1^1 e I_1^2 en S_1 y las interfaces I_2^1 e I_2^2 en S_2 .

que el fluido tiene una fuente interna f_0 , cuyo valor varía en diferentes modelos. La evolución de las variables en este subsistema se calcula resolviendo las ecuaciones de *Navier-Stokes* y de transporte de energía. Se utiliza la aproximación de *Boussinesq* considerando variaciones de densidad solo en el término de fuerza volumétrica. Las ecuaciones implementadas del modelo son las siguientes [14] [15]:

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) \bar{u} = -\frac{\nabla p}{\rho_0} + (1 - \beta(T - T_{ref})) \bar{g} \nabla \cdot [(\nu + \nu_T) (\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T)] \\ \nabla \cdot \bar{u} = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) T = \frac{k}{\rho_0 c_p} \Delta T + \frac{f_0}{\rho_0 c_p} \end{cases} \quad (3.1)$$

donde \bar{u} es el campo de velocidades dentro de la cavidad, p el campo de presiones y T el campo de temperaturas.

Las ecuaciones (3.1) se resuelven mediante la formulación *Petrov-Galerkin* [16] de elementos finitos, con elementos lineales para aproximar los campos de presiones, velocidades y temperaturas, estabilizando con los métodos *SUPG* [17] y *PSPG* [18]. El método *SUPG* (*Streamline Upwind Petrov-Galerkin*) se utiliza para estabilizar problemas de transporte con alto número de *Peclet* (Pe). El Pe es un número adimensional que relaciona la velocidad de advección de un flujo y la velocidad de difusión, y está relacionado con el número de *Reynolds* (Re). En las ecuaciones de *Navier-Stokes*, el método estabiliza las evoluciones con alto Re , y consiste en la adición de una difusividad

extra en la dirección de las líneas de corriente. El método *PSPG* (Pressure Stabilizing Petrov-Galerkin) se utiliza para evadir la condición *LBB*¹, que básicamente impone restricciones sobre los espacios de elementos utilizados.

En las paredes se imponen condiciones de no deslizamiento para las ecuaciones de *Navier-Stokes* y de flujo de energía nulo para la ecuación de energía. En las interfaces de acople, deben definirse una serie de condiciones de borde. En las ecuaciones de *Navier-Stokes*, en cada interfaz pueden setearse valores de velocidades normales, suponiendo velocidades tangenciales nulas (bajo la hipótesis de flujo paralelo), o valores de fuerzas normales (presión), suponiendo que las fuerzas tangenciales son nulas. En la ecuación de energía, cada borde necesita o bien un perfil de temperaturas o bien un perfil de flujo de calor.

La malla de cálculo se genera con **Gmsh** [19] y se discretiza el dominio en 43874 elementos triangulares con un tamaño medio de arista de $\Delta x \approx 0,005m$. El cálculo se realiza con **Par-GPFEP** [20] [21]. Las modificaciones de **Par-GPFEP** que fueron necesarias para implementar el acoplamiento son comentadas en el Apéndice C.

El segundo subsistema analizado es el circuito de enfriamiento. Los parámetros de este modelo son los siguientes: longitud total de cañerías $L = 15 m$, sumatoria de coeficientes de pérdida de carga concentrada $\sum K_i = 1,72$, rugosidad de cañerías $\epsilon = 0,5 \cdot 10^{-4} m$. Las áreas de las interfaces de acople son $A_2^1 = A_2^2 = 0,03 m^2$. La altura total H de este subsistema se varía como un parámetro de estudio, y la diferencia de altura Δz entre la entrada y la salida es equivalente a la de la cavidad bidimensional. Los parámetros del fluido son los mismos que los comentados en la descripción del primer subsistema. La evolución de las variables se calcula mediante un código cero-dimensional escrito para este propósito, que resuelve ecuaciones de pérdida de carga en una red hidráulica, considerando el acople térmico que genera cambios de densidades. En este modelo se supone que el intercambiador de calor actúa con tal eficiencia de fijar un valor nulo (valor de referencia) para la temperatura T_2^2 de salida. Las ecuaciones del modelo derivan de balances de masa y de energía mecánica en todo el subsistema y son las siguientes [22]:

$$\begin{cases} Q_2^2 = Q_2^1 \\ p_2^2 = p_2^1 + \rho_0 g (\Delta z + \beta(T_2^1 - T_{ref})(H - \Delta z)) - \rho_2^1 \left(\frac{Q_2^1}{A_2^1} \right)^2 \left(\frac{f_D L}{D} + \sum_i K_i \right) \\ T_2^2 = 0 \end{cases} \quad (3.2)$$

donde Q_2^i es el caudal en la interfaz i , p_2^i es la presión del subsistema promediada en esta

¹ La condición *Ladyzhenskaya-Babuska-Brezi* (*LBB*) o *inf-sup* es una condición necesaria y suficiente para que el problema de *Stokes* discretizado mediante algún método *Galerkin* quede bien planteado.

interfaz, T_2^i es la temperatura promediada en esta interfaz, g es la aceleración generada por el campo gravitatorio, f_D es el factor de *Darcy* de pérdida de carga distribuida, y D es el diámetro de la tubería. Notar que el subíndice en cada variable refiere a la numeración global del subsistema, y el supraíndice indica el número de interfaz local, como se convino previamente en 1.2. La segunda ecuación del modelo se resuelve con algunas iteraciones de punto fijo ya que el factor de *Darcy* depende del régimen de flujo. En este modelo se supone que el flujo de calor es nulo en la dirección axial en cada interfaz de acople. Esta aproximación es correcta ya que las interfaces se seleccionaron lejos de fuentes y sumideros, donde los gradientes de temperatura son despreciables. También se utiliza la hipótesis de que los términos provenientes del balance de energía con derivada temporal son despreciables frente a los términos que sobreviven en 3.2.

Estrategia de resolución

En cada interfaz de acople existen incógnitas de velocidades, fuerzas, temperatura y flujo de calor. En el caso de las velocidades la estrategia implementada es definir una variable integral, el caudal volumétrico Q , que servirá como una de las variables de acoplamiento². En el caso de las fuerzas se utilizan valores promediados para la fuerza normal (presión p). Las fuerzas tangenciales se consideran nulas bajo la hipótesis de que son despreciables en las interfaces de acople. Esta hipótesis es correcta cuando el flujo es paralelo, y por ello se selecciona como interfaz de acople aquella que se corresponda con el perfil de velocidades lo más plano posible, lejos de las curvas. Los valores de temperatura de acople también corresponden a valores T promediados en la interfaz, y el flujo de calor q'' de acople corresponde al flujo integral a través de ella. En los subsistemas bi-dimensionales, los perfiles de velocidades y temperaturas contruidos a partir de las variables recibidas se consideran planos, bajo la hipótesis de flujo paralelo. Con esta estrategia, existen cuatro incógnitas en cada interfaz de cada subsistema. Considerando los dos subsistemas, existen en total dieciseis incógnitas.

El sistema de ecuaciones de incógnitas queda definido por ocho ecuaciones de continuidad de variables 1.1 y otras ocho ecuaciones modelos 1.2 que todavía deben ser seleccionadas. Las ecuaciones de continuidad en las interfaces implican que:

² Cuando se utilizan variables integrales o promediadas para el acoplamiento, es necesario definir una estrategia extra en el subdominio que la recibe. Como cada subproblema solo queda bien definido si la condición de borde está dada sobre todos los puntos del borde, estos valores deben distribuirse considerando algún perfil. Por ejemplo, para el caso del subdominio que recibe un valor de caudal, y está modelado con ecuaciones bi-dimensionales, necesita definir un perfil de velocidades a lo largo de toda la sección de acople. La definición del perfil se basa en alguna hipótesis que el modelador considera adecuada conforme a la física del problema. Este paso debe analizarse con cuidado ya que los resultados del acoplamiento dependen de ello.

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_1^1 = Q_2^2 \\ Q_1^2 = Q_2^1 \\ p_1^1 = p_2^2 \\ p_1^2 = p_2^1 \\ T_2^1 = T_2^2 \\ T_2^2 = T_2^1 \\ q''_2^1 = -q''_2^2 \\ q''_2^2 = -q''_2^1 \end{array} \right. \quad (3.3)$$

Las ecuaciones modelos deben ser seleccionadas en base a la combinación de condiciones de borde propuesta para resolver el acoplamiento. Independientemente de cuál fuera ésta, para que el problema quede bien planteado debe seleccionarse solo una de las relaciones para el par *presión-caudal* y solo una para el par *temperatura-flujo de calor* en cada interfaz. La estrategia seleccionada es la siguiente:

- En la cavidad bidimensional:
 - en la interfaz inferior:
 - condiciones de tipo *Dirichlet* para el par presión-caudal;
 - condiciones de tipo *Dirichlet* para el par temperatura-flujo de calor;
 - en la interfaz superior:
 - condiciones de tipo *Neumann* para el par presión-caudal;
 - condiciones de tipo *Neumann* para el par temperatura-flujo de calor;
- En la red cero-dimensional:
 - en la interfaz inferior:
 - condiciones de tipo *Neumann* para el par presión-caudal;
 - condiciones de tipo *Neumann* para el par temperatura-flujo de calor;
 - en la interfaz superior:
 - condiciones de tipo *Neumann* para el par presión-caudal;
 - condiciones de tipo *Dirichlet* para el par temperatura-flujo de calor;

Así entonces, considerando las dos interfaces del subsistema 1 se generan cuatro ecuaciones de residuos:

$$\left\{ \begin{array}{l} (R_{p,Q})_1^1 = p_1^{1,guess} - p_1^{1,calc}(Q_1^{1,guess}, T_1^{1,guess}, p_1^{2,guess}, q_1^{''2,guess}) \\ (R_{T,q''})_1^1 = q_1^{''1,guess} - q_1^{''1,calc}(Q_1^{1,guess}, T_1^{1,guess}, p_1^{2,guess}, q_1^{''2,guess}) \\ (R_{p,Q})_1^2 = Q_1^{2,guess} - Q_1^{2,calc}(Q_1^{1,guess}, T_1^{1,guess}, p_1^{2,guess}, q_1^{''2,guess}) \\ (R_{T,q''})_1^2 = T_1^{2,guess} - T_1^{2,calc}(Q_1^{1,guess}, T_1^{1,guess}, p_1^{2,guess}, q_1^{''2,guess}) \end{array} \right. \quad (3.4)$$

donde el supraíndice 1 indica la interfaz inferior y el supraíndice 2 indica la interfaz superior. Notar que algunas dependencias pueden anularse con el modelo de estudio descripto previamente. Y entre las dos interfaces del subsistema 2 se generan otras cuatro ecuaciones de residuos:

$$\begin{cases} (R_{p,Q})_2^1 = Q_2^{1,guess} - Q_2^{1,calc}(p_2^{1,guess}, T_2^{1,guess}, p_2^{2,guess}, q_2^{1,guess}) \\ (R_{T,q''})_2^1 = q_2^{1,guess} - q_2^{1,calc}(p_2^{1,guess}, T_2^{1,guess}, p_2^{2,guess}, q_2^{1,guess}) \\ (R_{p,Q})_2^2 = Q_2^{2,guess} - Q_2^{2,calc}(p_2^{1,guess}, T_2^{1,guess}, p_2^{2,guess}, q_2^{1,guess}) \\ (R_{T,q''})_2^2 = T_2^{2,guess} - T_2^{2,calc}(p_2^{1,guess}, T_2^{1,guess}, p_2^{2,guess}, q_2^{1,guess}) \end{cases} \quad (3.5)$$

donde el supraíndice 1 indica la interfaz superior y el supraíndice 2 indica la interfaz inferior. Aquí también pueden anularse algunas dependencias con el modelo de estudio utilizado.

Como el circuito es cerrado es necesario proveer un valor de referencia para la presión en algún punto para que el sistema no quede indeterminado. En la formulación desarrollada se fija un valor de presión nulo en la interfaz superior de ambos subsistemas.

$$p_1^2 = p_2^1 = 0.$$

Así, el valor de la presión en las interfaces superiores pasa a ser dato, y pueden descartarse las ecuaciones de residuos $(R_{p,Q})_1^2$ y $(R_{p,Q})_2^1$ tomadas para el par presión-caudal sobre ellas.

El programa *maestro* utilizado es **Coupling**. La comunicación entre códigos se da por MPI entre programas ejecutados de manera independiente. En el cálculo bidimensional se varía la discretización temporal entre diferentes modelos, tomando valores de Δt entre 0,01s y 0,1s sin encontrar diferencias en los resultados. El cálculo cero-dimensional se ejecuta en cada paso de cálculo porque requiere inferiores recursos de cálculo.

Resultados del cálculo

Las condiciones iniciales del sistema son estáticas y sin gradientes de temperatura. A medida que evoluciona el fluido comienza a incrementar su temperatura en la cavidad y a circular por fuerza boyante en sentido anti-horario. La dinámica fluídica puede tomartoma comportamientos. El parámetro de interés es el número de *Richardson*. El número de *Richardson* describe la relación entre las fuerzas boyantes y las fuerzas inerciales. En [23] Buscaglia y Dari proponen calcular el número de *Richardson* de la siguiente forma:

$$Ri = \frac{g\beta L\Delta T}{U^2} \quad (3.6)$$

donde ΔT refiere a la diferencia de temperatura entre la entrada y la salida y U es el módulo de la velocidad media del fluido obtenido a partir del caudal establecido. A valores de Ri inferiores a 1 dominan principalmente las fuerzas inerciales y a valores elevados dominan las fuerzas boyantes.

Cuando el Ri es bajo, y la fuerza inercial con la que ingresa el fluido a la cavidad por la rama fría es más importante que la fuerza boyante. Esto permite que se establezca una vena fluídica dentro de la cavidad, que comunica directamente el fluido que ingresa con la interfaz de salida superior. Mientras este estado *quasi*-estacionario se establece, el fluido atrapado en el resto de la cavidad continúa incrementando su temperatura, y en algún momento la diferencia de densidad con respecto al fluido frío que está fluyendo se hace tan importante que el *quasi*-estacionario se interrumpe mientras el fluido caliente escapa, rompiendo con las estructuras formadas. Luego de esto la vena fluídica del fluido de ingreso vuelve a formarse. El comportamiento del fluido continua oscilando entre estos dos estados. En la Figura 3.2 puede observarse la evolución descrita, cuando el fluido de trabajo es deuterio y la fuente interna es de $f_0 = 2 \cdot 10^5 W/m^3$, que corresponde a una potencia del sistema de aproximadamente $5,4 kW$. Este es un valor típico para la potencia generada en fuentes frías de neutrones. La fuente fría diseñada para ser instalada en el reactor RA-10, por ejemplo, tiene una potencia de $5 kW$ [24].

Cuando el Ri es alto, la fuerza boyante del fluido tiene mucha mayor importancia que la fuerza inercial. Esto ocasiona que el fluido se estratifique en capas de diferente temperatura. Las líneas de corrientes serpentean entre la entrada y la salida, manteniendo corrientes paralelas horizontales. En la Figura 3.3 puede observarse la evolución de las líneas de corriente y del campo de temperatura en la cavidad bidimensional, también considerando deuterio como fluido de trabajo y fuente interna de $f_0 = 2 \cdot 10^6 W/m^3$, que corresponde a una potencia del sistema de aproximadamente $50 kW$.

En la Tabla 3.1 se reportan los principales resultados obtenidos para modelos con diferente magnitud de la fuente interna f_0 y de la altura H del sistema de enfriamiento: el valor del número de *Richardson* para cada modelo, las diferencias de temperatura ΔT entre la entrada y la salida de la cavidad, la diferencia de presión Δp entre ellas y el caudal Q establecido en el sistema. La variación de la altura H arrojó un resultado interesante. Una mayor altura H implica un mayor peso en el término boyante en 3.2, por lo que la diferencia de presiones entre las interfaces se incrementa. Esto se entiende fácilmente considerando que la columna de líquido de la rama fría se hace más pesada que la columna de líquido en la rama caliente. Al mismo tiempo, este incremento de presión genera un incremento de caudal. Pero al incrementarse el caudal, aumenta también la pérdida de carga en el circuito de enfriamiento, y también disminuye la diferencia de temperaturas entre las interfaces. A su vez, ambos efectos contrarrestan el efecto de incremento de diferencia de presiones. Es decir, el fenómeno se retroalimenta negativamente.

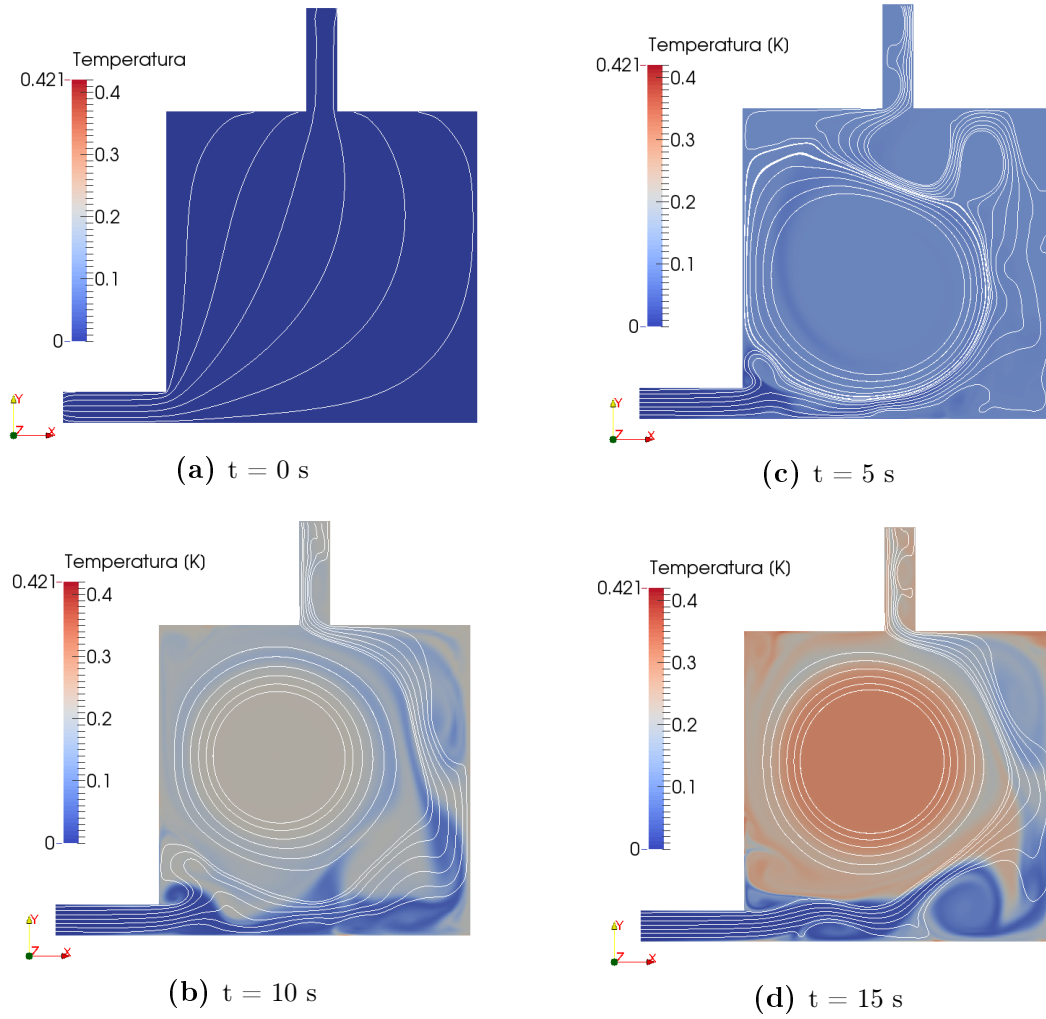


Figura 3.2: Evolución del fluido en la cavidad bidimensional con número de *Richardson* $Ri=0.3$. El fluido de relleno es deuterio líquido e inicialmente está estático y con distribución de temperaturas es uniforme. Las fuerzas inerciales dominan durante la evolución y por ello se establece una vena fluídica entre la entrada y la salida. Frecuentemente se generan escapes espontáneos de las porciones de fluido que permanecen estáticas mientras incrementan su temperatura, rompiendo con la vena previamente establecida. La evolución oscila continuamente entre estos dos comportamientos.

f_0 [W/m^3]	$H/\Delta z$	Ri	ΔT [K]	Q [m^3/s]	Δp [Pa]
$2 \cdot 10^4$	1	3.4	0.7	$3,2 \cdot 10^{-3}$	613
	5	1	0.5	$4,2 \cdot 10^{-3}$	614
	10	0.5	0.3	$4,5 \cdot 10^{-3}$	617
$2 \cdot 10^5$	1	6.5	3.6	$4,4 \cdot 10^{-3}$	595
	5	1.7	2.8	$7,6 \cdot 10^{-3}$	605
	10	0.9	2.2	$9,0 \cdot 10^{-3}$	620
$2 \cdot 10^6$	1	10.6	24	$8,9 \cdot 10^{-3}$	465
	5	2.2	18	$1,7 \cdot 10^{-2}$	580
	10	0.9	11.6	$2,1 \cdot 10^{-2}$	700

Tabla 3.1: Principales resultados del cálculo para el análisis de la fuente fría variando la magnitud de la fuente interna y la altura del sistema de enfriamiento.

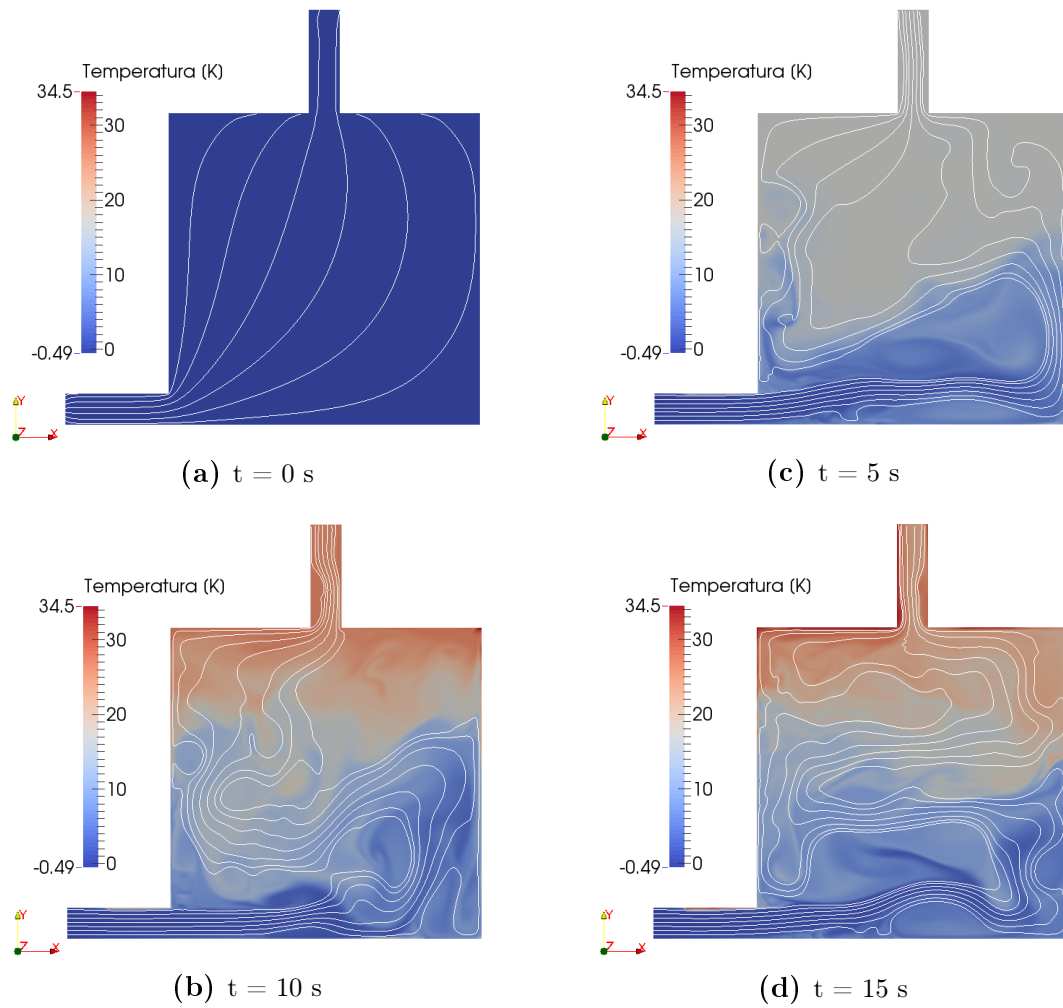


Figura 3.3: Evolución del fluido en la cavidad bidimensional con número de *Richardson* $Ri=10.6$. El fluido de relleno es deuterio líquido e inicialmente está estático y con distribución de temperaturas es uniforme. A medida que la dinámica evoluciona el fluido se va estratificando en capas con diferente temperatura. Pueden apreciarse las líneas de corriente serpenteantes y la estratificación del fluido alcanzando un *quasi*-estacionario.

En la Tabla 3.2 se reportan los resultados variando la longitud de cañerías del sistema de enfriamiento, por ejemplo, modelando un intercambiador de calor con mayor longitud de recorrido. Esta longitud actúa modificando únicamente el término de pérdida de carga por fricción. Al disminuir la longitud de cañerías el caudal se incrementa y el efecto resultante es similar al de aumentar la altura del sistema de enfriamiento.

f_0 [W/m^3]	$H/\Delta z$	L [m]	Ri	ΔT [K]	Q [m^3/s]	Δp [Pa]
$2 \cdot 10^5$	10	15	0.9	2.2	$9,0 \cdot 10^{-2}$	620
		7	0.5	1.4	$9,8 \cdot 10^{-3}$	634
		2	0.2	1.3	$1,5 \cdot 10^{-2}$	630

Tabla 3.2: Principales resultados del cálculo para el análisis de la fuente fría variando la longitud de cañerías del sistema de enfriamiento.

Análisis de métodos de resolución del sistema de ecuaciones de residuos

Se exploran diferentes métodos numéricos para resolver el acoplamiento presentado en las ecuaciones 3.4 y 3.5. El parámetro de interés aquí no es la cantidad de iteraciones de cada método sino la cantidad de evaluaciones de funciones que cada uno requiere, ya que el tiempo de cálculo está directamente relacionado con ellas. En la Figura 3.4 puede apreciarse la cantidad de evaluaciones requeridas por cada método para disminuir los residuos debajo de cierta tolerancia prefijada, para cada paso temporal. El método de *Newton* calcula la matriz jacobiana en cada iteración. Este cálculo se realiza con diferencias finitas a primer orden y por lo tanto requiere 1 evaluación de los residuos en el punto inicial, y 8 evaluaciones extras para el cálculo de cada diferencia finita. En total son 9 evaluaciones extras. Puede observarse que la cantidad de iteraciones del método para converger es en promedio una sola, ya que en general utiliza 10 evaluaciones en cada paso temporal.

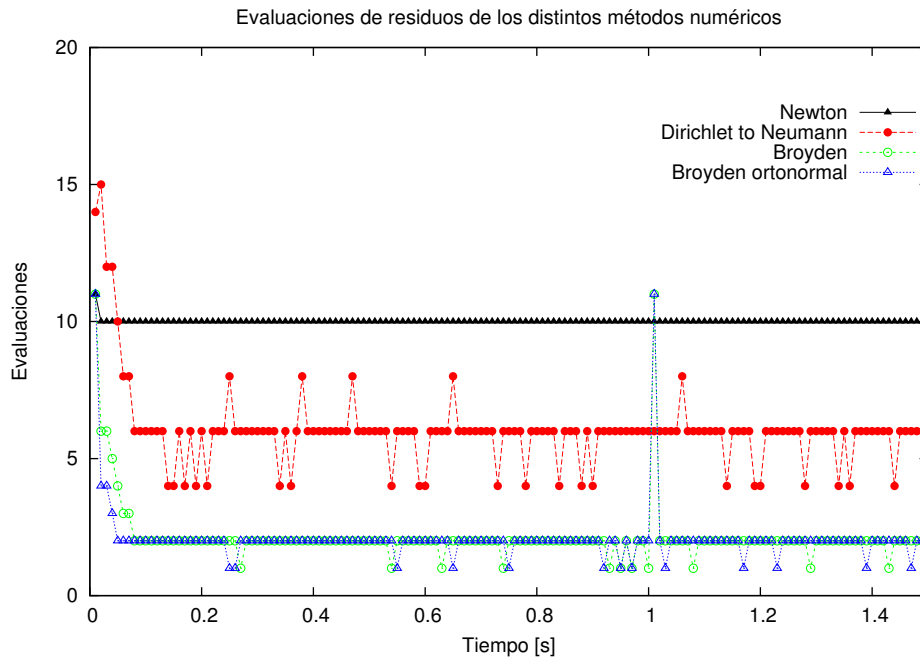


Figura 3.4: Evaluaciones de residuos requeridas por diversos métodos numéricos para resolver los sistemas de ecuaciones planteados en el problema doblemente acoplado descrito de la fuente fría de neutrones.

Los métodos *quasi-Newton* inicializan la matriz jacobiana sólo en el primer paso temporal, y luego utilizan aproximaciones económicas de la misma. Cada cierta cantidad de pasos temporales pueden reinicializar la matriz también mediante diferencias finitas. En los modelos realizados se utiliza reinicialización cada 100 pasos temporales, utilizando una discretización temporal con $\Delta t = 0,01s$, y por lo tanto la primera reinicialización se efectúa para $t = 1,01s$. En promedio estos métodos requieren dos

iteraciones por cada paso temporal, además de las 9 llamadas extras a códigos en cada paso de reinicialización. Los métodos *Broyden* y *Broyden ortonormal* tienen comportamiento similar y demuestran ser más eficientes que el método clásico. El método *Dirichlet-to-Neumann*³ es el que mayor cantidad de iteraciones necesita por cada paso temporal, excediendo el doble de los pasos requeridos por los métodos *quasi-Newton*.

3.2. Análisis del segundo sistema de parada de un reactor de investigación

Presentación del problema

El Departamento de Mecánica Computacional de CNEA tuvo a cargo el análisis del segundo sistema de parada (SSP) del reactor RA-10 [24]. El RA-10 es un reactor de investigación multipropósito, destinado principalmente a aumentar la producción de radioisótopos para uso de diagnóstico de enfermedades, a la investigación científica de haces de neutrones en diferentes rangos de energía, y al ensayo de materiales. El RA-10 es un reactor de piletas abiertas de flujo ascendente, con combustibles de bajo enriquecimiento tipo placa y agua liviana como refrigerante. El núcleo del reactor está inmerso en un tanque que contiene agua pesada como material reflector. El SSP consiste en el accionamiento del vaciado de este tanque. El drenado del agua pesada disminuye drásticamente la reactividad, apagando el reactor. La tarea de estudio consistió en verificar si el diseño cumple con el criterio de éxito, a saber, completar el 55 % del vaciado en un tiempo inferior a los 15 segundos, ante una falla simple del sistema (falla de apertura de cualquiera de las válvulas). Este requerimiento pudo verificarse tras el análisis [25], [26] y [27].

La Figura 3.5 esquematiza el SSP. En el mismo pueden destacarse tres grandes subsistemas: el tanque del reflector, la red hidráulica de descarga y la red hidráulica de ecualización de presiones. En operación normal del reactor las válvulas que pueden observarse en la red hidráulica permanecen cerradas, y el agua pesada rellena las cañerías y el tanque de reflector. El resto del sistema es relleno con gas Helio, excepto una porción del tanque de expansión que también permanece relleno con líquido. Cuando es accionado el SSP se abren las válvulas y el líquido comienza a drenar hacia el tanque de descarga, acelerado por la fuerza gravitatoria. Asimismo, el Helio circula en el mismo sentido en el resto del sistema, relleno el volumen desplazado de líquido.

El análisis del problema completo hubiera demandado elevados recursos computacionales debido a los requerimientos de malla. Por ello se propuso desarrollar un mo-

³ Notar que de no haber considerado la presión fija en la interfaz superior de ambos subsistemas, hubiera sido necesario cambiar la estrategia de selección de condiciones de borde para poder compatibilizar las ecuaciones de residuos 3.4 y 3.5 con el método explícito.

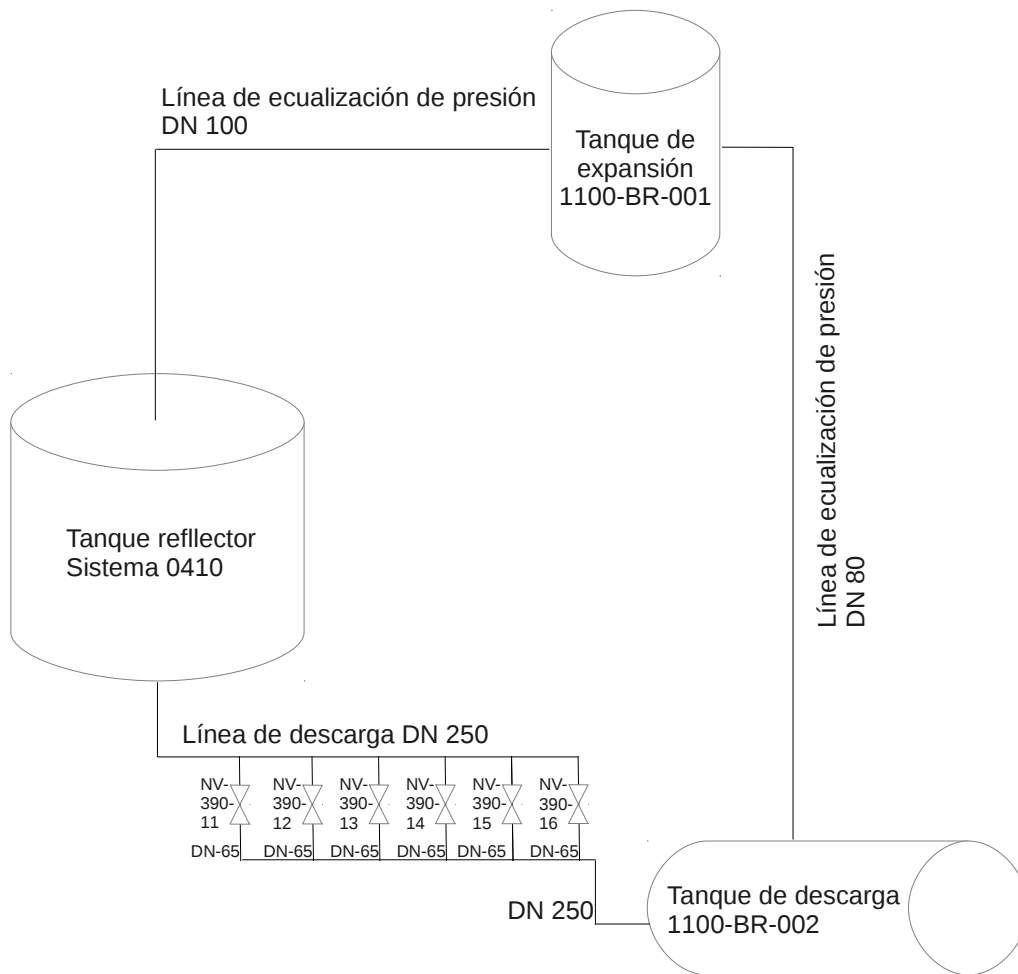


Figura 3.5: Esquema del segundo sistema de parada del reactor RA10.

delo multiescala del sistema, desacoplándolo en subsistemas que pudieron estudiarse por separado con estrategias de acoplamiento mediante condiciones de borde apropiadas. El SSP del RA10 se dividió en tres subsistemas:

- Subsistema del tanque del reflector,
- Subsistema de la red hidráulica de descarga,
- Subsistema de la red hidráulica de ecualización de presiones.

En el trabajo presentado los subsistemas se acoplaron mediante una estrategia de acoplamiento débil [28] [29].

Previo a este trabajo, se realizaron tareas de validación de las herramientas de cálculo. Para ello se estudió un sistema similar para el que se conocían datos experimentales de tiempo de vaciado. Estos datos sirvieron para contrastar los resultados obtenidos con las herramientas de cálculo. El sistema analizado fue el *mockup* del SSP del reactor OPAL [30], montado por INVAP en San Carlos de Bariloche. Debido a que el *mockup* del SSP del OPAL está abierto a la atmósfera, no cuenta con línea de

ecualización de presiones y por lo tanto ésta no se consideró en el modelo. En un estudio [26] se analizó el detalle fluídico tridimensional en el tanque reflector durante la descarga, modelando con ecuaciones cero-dimensionales la pérdida de carga en la red hidráulica y acoplando los subsistemas de forma débil. El estudio que a continuación se presenta es otro estudio que analiza con mayor detalle la distribución de caudales a través del arreglo de válvulas, modelando el comportamiento del resto del sistema con ecuaciones cero-dimensionales, y acoplando los subsistemas de forma fuerte, con la estrategia descrita en los dos primeros capítulos. El propósito de este estudio es investigar si existe algún efecto en las cañerías que podría no estar siendo considerado en el otro modelo.

Subsistemas de estudio

Se proponen dos subsistemas de estudio: el primero incluye el tanque del reflector acoplado a una porción de la red hidráulica en la descarga, y el segundo modela el arreglo de válvulas.

El primer subsistema se analiza con ecuaciones cero-dimensionales, realizando balances de masa y energía. La evolución de la altura h de la superficie libre en el tanque del reflector queda modelada a través de la siguiente ecuación [31]:

$$\ddot{h}h + \frac{\dot{h}^2}{2} \left(1 - \left(\frac{A_T}{A_D} \right)^2 \right) + g\Delta h_{red} + \ddot{h}l_D = \frac{p_{atm} - p_1^1}{\rho} + \Delta \hat{u} \quad (3.7)$$

donde p_1^1 es la presión en la interfaz de acople, A_T es la área transversal del tanque del reflector, A_D es la sección transversal de la línea de descarga, Δh_{red} es la altura total de la columna de líquido en el subsistema, l_D es la longitud total de cañerías en el subsistema, p_{atm} es la presión sobre la superficie libre, y ρ es la densidad del agua. Δu representa la pérdida de carga por unidad de masa y puede modelarse como:

$$\Delta u = \frac{1}{2}v_D^2 \left(\frac{f_D l_D}{D} + \sum_i K_i \right) \quad (3.8)$$

donde v_D es la velocidad del fluido en la línea de descarga, (que puede escribirse en términos de \dot{h}), $\frac{f_D l_D}{D}$ es el factor de pérdida de carga distribuida en las tuberías, (en función del factor de Darcy f_D , la longitud de tuberías l_D y el diámetro de las mismas D) y $\sum_i K_i$ es la sumatoria de factores de pérdida de carga concentrada.

La Tabla 3.3 reúne los parámetros del subsistema. Los datos geométricos pueden consultarse en las referencias [30]. El factor de pérdida de carga concentrada fue calculado en función de estos datos geométricos [22], e incluye la contracción abrupta en la unión entre el tanque y la red hidráulica, y tres codos de 90° presentes en ella, previos al arreglo de válvulas.

Parámetro	Valor
A_T	5.30 m^2
A_D	0.05 m^2
Δh_{red}	$h + 4.98 \text{ m}$
l_D	11.98 m
p_{atm}	92000 Pa
ρ	998 Kg/m^3
D	0.254 m
$\sum_i K_i$	1.13

Tabla 3.3: Parámetros del subsistema del tanque del reflector con acople de sección de red hidráulica

Una vez resuelta la ecuación (3.7) para un dado valor de tiempo, el caudal de descarga Q_1^1 puede calcularse simplemente como:

$$Q_1^1 = -\dot{h}A_D \quad (3.9)$$

Todos estos cálculos se realizan con un programa escrito para este propósito.

El subsistema arreglo de válvulas es modelado con una malla tridimensional de elementos tetraédricos realizada en **Salomé** [32]. El caudal ingresa a través del extremo superior y se reparte entre los múltiples caños que comunican los colectores. En operación normal del reactor cada uno de ellos está bloqueado mediante una válvula esférica, y del otro lado las cañerías están rellenas de gas, pero durante el accionamiento del sistema de parada las mismas se abren dejando pasar libremente al fluido. Las válvulas esféricas instaladas no presentan pérdidas de carga concentrada y por lo tanto no son modeladas. Como es de interés el análisis ante falla simple del sistema, se supone que una de las válvulas no abre y por ello ese caño tampoco se modela. En los primeros cálculos se supone que la válvula en falla es la ubicada en la última rama del arreglo. Como otra simplificación del problema se supone que inicialmente el agua rellena todas las cañerías en forma estática. Más adelante se estudia la validez de éstas aproximaciones. Los datos dimensionales de las cañerías pueden consultarse en las referencias [30].

Debido a que el régimen del fluido es turbulento durante la mayor parte de la descarga, y una simulación Simulación Numérica Directa (DNS, por sus siglas en inglés) demandaría elevados recursos computacionales, se utiliza un modelo de turbulencia de tipo Promedio de Reynolds de Navier-Stokes (RANS, por sus siglas en inglés) para modelar la fricción interna del fluido. El modelo utilizado es el modelo $\kappa - \epsilon$ *realizable* [33], en el que las ecuaciones se estabilizan mediante un método de control de coeficientes. El sistema de ecuaciones resultantes en el segundo subsistema es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + (\bar{U} \cdot \nabla) \bar{U} = -\frac{\nabla P^*}{\rho} + \nabla \cdot [(\nu + \nu_T) (\nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T)] + \bar{f} \\ \nabla \cdot \bar{U} = 0 \\ \nu_T = c_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \\ \frac{\partial \kappa}{\partial t} + (\bar{U} \cdot \nabla) \kappa = \frac{c_\mu}{2} \kappa^2 \epsilon |\nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T|^2 + \nabla \cdot \left(c_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \nabla \kappa \right) - \epsilon \\ \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + (\bar{U} \cdot \nabla) \epsilon = \frac{c_1}{2} \kappa |\nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T|^2 + \nabla \cdot \left(c_\epsilon \frac{\kappa^2}{\epsilon} \nabla \epsilon \right) - c_2 \frac{\epsilon}{\kappa} \end{array} \right. \quad (3.10)$$

donde \bar{f} es una fuerza volumétrica, κ es la energía cinética turbulenta, ϵ es la disipación viscosa de energía turbulenta, ν_T es la viscosidad turbulenta y P^* es la presión efectiva del sistema, que se calcula como $P^* = P + \frac{2}{3}\kappa$. Las variables mayúsculas refieren a valores medios estadísticos. Los parámetros de las ecuaciones de transporte de κ y ϵ toman los siguientes valores: $c_\mu = 0,09$, $c_1 = 0,126$, $c_2 = 1,92$ y $c_\epsilon = 0,07$ [34].

En las ecuaciones de *Navier-Stokes*, cada borde necesita un perfil de velocidades normales o de fuerzas normales, y otro de velocidades tangenciales o de fuerzas tangenciales [14]. Si la condición de borde de ingreso de la cañería es el valor del caudal Q_2^1 , a partir de éste puede definirse un perfil de velocidades del fluido. El régimen de flujo es turbulento durante la mayor parte de la descarga y por tanto este perfil puede suponerse plano. En base a estas velocidades puede calcularse un valor para la intensidad turbulenta I_T , y con ella aproximarse los valores de κ y ϵ en la interfaz. Si la condición de borde de ingreso a la cañería es el valor de presión media, la intensidad turbulenta I_T en cada paso de evolución temporal puede calcularse de forma aproximada a partir de la solución para el caudal en el paso previo. En la descarga de la cañería se impone una fuerza normal que depende de la presión atmosférica, despreciando las fuerzas tangenciales. Las ecuaciones de κ y ϵ no requieren condiciones de contorno en esta interfaz. Para evitar la resolución de la capa límite en las paredes de las tuberías se implementa un modelo de pared, en el que se reemplaza la misma por una tracción tangencial equivalente a la que realizaría la misma sobre la corriente externa [35]. Este modelo impone condiciones de tipo *Dirichlet* para κ y ϵ en la frontera en que se impone la ley de pared.

El sistema de ecuaciones (3.10) es resuelto en pasos fraccionados [36] mediante la formulación *Petrov-Galerkin* [16] de elementos finitos con elementos lineales, estabilizada mediante *SUPG* [17] y *PSPG* [18]. En el primer paso fraccionado se resuelve el transporte de κ , en el segundo paso se resuelve el transporte de ϵ , y en el último paso se resuelven en forma monolítica las ecuaciones de *Navier-Stokes*.

Una vez resueltas las ecuaciones, si la condición de borde en la interfaz de acople I_2^1 había sido el caudal Q_2^1 , es posible calcular el valor de la presión promedio $\langle p_2^1 \rangle$

en esta interfaz a partir de los valores $\langle P_{I_2^*}^* \rangle$ y $\langle \kappa_{I_2^1} \rangle$ promediados en ella:

$$\langle p_2^1 \rangle = \langle P_{I_2^*}^* \rangle - \frac{2}{3} \langle \kappa_{I_2^1} \rangle \quad (3.11)$$

Si la condición de borde en la interfaz de acople hubiera sido la presión promedio $\langle p_2^1 \rangle$, el caudal Q_2^1 se calcula simplemente mediante integración numérica del campo de velocidades en los nodos de la interfaz.

Todos estos cálculos se realizan con **Par-GPFEP**.

3.2.1. Estrategia de resolución

Los dos subsistemas están conectados a través de una sección de la tubería, en la cual quedan acoplados los valores de velocidades y fuerzas. La estrategia implementada es similar a la utilizada en 3.1 y consiste en utilizar como variables de acoplamiento el caudal volumétrico Q y la presión promedio p . Las fuerzas tagenciales se consideran nulas. A fines de cumplir con esta hipótesis, la interfaz de acople se selecciona lejos de los codos. El subsistema tanque del reflector tiene como incógnitas la presión p_1^1 y el caudal Q_1^1 en la interfaz de acople I_1^1 . Asimismo, el subsistema arreglo de válvulas tiene como incógnitas p_2^1 y Q_2^1 en I_2^1 . Las ecuaciones de continuidad implican que:

$$\begin{cases} p_1^1 = p_2^1 \\ Q_1^1 = Q_2^1 \end{cases} \quad (3.12)$$

Se utiliza la siguiente estrategia: condiciones de borde de tipo *Neumann* en la interfaz de acople para el subsistema tanque del reflector, y condiciones de borde de tipo *Dirichlet* para el subsistema arreglo de válvulas⁴. En base al caudal recibido en este subsistema se calcula un perfil de velocidades. Las ecuaciones de residuos quedan entonces:

$$\begin{cases} (R_{p,Q})_1^1 = Q_1^{1,guess} - Q_1^{1,calc}(p_1^{1,guess}) \\ (R_{p,Q})_2^1 = p_2^{1,guess} - p_2^{1,calc}(Q_2^{1,guess}) \end{cases} \quad (3.13)$$

El programa *maestro* utilizado es **Coupling**. La comunicación entre códigos se da por MPI entre programas ejecutados en forma independiente.

Evolución de la descarga del SSP

Se realizan cálculos utilizando mallas del modelo tri-dimensional con diferente refinamiento para estudiar la convergencia de los resultados. La primera es una malla

⁴ Se podrían haber definido otras estrategias. La estrategia implementada permite resolver las ecuaciones en ambos subdominios de una forma cómoda. En el modelo tri-dimensional, por ejemplo, el valor de caudal recibido es útil para construir valores para las condiciones de borde del modelo turbulento utilizado.

con $\Delta x = 0,01m$ y 1145659 de elementos. La segunda es malla tiene $\Delta x = 0,008m$ y 1806202 elementos. La tercera es la malla más fina y tiene $\Delta x = 0,005m$ y 2951259 elementos. Se utiliza $\Delta t = 0,01s$ en los cálculos con las dos primeras mallas y $\Delta t = 0,005s$ en los cálculos con la última malla. Las ecuaciones de residuos se resuelven mediante el método de *Broyden ortonormal*, con reinicialización de la matriz jacobiana cada 100 pasos temporales. En la Figura 3.6 se reportan los resultados obtenidos para la evolución de los caudales y de las presiones en la interfaz de acople.

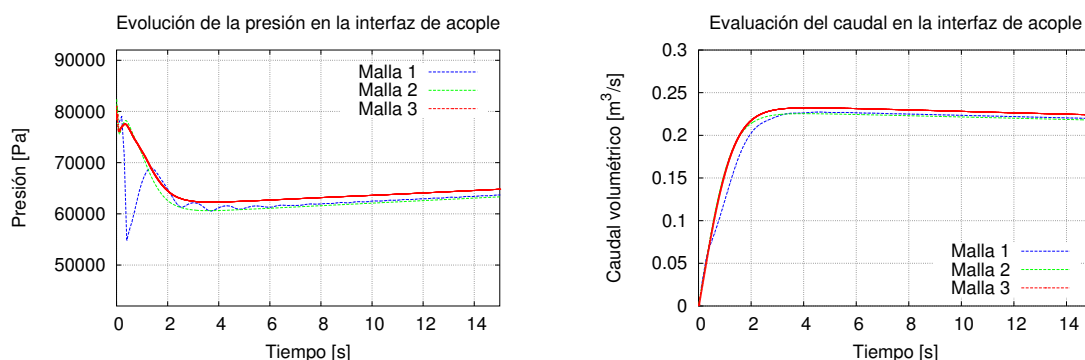


Figura 3.6: Evolución de la presión y del caudal volumétrico en la interfaz de acople entre los dos subsistemas. La presión atmosférica es de 92000 Pa.

En la Figura 3.7 se observa la evolución de la altura de la superficie libre del líquido en el tanque durante los primeros quince segundos obtenida en diferentes cálculos. La curva azul reporta los resultados obtenidos con la malla más gruesa, la curva roja los resultados obtenidos con la malla intermedia y la curva violeta los resultados obtenidos con la malla más fina. La curva verde muestra resultados de análisis estudiando la condición inicial de gas de relleno en las cañerías, que será descrita en la sección 3.2.1. Las curvas cyan y gris muestran resultados del cálculo del modelo tri-dimensional del tanque con acoplamiento débil al modelo cero dimensional de la red hidráulica [28]. La primera curva fue obtenida sin utilizar modelo de turbulencia, y la segunda utilizando el modelo RANS previamente comentado. Comparativamente se muestran también los valores experimentales reportados en la referencia [30].

Los modelos computacionales predicen un comportamiento dinámico similar al reportado experimentalmente. Durante los primeros segundos de evolución existe una cierta inercia en la descarga que solo es captada por los modelos que describen el detalle en el arreglo de válvulas. Tras este transitorio inicial, todos los modelos predicen una pendiente de vaciado similar. Esta pendiente se corresponde con similares caudales de descarga entre los diferentes modelos, con lo que se verifica que la pérdida de carga total considerada en dos modelos independientes (modelo tri-dimensional del tanque acoplado, y modelo cero-dimensional del tanque acoplado) es similar. La curva experimental presenta ciertas ondulaciones que se deben al efecto que el oleaje en la superficie del líquido genera sobre el punto de medición. Estas variaciones son filtradas en los mo-

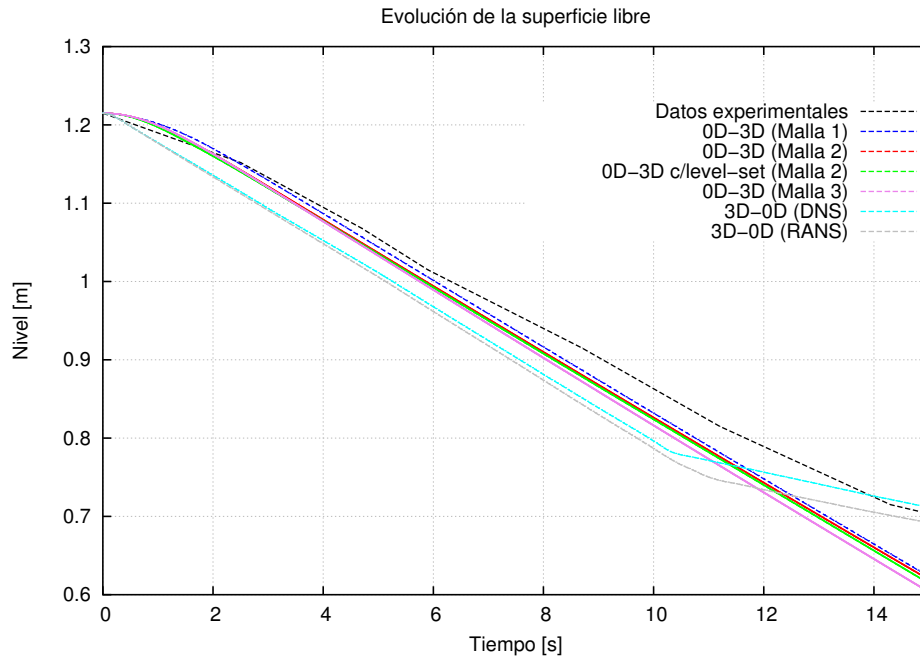


Figura 3.7: Evolución del nivel de líquido en el *mockup* del tanque del reflector del reactor OPAL ante accionamiento del SSP. La curva negra está construida con datos experimentales proporcionados por INVAP S.E. Las curvas azul, roja, verde y violeta reportan datos calculados mediante diferentes mallas para el modelo tri-dimensional del arreglo de válvulas, con acoplamiento fuerte al modelo cero-dimensional del resto del sistema. Las curvas cian y gris muestran resultados del cálculo del modelo tri-dimensional del tanque con acoplamiento débil al modelo cero dimensional de la red hidráulica.

delos utilizados, ya que las curvas calculadas reportan alturas efectivas, computadas a partir del volumen restante de líquido en el tanque. Transcurridos diez segundos de evolución, existe un quiebre en las curvas del modelo tri-dimensional del tanque. Este quiebre se corresponde al momento en el que las cañerías succionan tanto gas que es posible desacoplar el modelo cero-dimensional de pérdida de carga, basándose en la hipótesis de que se establece una vena gaseosa entre el punto de succión y el orificio de descarga. Esta hipótesis es conservativa para el objetivo de estudio previsto, ya que si el acoplamiento de la red no fuera realmente despreciable, el tanque se vaciaría a mayor velocidad que la modelada. En el tanque existe un cajón que envuelve la entrada a la red hidráulica y no permite el vaciado más allá de los 60 cm, por lo que el nivel de líquido, que es medido fuera de este cajón, tiende asintóticamente a este valor. Esta dinámica no es considerada en el modelo cero-dimensional del tanque, lo que explica las diferencias entre las curvas en los últimos segundos.

Análisis de sensibilidad de resultados ante válvula en falla

Los cálculos previos se realizaron suponiendo que falla la válvula de la última conexión entre los colectores. Es de interés conocer si existe variación en los tiempos de descarga si la válvula que falla es alguna otra. En la Figura 3.8 se compara la evolución

de la superficie libre ante fallas en la primera, la tercera y la sexta válvula.

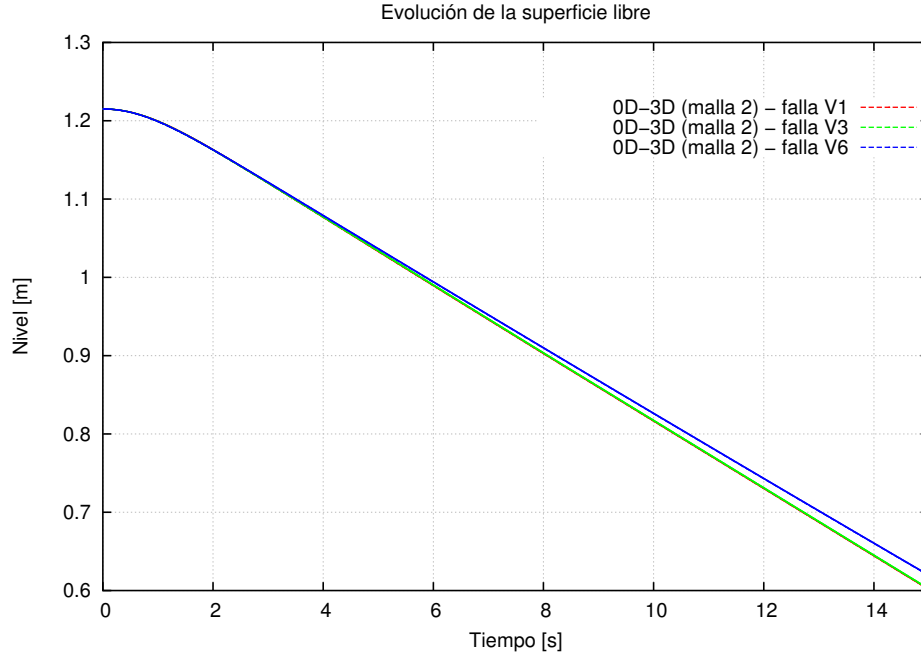


Figura 3.8: Evolución del nivel de líquido en el *mockup* del tanque del reflector del OPAL ante accionamiento del SSP considerando falla simple en diferentes válvulas.

Como puede observarse no es posible notar diferencias considerables en la evolución. La pérdida de carga total del arreglo de válvulas es levemente sensible a la válvula que falla.

Transporte de superficie libre en las tuberías

Como se comentó, en los cálculos realizados previamente no se consideró el gas de relleno en las tuberías durante los primeros instantes del drenado. Es de interés estudiar su influencia. Se utiliza la técnica de *level-set* para transportar la superficie libre [37]. Para ello se añade un paso fraccionado extra al sistema de ecuaciones (3.10):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) \phi = 0 \quad (3.14)$$

donde ϕ es el campo que representa la distancia con signo de cada punto a la superficie libre. Las porciones del sistema con líquido tienen ϕ positivo y las porciones con gas tienen ϕ negativo. ϕ tiene valor nulo en la superficie libre. La ecuación (3.14) requiere un valor de contorno allí donde $\bar{u} \cdot \bar{n} < 0$, y por lo tanto debe proveerse el valor del campo a la entrada de la tubería. Esta ecuación también es resuelta mediante una formulación de elementos finitos con elementos lineales y estabilización *SUPG*. Se utiliza, además, un enriquecimiento del espacio de presiones en los elementos de la interfaz [38]. El campo del level set es reinicializado mediante cálculos geométricos cada 10 pasos temporales.

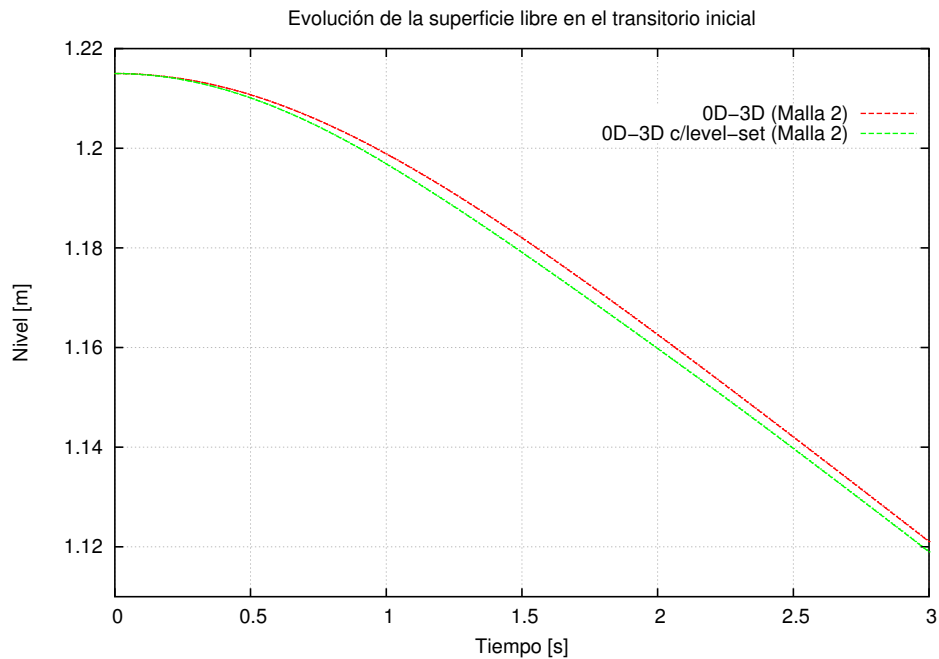


Figura 3.9: Evolución del nivel de líquido en el *mockup* del tanque del reflector del reactor OPAL ante accionamiento del SSP durante el transitorio inicial. Se comparan la solución obtenida despreciando el gas en la cañería y la obtenida con transporte de superficie libre mediante la técnica de *level-set*.

En la Figura 3.7 se compara la evolución obtenida de la superficie libre con los resultados anteriores, y en la Figura 3.9 se compara la evolución durante el transitorio inicial. Puede observarse que al modelar el transporte del gas la descarga se acelera durante el primer instante, debido a la menor pérdida de carga. Sin embargo, este fenómeno no tiene mayor influencia. La evolución posterior es similar a la obtenida sin el modelado de la superficie libre, y por lo tanto la aproximación realizada inicialmente es conservativa, ya que considera una mayor pérdida de carga.

En la Figura 3.10 se observa la evolución de la superficie libre en el arreglo de válvulas durante los primeros instantes de tiempo.

Conclusiones del análisis

La herramienta de análisis de acoplamiento fuerte de subsistemas permite incorporar el estudio de la inercia fluídica en la red hidráulica de descarga. Este estudio revela que los modelos que incluyen el fenómeno inercial del fluido en la red hidráulica del *mockup* del SSP del OPAL predicen un retraso de la descarga en un máximo de un segundo respecto a los modelos que no lo incluyen. Como la inclusión del efecto inercial modela una dinámica similar a la reportada experimentalmente durante el transitorio inicial y, además, es conservativa en función del objetivo de estudio establecido, debería ser considerada en futuros análisis de seguridad.

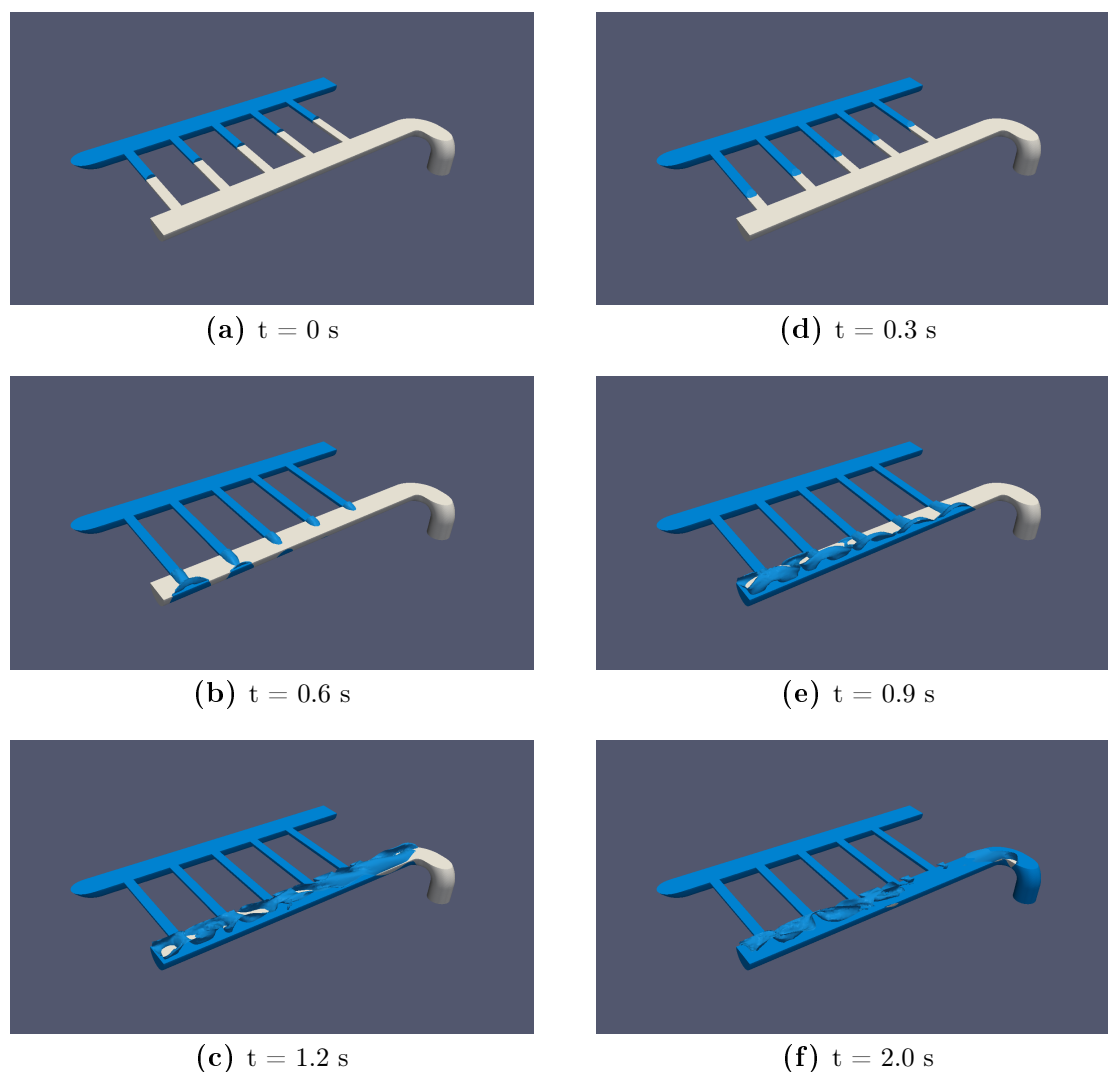


Figura 3.10: Transitorio inicial de la descarga del tanque a través del arreglo de válvulas, con falla simple en la última válvula (no se modela). El corte horizontal en la geometría permite observar el detalle de la evolución de la superficie libre. El líquido (azul) se encuentra inicialmente en condición estática rellenando las cañerías hasta la posición de las válvulas. Al otro lado el gas (blanco) rellena el resto de la red hidráulica.

Análisis de métodos de resolución del sistema de ecuaciones de residuos

A fines de comparar la efectividad de diferentes métodos numéricos se realizaron distintos cálculos utilizando la malla más gruesa. La Figura 3.11 compara la cantidad de evaluaciones de funciones en función del paso temporal para diferentes métodos de resolución.

El método explícito *Dirichlet-to-Neumann* es el que mayor cantidad de evaluaciones consume, debido a que requiere una excesiva cantidad de iteraciones para converger. Los métodos de tipo *Newton-Krylov*: *Newton-GMRES* y *Newton-CG* (*Newton-Gradientes Conjugados*) requieren baja cantidad de iteraciones, pero debido a la forma de resolución toman más evaluaciones que los métodos *quasi-Newton*: *Broyden* y *Broyden*

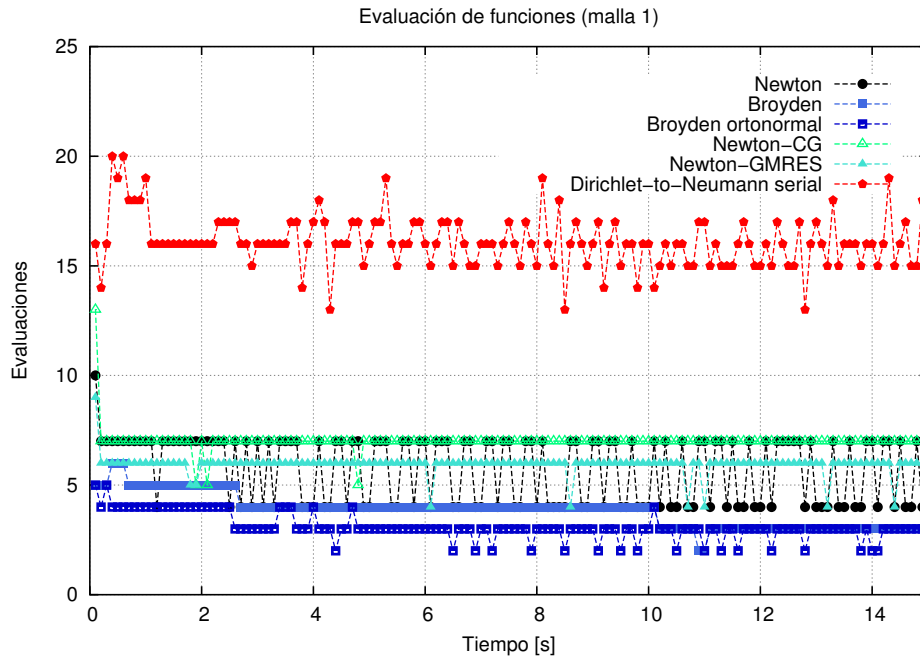


Figura 3.11: Evaluación de diferentes métodos numéricos en la resolución del sistema de ecuaciones de residuos resultante para el problema del vaciado del tanque reflector del *mockup* del reactor OPAL. El método explícito *Dirichlet-to-Neumann* requiere excesiva cantidad de evaluaciones en cada paso de tiempo, mientras que los métodos implícitos *quasi-Newton* son los más eficientes.

ortonormal, los cuales convergen con baja cantidad de iteraciones y de evaluaciones asociadas (solo en el primer paso de cálculo involucran mayor cantidad de evaluaciones debido a que inicializan la matriz jacobiana por diferencias finitas). El método de *Newton-Raphson* toma tantas evaluaciones como los métodos *Newton-Krylov*, sin embargo, estas evaluaciones están asociadas a muy baja cantidad de iteraciones, ya que consume evaluaciones en la construcción de la matriz jacobiana.

En conclusión, al igual que en los resultados presentados en la sección 3.2, los métodos *Broyden* y *Broyden ortonormal* resultaron ser los más eficientes. A fines de acelerar aún más el cálculo, se estudió la forma de optimizarlos. Se ensayaron diferentes métodos para la propuesta de semillas del vector de incógnitas \bar{x}_n y de la matriz \mathbb{B}_n para cada paso temporal de resolución. Hasta ahora las semillas para el primer paso temporal eran el vector de ceros $\bar{x}_1 = \bar{0}$ y la matriz identidad $\mathbb{B}_1 = \mathbb{I}$, y las semillas para cualquier paso temporal próximo eran el vector \bar{x}_{n-1} de la solución convergida en el paso previo, y la matriz \mathbb{B}_{n-1} de la última iteración correspondiente a ese paso. Ahora el objetivo radica en intentar generar semillas que aceleren la convergencia.

Se propone utilizar un método de extrapolación, a partir de la información de los resultados que se van obteniendo en los sucesivos pasos. La semillas para \bar{x}_n y para \mathbb{B}_n podrían tener órdenes de extrapolación $k_{\bar{x}}$ y $k_{\mathbb{B}}$ diferentes. En el paso n , se van a utilizar los valores de los vectores \bar{x}_i , con $i \in \{n-1-k_{\bar{x}}, n-1\}$, y los valores de las matrices \mathbb{B}_j , con $j \in \{n-1-k_{\mathbb{B}}, n-1\}$. Estas extrapolaciones son válidas solo cuándo

$n > k_{\bar{x}} + 1$ y $n > k_{\mathbb{B}+1}$ respectivamente.

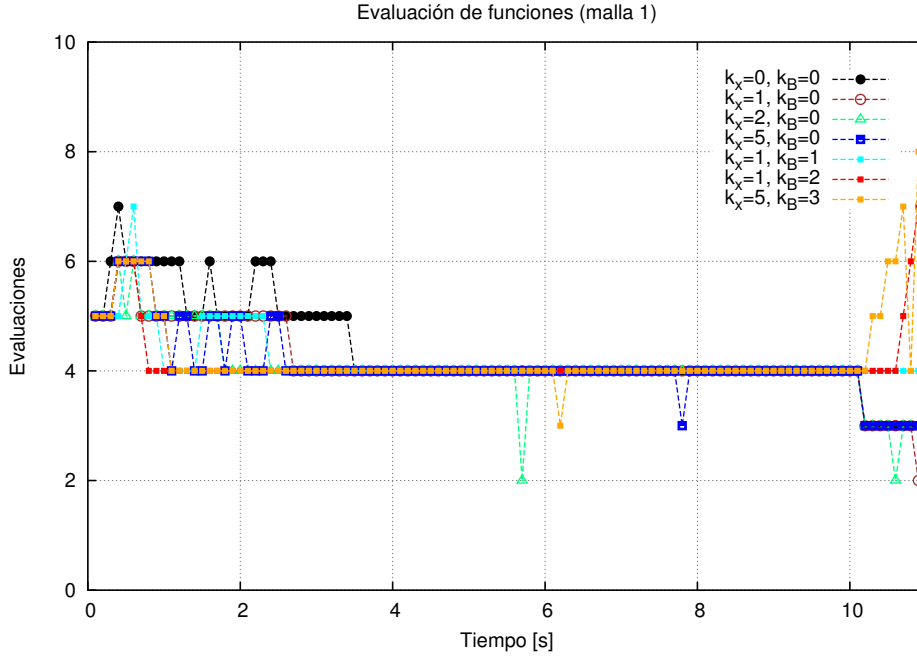


Figura 3.12: Eficiencia para diferentes esquemas de extrapolación en la generación de semillas para \bar{x}_n y \mathbb{B}_n en cada paso temporal. $k_{\bar{x}}$ indica el orden de extrapolación para \bar{x}_n y $k_{\mathbb{B}}$ indica el orden de extrapolación para \mathbb{B}_n utilizado en cada esquema. Los métodos con alto orden de extrapolación para \mathbb{B}_n requieren menor cantidad de iteraciones para converger el cálculo en la primer etapa, pero a su vez requieren excesivas iteraciones ante alguna perturbación en los resultados. Los métodos con algún orden de extrapolación para \bar{x}_n son más eficientes en estas instancias.

La Figura 3.12 reporta la cantidad de evaluaciones de funciones requeridas para la convergencia en cada paso temporal, jugando con diferentes órdenes de extrapolación para \bar{x}_n y \mathbb{B}_n . Las evaluaciones de funciones aquí están directamente relacionadas con las iteraciones necesarias para la convergencia, ya que el método de *Broyden* realiza una sola evaluación en cada iteración. Al comienzo del cálculo todos los esquemas numéricos requieren excesivas iteraciones para converger, y luego comienzan a converger con menor cantidad de iteraciones. El cálculo con orden nulo de extrapolación para ambas variables es el que más tarda en bajar la cantidad de iteraciones. Le siguen todos aquellos esquemas sin extrapolación para la matriz \mathbb{B}_n . Los esquemas con $k_{\mathbb{B}} = 3$ y $k_{\mathbb{B}} = 5$ son los que más rápidamente bajan la cantidad de iteraciones, por lo que se deduce que la extrapolación para la generación de semillas para \mathbb{B}_n es altamente útil para arrancar el cálculo. En etapas avanzadas la matriz \mathbb{B}_n se estabiliza y comienza a converger a resultados similares en los sucesivos pasos. Es decir, la tasa de cambio del vector solución \bar{x}_n se vuelve aproximadamente constante (como puede observarse en la Figura 3.6). Ante una pequeño cambio, los esquemas de extrapolación para \mathbb{B}_n amplifican esta perturbación y comienzan a generar malas semillas, por lo que comienzan a requerir mayor cantidad de iteraciones para converger. Este efecto puede observarse a partir

de los 10s de cálculo. Por el contrario, los esquemas con bajo orden de extrapolación para \mathbb{B}_n y algún orden de extrapolación para \bar{x}_n son más eficientes en esta etapa. Aquí podría pensarse que los esquemas de extrapolación son inestables ante perturbaciones en \mathbb{B}_n , pero estables para perturbaciones en \bar{x}_n .

En base a estos resultados, se deduce que el esquema de generación de semillas idóneo requiere órdenes de extrapolación $k_{\bar{x}}$ y $k_{\mathbb{B}}$ dependientes del tiempo, comenzando con alto $k_{\mathbb{B}}$ y bajo $k_{\bar{x}}$, y tendiendo a $k_{\mathbb{B}} = 0$ y alto $k_{\bar{x}}$ a medida que avanza el cálculo.

3.3. Resolución de redes hidráulicas de múltiples componentes

Presentación del problema

Con interés en conocer el comportamiento de la metodología de resolución para problemas abordados mediante el Método de Descomposición Disjunta de Dominios en sistemas con grandes cantidades de incógnitas, se propuso analizar redes hidráulicas de múltiples componentes interconectados. La idea es utilizar modelos sencillos que describan el comportamiento de cada componente particular para poder centrar el análisis solo en el estudio de convergencia de resultados, analizando estados estacionarios.

Subsistemas de estudio

Se proponen sistemas de redes hidráulicas ramificadas divergentes. Debido a la metodología de abordaje propuesta en el trabajo, las interfaces deben seleccionarse de forma que cada una de ellas solo conecte dos subdominios contiguos. Por lo tanto, cada porción del sistema que comprende una ramificación es pensada como un subdominio diferente, de modo que cada subdominio contenga tres interfaces de acoplamiento. La Figura 3.13 esquematiza un modelo de estudio con 5 subsistemas acoplados. Los parámetros geométricos de cada subsistema se sortean aleatoriamente entre valores típicos. El fluido de trabajo es agua a temperatura y presión ambiente.

Cada subdominio es modelado con balances cero-dimensionales de conservación de masa y energía mecánica. Las ecuaciones resultantes para un subsistema genérico que no contiene bordes del dominio original son las siguientes:

$$\begin{cases} \frac{p_1}{\rho} + \frac{v_1^2}{2} = \frac{p_2}{\rho} + \frac{v_2^2}{2} + gz_2 + \Delta u_{12} \\ \frac{p_1}{\rho} + \frac{v_1^2}{2} = \frac{p_3}{\rho} + \frac{v_3^2}{2} + gz_3 + \Delta u_{13} \\ A_1 v_1 = A_2 v_2 + A_3 v_3 \end{cases} \quad (3.15)$$

donde los subíndices 1, 2 y 3 refieren a diferentes extremos locales del contorno del

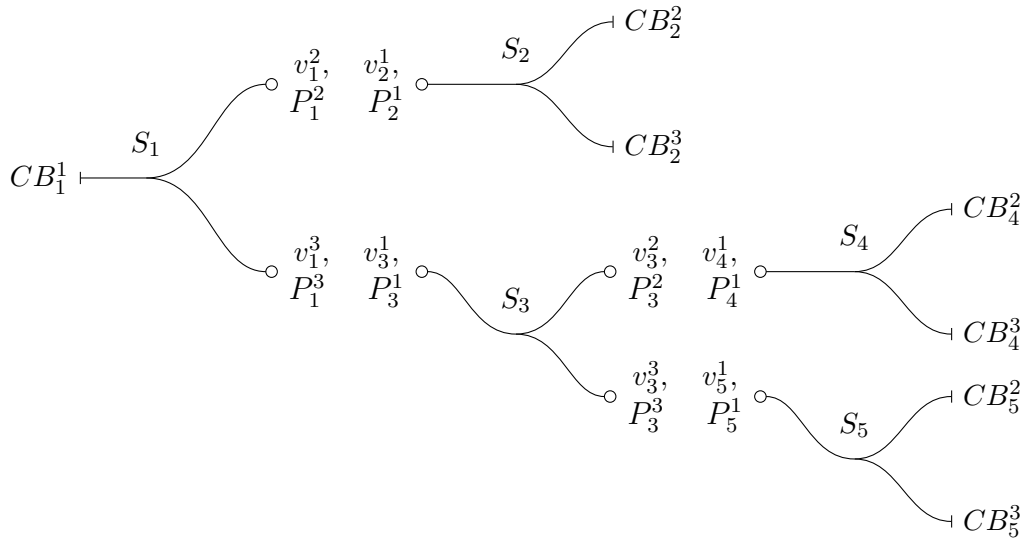


Figura 3.13: Descomposición disjunta de dominios en un modelo de red hidráulica con 16 incógnitas en las interfaces de acoplamiento. La incógnita v_i^j refiere a la velocidad media en el extremo j del subsistema i . La incógnita P_i^j agrupa las presiones estática y dinámica medias en el extremo j del subsistema i . Las incógnitas pueden reducirse rápidamente a la mitad aplicando relaciones de continuidad de campos de variables.

subdominio, p_i , v_i , z_i , y A_i indican presión, velocidad, altura y área de la sección en el extremo i respectivamente, y Δu_{ij} refiere a la pérdida de energía mecánica debido a la fricción interna entre los extremos i y j . El extremo 1 siempre corresponde al izquierdo de cada subdominio, y los otros se numeran en forma horaria creciente. Deben prestarse algunas consideraciones extras en las ecuaciones para los subsistemas que requieren condiciones CB_k^l sobre extremos que pertenecían al borde original del sistema completo, donde k indica el subsistema y l el extremo local.

Los términos de presión estática $\frac{p_i}{\rho}$ y presión dinámica $\frac{v_i^2}{2}$ para el extremo i pueden agruparse en una única incógnita P_i para simplificar el cálculo:

$$P_i = \frac{p_i}{\rho} + \frac{v_i^2}{2} \quad (3.16)$$

El término de pérdida de energía mecánica Δu_{ij} puede aproximarse mediante las funciones de pérdida de carga distribuida y concentrada [39] de la siguiente forma:

$$\Delta u_{ij} = \frac{v_i^2}{2} \left(\frac{f_{D_i} L_i}{D_i} + \sum_t K_{i,t} \right) + \frac{v_j^2}{2} \left(\frac{f_{D_j} L_j}{D_j} + \sum_t K_{j,t} \right) \quad (3.17)$$

En esta ecuación, el primer término está modelando la pérdida de carga total entre el extremo i y el nodo de divergencia, y el segundo extremo modela la pérdida de carga total entre este nodo y el extremo j . Las variables D_i y L_i corresponden al *diámetro* y a la *longitud* de la cañería desde el extremo i hasta el nodo de divergencia, f_{D_i} corresponde al *factor de Darcy* del flujo en esa porción y $K_{i,t}$ corresponde al *factor de*

pérdida de carga concentrada t de cualquier componente hidráulico presente lo largo de algún punto de esa porción de cañería. Bajo algunas modificaciones sería posible incorporar cambios en las secciones a lo largo de estas porciones, pero no se realizó por simplicidad.

Considerando que el flujo corre por la red hidráulica en régimen laminar, el *factor de Darcy* f_{D_i} puede modelarse como [39]:

$$f_{D_i, lam} = \frac{64}{Re_{D_i}} \quad (3.18)$$

donde $Re_{D_i} = \frac{\rho v_i D_i}{\mu}$, siendo μ la viscosidad dinámica del fluido. Bajo esta aproximación, la ecuación 3.19 queda lineal en v_i y en v_j para aquellos subsistemas en los que pudiera despreciarse la pérdida de carga concentrada:

$$\Delta u_{ij, lam} = \frac{v_i}{2} \left(\frac{64\mu L_i}{\rho D_i^2} \right) + \frac{v_j}{2} \left(\frac{64\mu L_j}{\rho D_j^2} \right) \quad (3.19)$$

Estrategia de resolución

Conforme al esquema de resolución descrito en la sección 1.2, es necesario definir una estrategia para las condiciones de borde en las interfaces de acoplamiento de cada subsistema. La estrategia propuesta es establecer condiciones de tipo *Dirichlet* sobre las interfaces ubicadas a la izquierda de cada subdominio (fijando v) y condiciones de tipo *Neumann* sobre las interfaces ubicadas a la derecha (fijando P). Considerando las ecuaciones de continuidad 1.1 se seleccionan una serie de ecuaciones modelos 1.2 a partir de las relaciones 3.15 de manera que cada subproblema quede bien planteado. En cada interfaz de acoplamiento de cada subsistema queda definida una ecuación de residuo:

$$\begin{cases} R_1 = v_1^{2, guess} - v_1^{2, calc}(CB_1^1, P_1^{2, guess}, P_1^{3, guess}) \\ R_2 = v_1^{3, guess} - v_1^{3, calc}(CB_1^1, P_1^{2, guess}, P_1^{3, guess}) \\ R_3 = P_2^{1, guess} - P_2^{1, calc}(v_2^{1, guess}, CB_2^2, CB_2^3) \\ \dots \end{cases} \quad (3.20)$$

donde la cantidad de residuos depende del tamaño del sistema a analizar.

Las ecuaciones de cada subsistema son resueltas mediante funciones escritas en `Octave`. En este caso el acoplamiento de funciones se da a través de una función *maestra* también escrita en `Octave`.

Redes hidráulicas con regímenes de flujo laminar

En la Figura 3.14 (a) se pueden observar la cantidad de iteraciones requeridas por diferentes métodos para la convergencia de resultados en sistemas hidráulicos laminares

sin pérdidas de carga concentrada, variando la cantidad de subsistemas acoplados. La cantidad de incógnitas en el eje x corresponde a la simplificación obtenida tras aplicar las ecuaciones de continuidad 1.1.

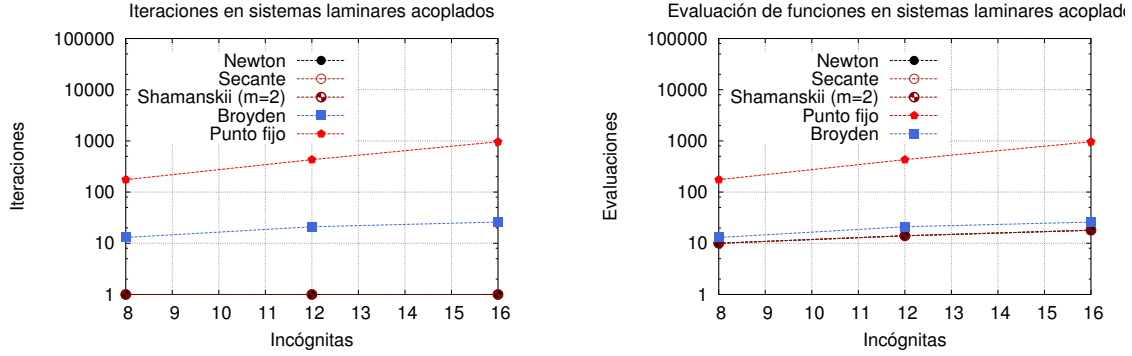


Figura 3.14: Comparación de diferentes métodos numéricos para la resolución de sistemas de redes hidráulicas: (a) iteraciones requeridas y (b) evaluaciones de funciones requeridas.

En la figura se observa que el método del punto fijo requiere excesiva cantidad de iteraciones. Las mismas ascienden hasta 1000 para sistemas con 16 incógnitas reducidas, pero este valor puede variar dependiendo de las semillas iniciales y de los parámetros del sistema. El método de *Broyden* requiere decenas de iteraciones para cada sistema. El método de *Newton-Raphson*, el método de la *secante* y el método de *Shamanskii* de tipo $m=2$ requieren solo una iteración, debido a que los sistemas de cálculo son lineales (las tres curvas se encuentran superpuestas). Sin embargo, el parámetro de comparación de interés es la cantidad total de evaluaciones que requiere cada método. En la Figura 3.14 (b) se observa que la ventaja obtenida por los métodos que construyen la matriz jacobiana es despreciable frente al método de *Broyden*.

Debido a que los métodos *quasi-Newton* han presentado elevada confiabilidad en la resolución de sistemas acoplados a lo largo de todo el trabajo, se investigaron formulaciones alternativas al método de *Broyden*, y en la Figura 3.15 se reportan los resultados.

Además del método *Broyden ortonormal*, que en este estudio se comporta con igual eficiencia que el método de *Broyden* (ambas curvas se solapan), existen formulaciones que aproximan directamente la inversa de la matriz jacobiana (*Broyden inverso 1* y *Broyden inverso 2*). Estos métodos se conocen en la bibliografía como *bad Broyden update* (mala actualización de Broyden) [40] y en la figura puede verse que tienen eficiencia inferior.

El método de *Broyden* se utilizó también mejorando la semilla inicial para la matriz \mathbb{B}_n . En los otros esquemas reportados se utiliza la matriz identidad, pero aquí se reemplazó por una matriz con *unos* en los elementos que corresponden a posiciones llenas de la matriz jacobiana original, y *ceros* en el resto de los elementos. Este llenado es sencillo de implementar ya que simplemente depende de las relaciones de dependencia

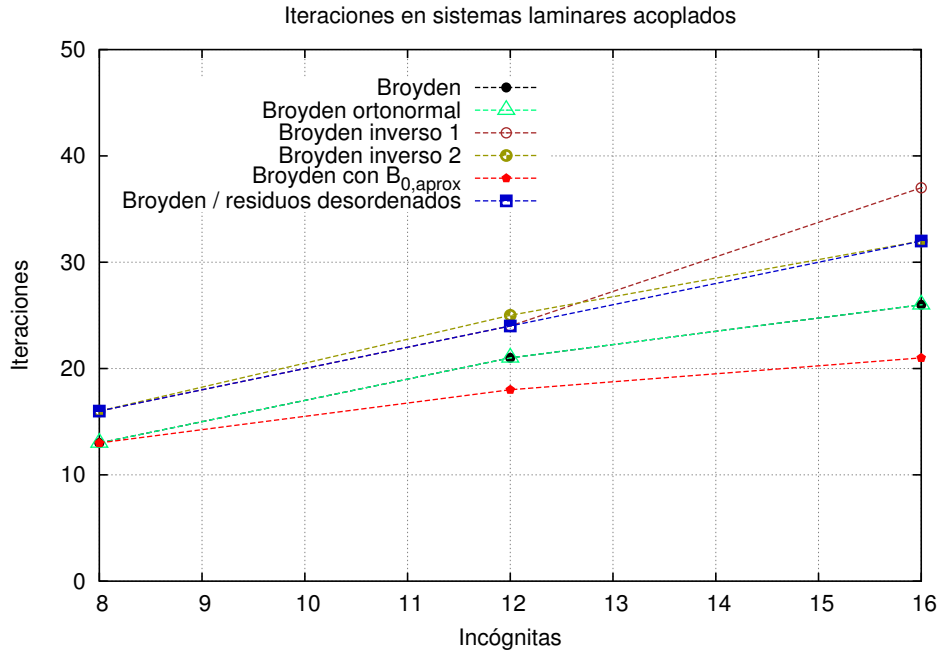


Figura 3.15: Comparación de diferentes esquemas de *Broyden* para la resolución de sistemas de redes hidráulicas con regímenes de flujo laminar.

de las residuos y las incógnitas, que *a priori* son conocidas. Con esta implementación puede observarse en la curva de *Broyden* con $B_{0,aprox}$ que la convergencia mejora a medida que la cantidad de incógnitas aumenta. Una mejor semilla para la matriz B_0 hubiera podido generarse con un cálculo de diferencias finitas, similar al que se venía utilizando para inicializar las matrices en las aplicaciones analizadas en 3.1 y 3.2. En este caso los resultados hubieran coincidido con los resultados del método de la secante, que efectúa el cálculo aproximado de J y luego converge en una sola iteración.

Comúnmente las incógnitas tienen una numeración global, conforme al orden en el que se construyen las columnas de la matriz jacobiana (cada columna representa la derivada del vector residuo respecto de alguna incógnita). De ser posible, los residuos suelen ordenarse de forma tal que el residuo i compute la diferencia entre el valor calculado y el valor *guess* para la incógnita i . En estos casos utilizar la matriz identidad como semilla para B_0 es una buena propuesta. La curva *Broyden / residuos desordenados* corresponde a un esquema en el que el residuo i se corresponde con alguna incógnita j distinta de i . Utilizar la matriz identidad como semilla para B_n es una mala propuesta en este caso, ya que para cada fila i , el *uno* debería ubicarse en la posición j . Esto genera mayor dificultad para la convergencia. Por lo tanto puede comprenderse que la diferencia entre las curvas *azul* y *roja* (que representan los resultados para el mismo método de *Broyden*) depende exclusivamente de una elección inteligente en la forma de proponer la semilla para la matriz B_n . Esta diferencia asciende a 10 iteraciones en un sistema con 16 incógnitas reducidas.

Redes hidráulicas con regímenes de flujo turbulento

Habiendo investigado sistemas de redes hidráulicas con regímenes de flujo laminar, el siguiente paso de estudio consiste en analizar sistemas de redes hidráulicas con regímenes de flujo turbulento. En estos modelos se utiliza directamente la ecuación 3.19 para representar la pérdida de carga entre dos extremos de un dado subdominio, por lo que el sistema de ecuaciones global ahora es un sistema de ecuaciones no lineales. Aquí los métodos estudiados en el apartado anterior se comportan de forma diferente. El método de *Newton-Raphson* ya no converge en una única iteración como lo hace en sistemas lineales. La Figura 3.16 detalla la cantidad de evaluaciones de funciones requerida por distintos métodos para la convergencia de los resultados en sistemas con diferente cantidad de incógnitas reducidas.

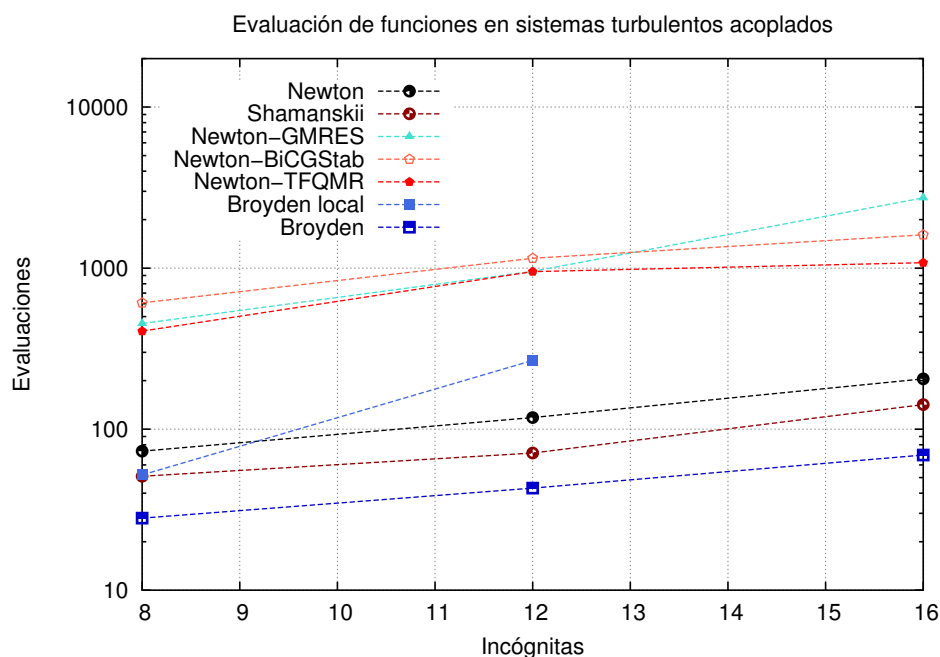


Figura 3.16: Comparación de diferentes métodos numéricos para la resolución de sistemas de redes hidráulicas con regímenes de flujo turbulento.

El método explícito del punto fijo diverge en todos los sistemas analizados y por lo tanto no aparece en la gráfica. Los métodos implícitos estudiados incluyen *line searching*. Los métodos *Newton-Krylov* toman demasiadas evaluaciones para converger. Los métodos de *Newton-Raphson* y *Shamanskii* tienen buena convergencia. De estos dos el último presenta mayor ventaja ya que elude el cálculo de la matriz jacobiana en iteraciones contiguas. El método que mejor se comporta es el método de *Broyden* (globalmente convergente). El método de *Broyden local*, el único que no incluye *line searching*, solo se comporta bien a baja cantidad de incógnitas, y cuando la cantidad de incógnitas es elevada diverge.

3.4. Extensión a problemas acoplados en modelos de núcleo

Estrategia de acoplamiento extendida

Si bien la estrategia de resolución presentada en el [Capítulo 2](#) corresponde a un esquema para resolver problemas que han sido formulados mediante el Método de Descomposición Disjunta de Dominios, el sistema de ecuaciones acoplado a resolver podría provenir de otras formulaciones, y también ser abordados mediante la misma estrategia. Es decir, la herramienta de acoplamiento puede ser utilizada para resolver cualquier tipo de sistemas de ecuaciones acopladas, siempre que existan diferentes códigos que se encarguen de resolver parcialmente algunas de ellas.

A continuación se propone un modelo simplificado para el análisis de la dinámica de núcleo de un reactor nuclear. En los dos últimos apartados se presentan ejemplos de acoplamiento neutrónico-termohidráulico utilizando este modelo.

Presentación del problema

La distribución espacial de la potencia generada en el núcleo de un reactor nuclear depende de diversos factores, como la posición de barras de control, combustibles y demás materiales, y de parámetros físicos como la temperatura del combustible, la temperatura del refrigerante o la fracción de vacío. Los modelos neutrónicos que se utilizan para capturar esta dependencia modelan todos estos factores simplemente a través de una disposición espacial de secciones eficaces. La distribución espacial de potencia, a su vez, genera modificaciones sobre las secciones eficaces, ya sea debido a que está actuando como una fuente de energía, modificando temperaturas y densidades de combustibles, refrigerantes y demás materiales, o debido al movimiento futuro requerido de materiales, como por ejemplo, movimiento de barras de control necesarios para buscar perfiles de potencia planos, o recambio de combustibles por pérdida de criticidad. Además, en la evolución temporal, el quemado de combustible genera alteraciones en la concentración de elementos existentes y aparición de nuevos elementos, que también modifican las secciones eficaces.

La dinámica del núcleo de un reactor nuclear acopla fuertemente múltiples fenómenos, y cualquier modelo que se utilice para estudiarla debe abordar el acoplamiento mediante alguna estrategia. En general, los códigos de cálculo utilizados en el área nuclear están validados para resolver solo alguno de estos fenómenos, por lo que suele requerirse un acoplamiento entre ellos para resolver la dinámica completa. Comúnmente, la evolución temporal se discretiza en diferentes pasos de quemado, y en cada uno de ellos el acoplamiento se resuelve mediante iteraciones explícitas de tipo Picard.

En esta sección se propone un modelo simplificado para el análisis de la dinámica de núcleo de un reactor nuclear durante un ciclo de quemado de elementos combustibles, considerando solo los fenómenos neutrónico y termohidráulico.

Subsistemas de estudio

El cálculo de núcleo se efectúa mediante un modelo de difusión estacionario ⁵ [41]:

$$\Delta \bar{\phi} = \frac{1}{k_{eff}} \Sigma \bar{\phi} \quad (3.21)$$

donde $\bar{\phi}$ es una función vectorial con el valor del flujo neutrónico en cada punto del espacio para diferentes grupos de energía, Σ es la matriz de secciones eficaces asociada a diferentes reacciones para diferentes grupos de energía, y k_{eff} es el factor de multiplicación del reactor. En el modelo propuesto las secciones eficaces dependen de la densidad del refrigerante N_{ref} , de la temperatura del refrigerante T_{ref} , de la temperatura del combustible T_{comb} , y del valor histórico de quemado B del material [42], para cada punto espacial y cada grupo de energía, de modo que:

$$\Sigma = \Sigma(N_{ref}, T_{ref}, T_{comb}) \quad (3.22)$$

La ecuación 3.21 requiere condiciones de borde en el contorno del dominio de cálculo. En el primer ejemplo analizado se utilizan condiciones de borde homogéneas⁶ sobre ϕ . En el segundo ejemplo analizado se imponen condiciones de flujo entrante nulo. Éstas se modelan mediante un artificio de absorción total de los neutrones salientes, extendiendo la malla del cálculo.

Una vez obtenido el flujo neutrónico ϕ , la distribución de potencia P puede calcularse a partir del ritmo de reacciones de fisión [42]:

$$P = \int_{vol} E_{fis,i} \Sigma_{fis,i} \phi_i \quad (3.23)$$

donde $E_{fis,i}$ es la energía liberada por fisiones ocurridas en el rango de energía i , $\Sigma_{fis,i}$ es la sección eficaz de fisión condensada en el grupo de energía i y ϕ_i es la componente del flujo neutrónico también condensada en el grupo de energía i . La distribución de potencia P hallada es utilizada como fuente de energía en los cálculos acoplados de transferencia de energía.

⁵Al modelar un flujo neutrónico estacionario en realidad se está calculando el flujo en un reactor crítico asociado, por lo que la distribución de potencia hallada solo es válida si el k_{eff} calculado es igual a 1. En caso contrario, debe repetirse el cálculo considerando otra distribución de secciones eficaces (por ejemplo, moviendo barras de control).

⁶ Imponer un flujo *p̄hi* nulo en el contorno del dominio implica utilizar la hipótesis de que el flujo se hace nulo a alguna distancia del borde (en la *distancia extrapolada* [42]), y asumir al mismo tiempo que esta distancia es despreciable, para de esta forma no extender el dominio de cálculo.

Los fenómenos hidrodinámicos y de transferencia de calor se modelan con ecuaciones uni-dimensionales y transitorias. La transferencia de calor a través de las estructuras de combustibles se modela con la siguiente ecuación diferencial:

$$\rho \frac{\partial T_{comb}}{\partial t} = \nabla (k \nabla T) + S \quad (3.24)$$

donde ρ es la densidad del medio difusivo, T_{comb} es la temperatura del combustible, k es el coeficiente de conductividad térmica y S es la fuente interna de energía. Este último término es el que tiene la información de la distribución de potencia generada en el núcleo del reactor. El modelo se completa con condiciones de borde adecuadas. El refrigerante fluye alrededor de las estructuras con temperatura media T_{sk} y la energía transferida entre ambos se da por convección:

$$-k \frac{\partial T_{comb}}{\partial n} = h (T - T_{sk}) \quad (3.25)$$

donde h es el coeficiente de transferencia de calor que debe obtenerse a partir de algún modelo adecuado para el régimen de flujo, y n es la dirección normal al borde del dominio de cálculo de T_{comb} .

El modelo hidrodinámico del comportamiento del refrigerante considera una mezcla del fluido en fases líquida y gaseosa. Las ecuaciones básicas diferenciales de este modelo son seis [43]. Las primeras dos son las ecuaciones de continuidad en cada fase:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_g \rho_g v_g A) = \Gamma_g \\ \frac{\partial}{\partial t} \alpha_f \rho_f + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_f \rho_f v_f A) = \Gamma_f \end{cases} \quad (3.26)$$

donde los subíndices g y f refieren a las fases gaseosa y líquida respectivamente, x es la dirección del flujo, normal a la sección de área A , α_i refiere a la fracción parcial de área que la fase i ocupa en A , ρ_i es la densidad del fluido en la fase i , v_i es la velocidad en la dirección x del fluido en la fase i , promediada en la sección y Γ_i es un término de producción fluidica en la fase i . Notar que este por continuidad, $\Gamma_g = -\Gamma_f$.

Las siguientes dos ecuaciones son las ecuaciones de momento de cada fase:

$$\begin{cases} \alpha_g \rho_g A \frac{\partial v_g}{\partial t} + \frac{1}{2} \alpha_g \rho_g A \frac{\partial v_g^2}{\partial x} = -\alpha_g A \frac{\partial P}{\partial x} + \alpha_g \rho_g B_x A - (\alpha_g \rho_g A) FWG(v_g) \\ \quad + \Gamma_g A (v_{gI} - v_g) - (\alpha_g \rho_g A) FIG(v_g - v_f) \\ \quad - C \alpha_g \alpha_f \rho_m A \left[\frac{\partial (v_g - v_f)}{\partial t} + v_f \frac{\partial v_g}{\partial x} - v_g \frac{\partial v_f}{\partial x} \right] \\ \alpha_f \rho_f A \frac{\partial v_f}{\partial t} + \frac{1}{2} \alpha_f \rho_f A \frac{\partial v_f^2}{\partial x} = -\alpha_f A \frac{\partial P}{\partial x} + \alpha_f \rho_f B_x A - (\alpha_f \rho_f A) FWF(v_f) \\ \quad - \Gamma_g A (v_{fI} - v_f) - (\alpha_f \rho_f A) FIF(v_f - v_g) \\ \quad - C \alpha_f \alpha_g \rho_m A \left[\frac{\partial (v_f - v_g)}{\partial t} + v_g \frac{\partial v_f}{\partial x} - v_f \frac{\partial v_g}{\partial x} \right] \end{cases} \quad (3.27)$$

La primera ecuación corresponde a la fase gaseosa y la segunda corresponde a la fase líquida. Las ecuaciones son complejas y pueden analizarse separando los términos. En cualquiera de ambas, los términos del lado izquierdo representan el transporte de momento. Los términos de la derecha representan los agentes que generan el cambio de momento. El primer término representa el cambio debido al gradiente de presión P . El segundo término, debido a las fuerzas de volumen B_x . El tercero, debido a la fuerza de fricción en la pared con coeficientes FWG en la fase gaseosa y FWF en la fase líquida. El cuarto término representa el momento transferido por intercambio de masa en la interfaz con velocidad v_{gI} o v_{fI} . El quinto término representa el cambio de momento debido a la fricción *drag* interfacial, cuyos coeficientes FIG y FIF dependen del modelo que se use, conforme al régimen de flujo. El último término representa una fuerza dada por una masa virtual, debido a la aceleración relativa entre las fases. El coeficiente C dependen del modelo que se utilice según el régimen de flujo.

Las últimas dos ecuaciones hidrodinámicas son las ecuaciones de conservación de energía U_i para cada fase. Considerando algunas simplificaciones [43], las ecuaciones son las siguientes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g U_g) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_g \rho_g U_g v_g A) = -P \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} - \frac{P}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_g v_g A) \\ \quad + Q_{wg} + Q_{ig} + \Gamma_{ig} h_g^* + \Gamma_w h'_g + DISS_g \\ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f U_f) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_f \rho_f U_f v_f A) = -P \frac{\partial \alpha_f}{\partial t} - \frac{P}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_f v_f A) \\ \quad + Q_{wf} + Q_{if} - \Gamma_{ig} h_f^* + \Gamma_w h'_f + DISS_f \end{array} \right. \quad (3.28)$$

La primera ecuación corresponde a la fase gaseosa y la segunda corresponde a la fase líquida. Los términos de la izquierda representan el transporte de energía en cada fase. Los dos primeros términos de la derecha representan trabajo por cambio de fase. El tercer término de la derecha en cada ecuación representa la transferencia de calor con las paredes de las estructuras, y son los términos que acoplan la dinámica fluidica a la distribución de temperatura en los combustibles, (ver ecuación 3.25). El cuarto término en cada ecuación representa la transferencia de calor en la interfaz entre las fases. El quinto término en cada ecuación representa la transferencia de calor debido al cambio de fase en la interfaz. El cambio de masa Γ_{ij} en la interfaz i y la fase j tiene asociado una entalpía de fase h_j^* . Los anteúltimos términos representan la transferencia de calor debido al cambio de fase por contacto con la pared. El cambio de masa Γ_w en la pared w y la fase j tiene asociado una entalpía de fase h'_j . Finalmente, los últimos términos $DISS_i$ representan disipación viscosa en la fase i por fricción en la pared.

En las ecuaciones 3.27 y 3.28 quedan sin definir una serie de coeficientes. Todos estos coeficientes se modelan a partir de ecuaciones de cierre extras [43]. Estas ecuaciones dependen fuertemente de los regímenes de flujo, y básicamente modelan el cálculo de transferencia de masa en la interfaz de fases, de transferencia de calor en la interfaz y con estructuras, de fricción en la interfaz y con estructuras, y de disipación viscosa.

Estrategia de resolución

La evolución temporal se discretiza en intervalos de una cierta cantidad de días. En el primer paso de cálculo se supone que el valor B del quemado es nulo para todas las zonas físicas definidas, y a partir del segundo paso el valor del quemado se actualiza localmente suponiendo que el último ritmo de fisiones calculado en esa zona se mantiene constante. En cada paso de quemado, la estrategia de acoplamiento implementada es considerar a las variables termohidráulicas como dato en el cálculo neutrónico, y la distribución de potencia como dato en el cálculo termohidráulico⁷. El núcleo se discretiza axialmente en una serie de zonas en las cuales se trabaja con valores medios de las variables de acoplamiento. El cálculo termohidráulico arroja variables promediadas en las diferentes zonas axiales del canal. En el cálculo neutrónico, se definen zonas axiales en base a la misma discretización, en cada una de las cuales las secciones eficaces son calculadas a partir de las variables termohidráulicas de la zona correspondiente, y del valor histórico del quemado que se va almacenando en diferentes regiones físicas predefinidas. La potencia calculada se integra también en cada zona axial. Con este modelo, quedan definidas cuatro variables de acoplamiento en cada posición axial i : $T_{comb,i}$, $T_{ref,i}$ y $N_{ref,i}$ y P_i .

En los dos ejemplos presentados a continuación, el código *maestro* utilizado es **Newton**. La comunicación entre códigos *esclavos* se da por manejo de archivos, y con este fin se desarrollaron funciones de lectura y escritura específicas para los códigos de cálculo utilizados.

Acoplamiento neutrónico-termohidráulico utilizando RELAP5 y Fermi

En el primer ejemplo analizado, se estudia el acoplamiento neutrónico-termohidráulico durante un ciclo de quemado de 400 días. El dominio de cálculo neutrónico consiste en un modelo de núcleo sencillo propuesto para evaluar la estrategia de acoplamiento, con dimensiones y parámetros arbitrarios. Nueve elementos combustibles son dispuestos en un arreglo de 3x3 dentro de un núcleo cúbico de un metro de lado con generación de 100MW térmicos. En la Figura 3.17 puede observarse la geometría utilizada y la distribución del flujo neutrónico en el núcleo. Sobre el final del ciclo de quemado, la distribución del flujo apenas varía.

⁷ Notar que otra formulación del problema no hubiera sido posible, porque el programa de cálculo neutrónico no está capacitado para calcular las variables termohidráulicas en función de una distribución de potencias, ni el programa de cálculo termohidráulico está capacitado para calcular la distribución de potencias en función de las temperaturas y densidades de los materiales. A veces, la estrategia de formulación del problema acoplado queda definida por las capacidades de los programas *esclavos*. En este caso, además, una formulación diferente hubiera resultado en un problema mal planteado.

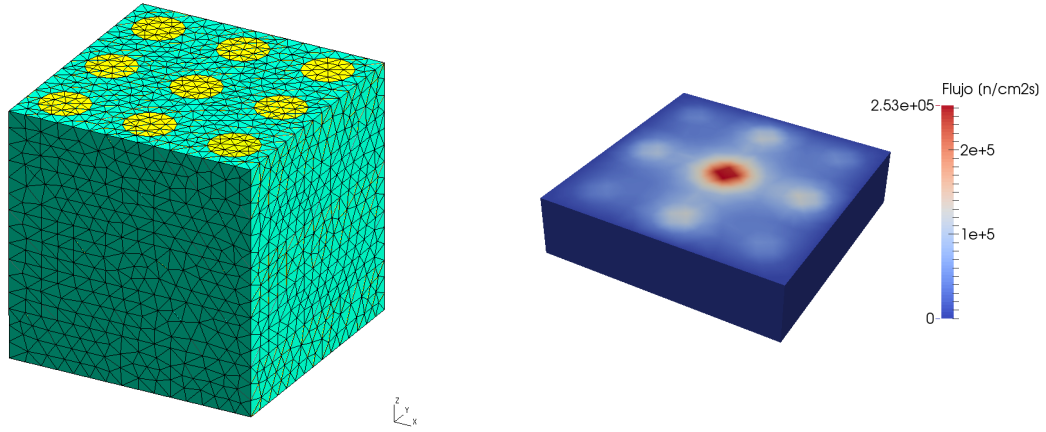


Figura 3.17: (a) Esquema de núcleo simple en análisis de acoplamiento neutrónico-termohidráulico utilizando **RELAP5** y **Fermi**. (b) Distribución del flujo neutrónico obtenido en un corte axial a 0.25 cm desde la base del núcleo a principio del ciclo de quemado.

El dominio de cálculo termohidráulico consiste en una simplificación de la geometría del núcleo, considerando un único canal de refrigeración cilíndrico de sección similar a aquella por la que fluye todo el caudal del refrigerante. Este canal está en contacto con una única estructura que genera energía, del mismo diámetro que el que tendrían los pines de los elementos combustibles y altura equivalente a la suma de todos ellos. Como el modelo es ficticio, se suponen valores arbitrarios para el diámetro y la cantidad de pines. La energía total generada en esta estructura es igual a la potencia total generada por el reactor. Este tipo de modelos es comúnmente utilizado en análisis de acoplamiento neutrónico-termohidráulico [44]. Si bien la geometría de análisis es artificial, es importante contar con modelos de secciones eficaces que representen fielmente la dependencia con las variables de estado termohidráulicas. Por este motivo se construyeron funciones de Σ dependientes en T_{comb} , T_{ref} , N_{ref} y el valor del quemado B a partir de tablas de secciones eficaces proporcionadas por DIFRA (División de Física de Reactores Avanzados de CNEA).

La evolución temporal se discretiza en intervalos de 10 días. Se definen cinco zonas axiales de acoplamiento. Con el modelo de resolución previamente comentado, quedan definidas en total veinte incógnitas de acoplamiento. En la Figura 3.18 se esquematiza la estrategia para un paso de quemado genérico. Los mapeos entre las variables termohidráulicas y las secciones eficaces fueron implementados en la función *th2xs* en el código *maestro Newton*. Las potencias P_i calculadas por el código neutrónico son escaleadas mediante la función *P2p* a valores p_i en el cálculo de residuos. Estos valores escaleados se definieron de tal forma que todas las variables de acoplamiento tuvieran magnitudes similares, para evitar la construcción de matrices mal condicionadas en los métodos de resolución implícitos. La distribución de potencias que efectivamente **Newton** envía a al código termohidráulico se define a partir de un nuevo mapeo *p2fp*

en el que se calculan las fracciones de potencia correspondientes a cada zona axial.

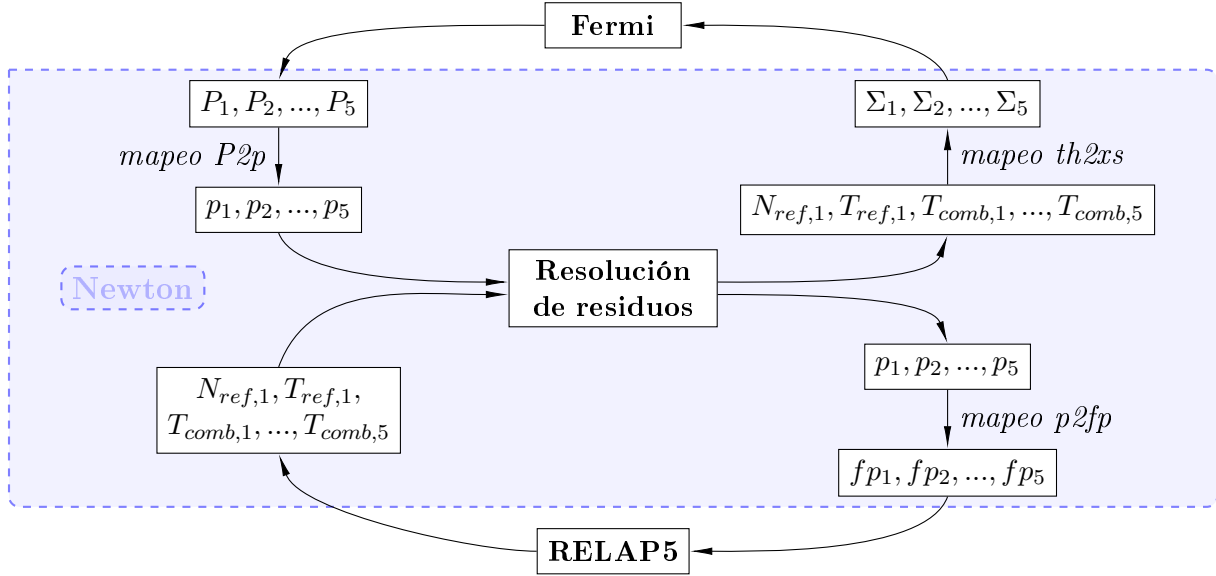


Figura 3.18: Instancias de cálculo de las variables relacionadas con cada programa *esclavo* en la resolución del problema de acoplamiento neutrógeno-termohidráulico. En este ejemplo los programas **Fermi** y **RELAP5** se comunican con **Newton**.

El modelo neutrógeno es resuelto con **Fermi** [45]. **Fermi** es un código de núcleo que calcula el flujo neutrógeno a un grupo de energía a partir de un esquema de elementos finitos de la ecuación 3.21. Las ecuaciones modelos presentadas en 3.24, 3.26, 3.27 y 3.28, los modelos de cierre necesarios para formular problemas bien definidos que ajusten a los distintos regímenes de flujo, y las ecuaciones modelos para las condiciones de borde de cada una de estas ecuaciones, son resueltas con **RELAP5**. **RELAP5** es un código de análisis de seguridad de reactores nucleares desarrollado por el Laboratorio Nacional de Idaho (INL, por sus siglas en inglés). **RELAP5** ha sido validado en cálculos termohidráulicos de reactores nucleares y debido al amplio uso que tiene este código a nivel internacional se decidió utilizar en la resolución del problema modelado en la presente sección, para demostrar la posibilidad de uso en acoplamientos mediante la estrategia descrita en el Capítulo 2. **RELAP5** resuelve las ecuaciones 3.24, 3.26, 3.27 y 3.28 a partir de esquemas semi-implícitos de diferencias finitas.

La resolución del sistema acoplado se llevó a cabo utilizando cuatro métodos diferentes. Cada paso de quemado se consideró convergido cuando la norma infinito del residuo se hizo inferior a una tolerancia tol absoluta prefijada. Esta tolerancia tol se fijó en 0,1. Esta propuesta implica iterar con la solución hasta que el residuo en cada variable caiga por debajo de 0,1, que es la precisión de los resultados impresos por **RELAP5**. Exigir una mayor precisión en la impresión de resultados no es justificable debido a los modelos y las aproximaciones utilizadas. En todos los métodos se utilizó extrapolación lineal para proponer la semilla \bar{x}_0^n en el cálculo del paso de quemado n . La Figura 3.19 muestra la cantidad de evaluaciones de funciones requerida por cada

método para la convergencia de la solución en cada paso de quemado, y la Tabla 3.4 integra la cantidad total de evaluaciones y el tiempo consumido por cada uno.

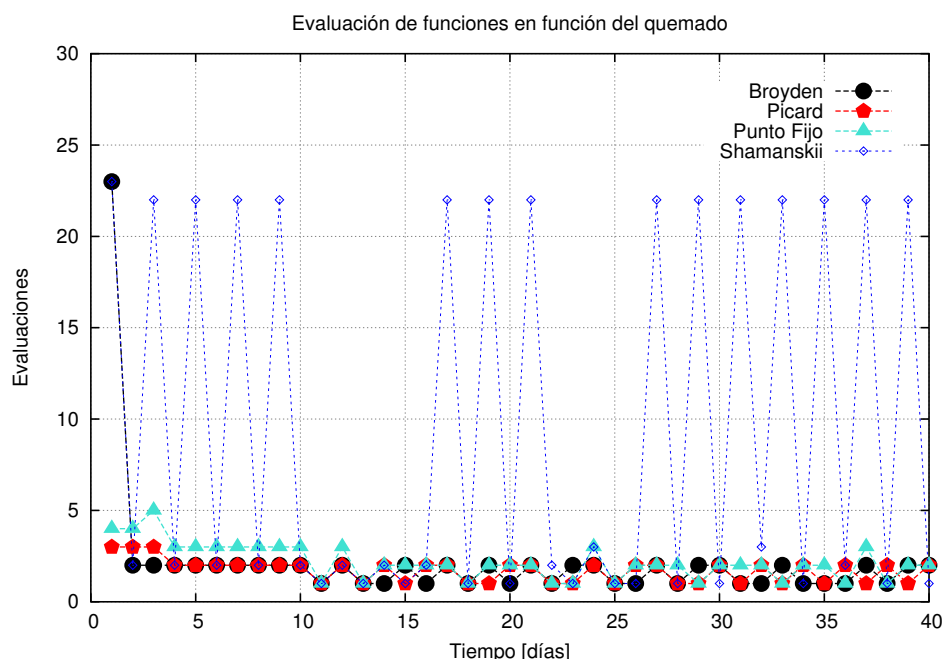


Figura 3.19: Evaluaciones de funciones en cada paso de quemado en cálculo con **RELAP5** y **Fermi**.

Método no lineal	Δt [días]	Extrapolación de \bar{x}^n	Extrapolación de \mathbb{J}^n	Evaluaciones totales	Tiempo total [s]
Broyden	10	$\mathcal{O}(1)$	$\mathcal{O}(1)$	85	610
Picard	10	$\mathcal{O}(1)$	-	68	684
Punto fijo	10	$\mathcal{O}(1)$	-	87	628
Shamanskii	10	$\mathcal{O}(1)$	$\mathcal{O}(0)$	370	2663

Tabla 3.4: Evaluaciones totales y tiempo total requerido por cada método no lineal en cálculo de quemado con **RELAP5** y **Fermi**.

El método *Dirichlet-to-Neumann* (iteraciones de *Picard*) es el método explícito que consume mayor tiempo de cálculo. El método del punto fijo demuestra la ventaja de mantener a los diferentes programas *exclavos* corriendo en paralelo y concluye con un tiempo de cálculo inferior. Se ensayaron diferentes implementaciones del método de *Shamanskii* para el uso en este problema particular. El esquema reportado requiere la construcción de la matriz jacobiana en el primer paso temporal, y luego se evalúa si es necesario su reinicialización cada dos pasos temporales, en base a la cantidad de iteraciones que le toma para converger. Este método toma excesivas evaluaciones de funciones y recursos de cálculo asociado⁸. Esquemas con menor frecuencia de reinicio resultan divergentes en algún punto del ciclo de quemado. Los esquemas con mayor

⁸ Si bien el cálculo de la matriz jacobiana es paralelizable, esta paralelización hubiera requerido la múltiples ejecuciones del mismo programa al mismo tiempo. Se optó por serializar las sucesivas

frecuencia de reinicio, como el método de *Newton-Raphson* (que reinicia la matriz jacobiana en cada iteración), convergen pero requieren muchas más evaluaciones asociadas. Por último, se utilizó el método de *Broyden* que en previas aplicaciones había demostrado muy buenos resultados. Si bien este método requiere numerosas evaluaciones en la primera iteración del primer paso de cálculo para la construcción de la matriz jacobiana, en los siguientes pasos de quemado converge en pocas iteraciones, obteniendo el menor tiempo de cálculo total. La ganancia de tiempo obtenida hubiera sido mayor para un ciclo de quemado con mayor cantidad de pasos. Los métodos *Newton-Krylov* no fueron tenidos en cuenta puesto que hubieran requerido numerosas evaluaciones de funciones debido a la gran cantidad de incógnitas del sistema.

Acoplamiento neutrónico-termohidráulico utilizando RELAP y PUMA

La segunda aplicación analizada consiste en el análisis del núcleo del reactor CAREM-25 [46] durante un ciclo de quemado de 400 días. CAREM-25 es un reactor integrado de convección natural con generación 100 MW térmicos. Utiliza agua liviana como refrigerante y uranio enriquecido como combustible, y cuenta con diseños innovativos en sistemas de seguridad [46]. El análisis de este reactor es un problema complejo, con gran cantidad de incógnitas de acoplamiento.

El dominio de cálculo neutrónico consiste en un núcleo de 1.4 metros de altura y 1.312 metros de diámetro equivalente. Este núcleo está compuesto por 61 elementos combustibles. Cada elemento combustible posee una sección transversal de forma hexagonal con 127 posiciones, entre las que se disponen barras con material combustible y absorbente. En la Figura 3.20 puede observarse un esquema del núcleo del reactor. La malla de cálculo utilizada está compuesta por celdas pentahédricas. Los diferentes colores en la Figura 3.20 representan diferentes materiales ficticios homogeneizados por zona en previos cálculos de celda. Las diferencias corresponden al grado de enriquecimiento de cada combustible y a la posibilidad que algunos tienen de alojar materiales de control. Las barras de control del Sistema de Ajuste y Control (SAC) se encuentran insertadas hasta la mitad de la longitud activa del núcleo durante todo el ciclo de quemado. No se detalla la disposición de materiales porque no se considera relevante para el objetivo de estudio.

La ecuación 3.21 que modela el flujo neutrónico es resuelta con **PUMA** [47] a cinco grupos de energía. **PUMA** es un código de núcleo desarrollado por CNEA que calcula el flujo neutrónico a partir de un esquema de diferencias finitas de la ecuación 3.21. El modelo de núcleo desarrollado para su cálculo con **PUMA** fue proporcionado por

evaluaciones que requieren su construcción debido a un criterio de diseño de mantener controlada la cantidad de ejecuciones de código disparadas por el código *maestro*.

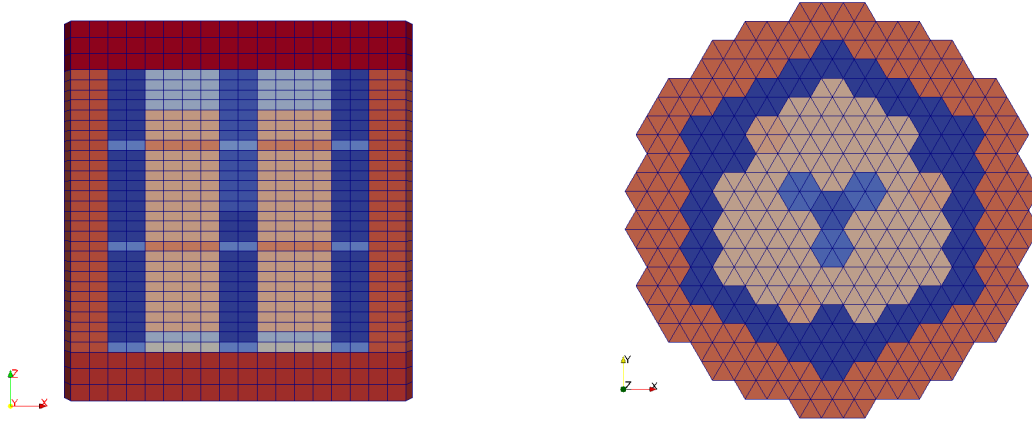


Figura 3.20: Modelo de núcleo del reactor CAREM-25: (a) Corte transversal. (b) Corte axial.

DIFRA.

El dominio de cálculo termohidráulico consiste en una simplificación de la geometría del núcleo, similar a la realizada en el ejemplo de análisis previo. Se modela un único canal de refrigeración en contacto con una estructura de calor que contiene toda la masa de los elementos combustibles. La longitud de esta estructura es equivalente a la longitud de la suma de todos los pines presentes en los elementos combustibles. Radialmente, respeta la distribución de material de combustible, *gap* y material de vaina. Este modelo proviene de una monografía [48] realizada durante el cursado de *Modelado de sistemas termohidráulicos en reactores mediante códigos de planta*. Las ecuaciones hidrodinámicas son resueltas con **RELAP5**.

La evolución temporal se discretiza en intervalos de 5 y 10 días para diferentes simulaciones. La altura del núcleo se discretiza en tramos de 5 cm, con lo que quedan definidas 28 zonas axiales diferentes que se mantienen acopladas entre ambos modelos. Como en cada zona axial quedan definidas cuatro incógnitas de acoplamiento, en total existen 112 incógnitas.

Durante la evolución de quemado no se realizó movimiento de barras de control para el mantenimiento de la criticidad. Se mantuvieron insertadas hasta la mitad del núcleo durante todo el ciclo para que el exceso o la falta de reactividad no sea tan abrupta en los extremos. El movimiento de barras hubiera incorporado un modelo extra en el acoplamiento⁹ y aquí no fue considerado por simplicidad. En la Figura 3.21 puede observarse cómo evoluciona la distribución de potencia en un corte axial a la mitad del núcleo, y en la Figura 3.22 se observa la evolución de la distribución de quemado

⁹ Así como la termohidráulica del núcleo genera alteraciones en la distribución de las secciones eficaces en función de la distribución de potencia, el movimiento de barras generaría también alteraciones en la distribución de las secciones eficaces en función de la distribución de potencia y del k_{eff} del núcleo.

correspondiente. La distribución de potencia se atenúa en el centro y se concentra en los anillos intermedios del núcleo a medida que avanza el ciclo de quemado.

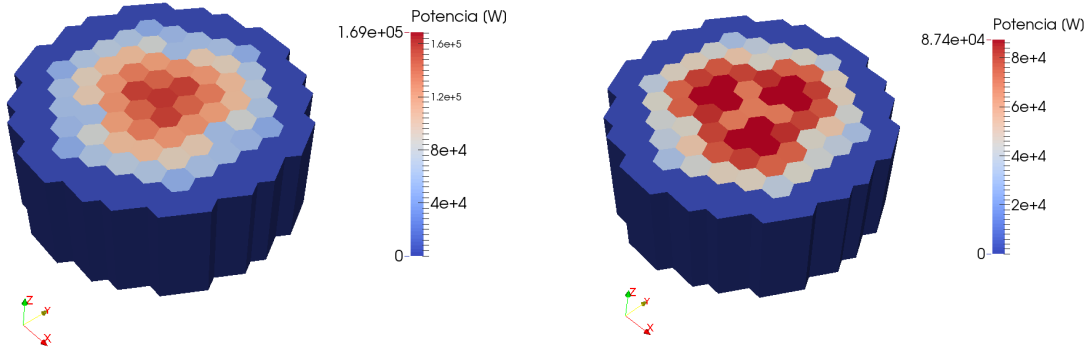


Figura 3.21: Evolución de la distribución de potencia en corte axial a la mitad del núcleo: (a) Distribución de potencia en día 10. (b) Distribución de potencia en día 400.

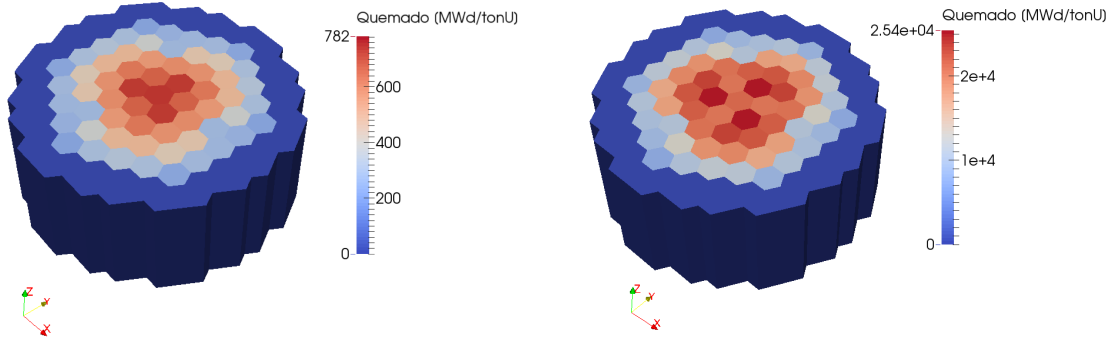


Figura 3.22: Evolución de la distribución de quemado en corte axial a la mitad del núcleo: (a) Distribución de quemado en día 10. (b) Distribución de quemado en día 400.

En la Figura 3.23 se observa la evolución de la reactividad a lo largo del ciclo del quemado. La reactividad está relacionada con el factor de multiplicación k_{eff} de la siguiente forma:

$$\rho = \frac{k_{eff} - 1}{k_{eff}} \quad (3.29)$$

y generalmente se expresa en pcm (por ciento mil = 10^{-5}). Desde Principio De Ciclo (BOC, por sus siglas en inglés) hasta aproximadamente el día 50 la reactividad decrece debido al consumo del material fisil. Para este punto, el consumo de venenos quemables incluidos en los elementos combustibles comienza a cobrar importancia y por ello se empieza incrementar la reactividad. El pico de reactividad ocurre aproximadamente a

los 160 días y tras esto la reactividad continúa decreciendo hasta Fin De Ciclo (EOC, por sus siglas en inglés). Es necesario resaltar una vez más que esta dinámica puede variar si en el modelo se hubiera incluido el movimiento de barras de control.

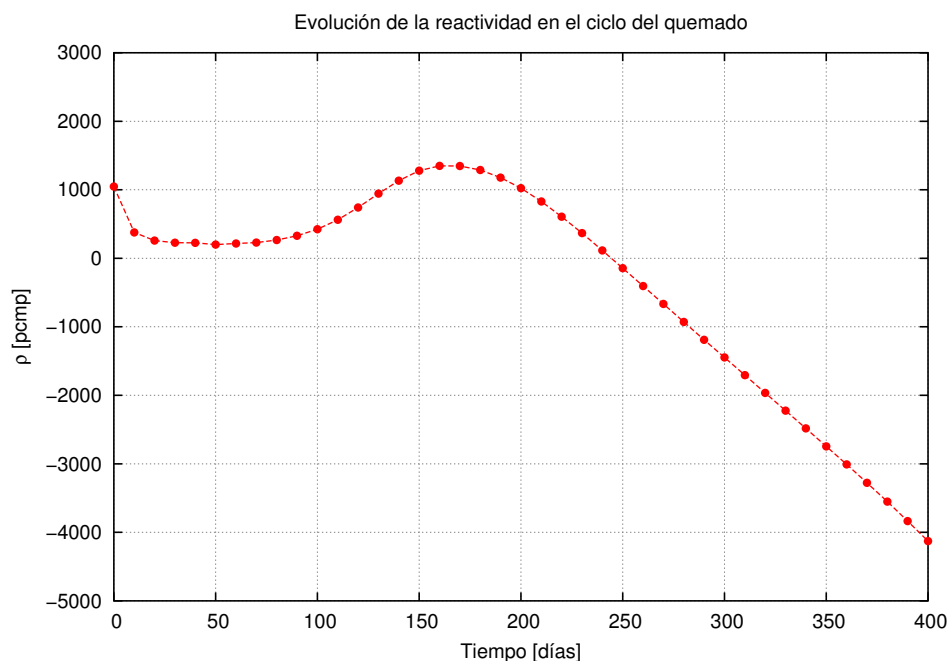


Figura 3.23: Evolución de la reactividad en el ciclo de quemado del reactor CAREM-25. Durante todo el ciclo las barras de control del SAC permanecen insertadas hasta la mitad de la longitud activa del núcleo.

En la resolución del sistema acoplado se utilizaron los mismos métodos que los estudiados en el ejemplo previo, con mismo criterio de convergencia para cada paso de quemado. Se utilizaron extrapolaciones de orden 0 y orden 1 para la semilla \bar{x}^n y diferente discretización temporal. Los métodos explícitos completan el ciclo de quemado de manera robusta y estable. El método de *Picard* tiene problemas en algunos pasos de quemado, en los que queda iterando entre valores que se repiten en ciclos. Como el residuo en estos pasos era solo un orden de magnitud mayor a la tolerancia fijada, se optó por considerarlos convergido al cabo de 10 iteraciones y continuar con la evolución. El método del punto fijo, en cambio, converge en cada paso de quemado. Si bien la cantidad de evaluaciones de funciones en cada paso de quemado es comparable entre los dos métodos, el método del punto fijo resuelve cada paso de quemado paralelizando las ejecuciones de código y por ello completa el ciclo en menor cantidad de tiempo.

La Tabla 3.5 resume las evaluaciones de funciones y los recursos temporales consumidos por cada método estudiado. En las Figuras 3.24 y 3.25 se reporta la cantidad de evaluaciones de funciones requerida por distintos esquemas en cada paso de quemado, utilizando los métodos de *Picard* y del punto fijo respectivamente.

El método implícito de *Broyden* fue estudiado en detalle por haber sido el que mejores resultados había entregado a lo largo de todo el trabajo, incluyendo el modelo

Método no lineal	Δt [días]	Extrapolación de \bar{x}^n	Evaluaciones totales	Tiempo total [s]
Picard	5	$\mathcal{O}(0)$	243	11019
Picard	5	$\mathcal{O}(1)$	195	9085
Picard	10	$\mathcal{O}(0)$	131	5898
Picard	10	$\mathcal{O}(1)$	104	4774
Punto fijo	5	$\mathcal{O}(0)$	139	5415
Punto fijo	5	$\mathcal{O}(1)$	186	6990
Punto fijo	10	$\mathcal{O}(0)$	101	3755
Punto fijo	10	$\mathcal{O}(1)$	107	3919

Tabla 3.5: Evaluaciones totales y tiempo total requerido por cada método no lineal en cálculo de quemado con **RELAP5** y **PUMA**.

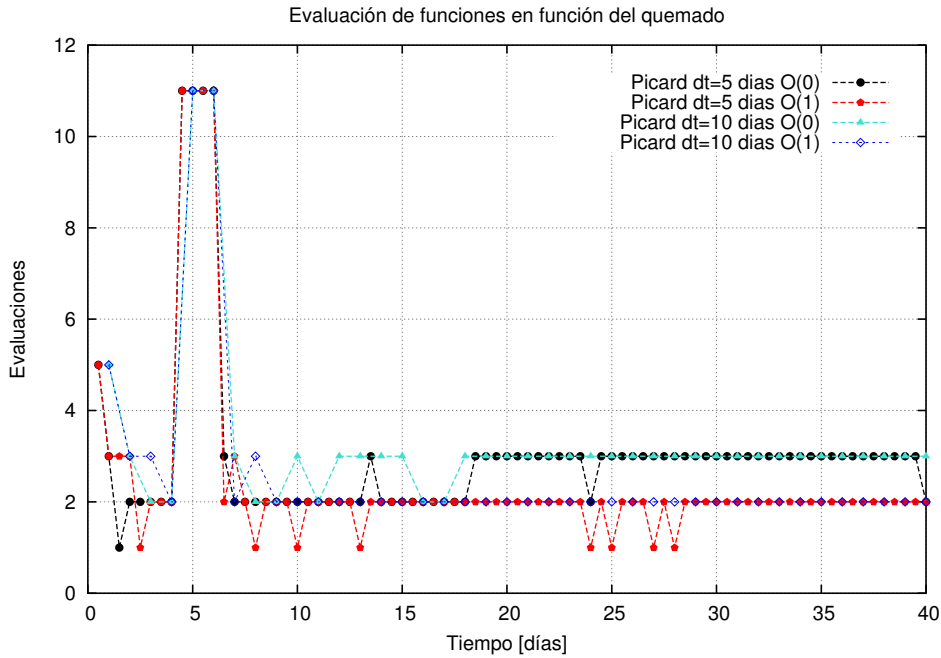


Figura 3.24: Evaluaciones de funciones utilizando el método de *Picard* en cada paso de quemado en cálculo con **RELAP5** y **PUMA**.

de acoplamiento neutrónico-termohidráulico del apartado previo. Se hicieron múltiples ensayos incluyendo inicialización y reinicialización de matriz jacobiana, órdenes de extrapolación para el vector de incógnitas \bar{x}_0^n y la matriz \mathbb{B}_0^n y diferentes semillas para arrancar el cálculo. También se varió el parámetro de discretización temporal. En las simulaciones con inicialización de la matriz jacobiana, la cual demanda 113 evaluaciones de funciones extra, las soluciones para cada paso de quemado convergen con un promedio de 1 iteración durante los primeros 20 pasos aproximadamente. Este resultado es muy bueno, ya que los métodos explícitos convergen con un promedio entre 2 y 3 iteraciones en cada paso de quemado. Sin embargo la mayoría de las simulaciones no se pudo completar, debido a que en algún punto de la evolución aparece una inestabilidad en la convergencia de los resultados en la primera zona acoplada del núcleo.

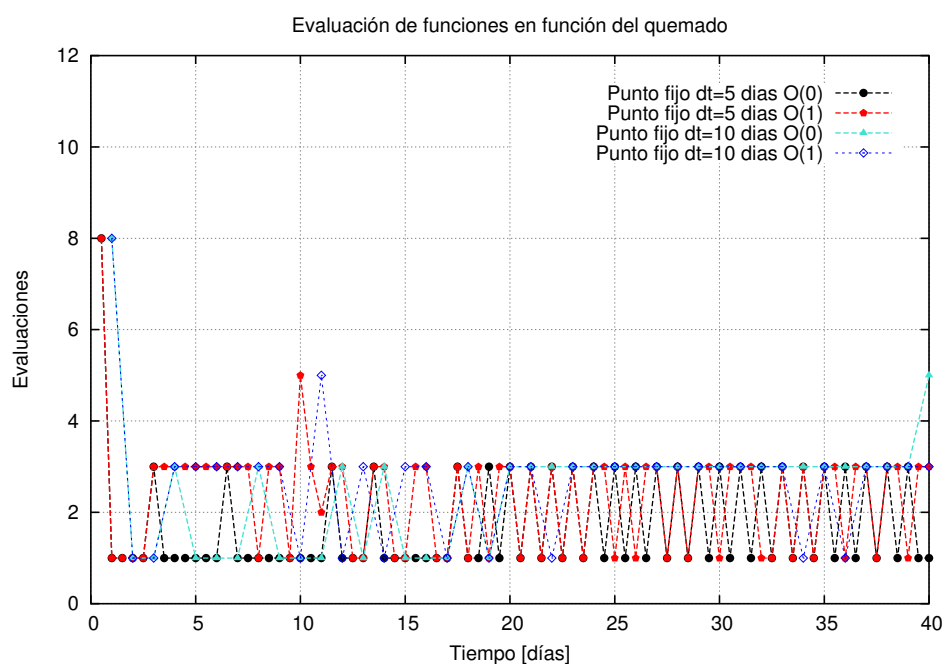


Figura 3.25: Evaluaciones de funciones utilizando el método del punto fijo en cada paso de quemado en cálculo con **RELAP5** y **PUMA**.

Esta inestabilidad genera una mala actualización de la matriz de *Broyden* y finalmente el método termina proponiendo valores *guess* sin sentido físico. Se desconoce si la inestabilidad encontrada se debe a algún fenómeno físico o a un *bug* del modelo.

En esta sección se ensayaron solo dos modelos de núcleo para estudiar el acoplamiento neutrónico-termohidráulico, por lo que para obtener conclusiones sobre la ventaja de las técnicas implícitas deberían estudiarse múltiples modelos alternativos. Cabe destacar que la estrategia de acoplamiento desarrollada provee toda la estructura necesaria para investigar nuevas propuestas.

Capítulo 4

Conclusiones

En la primera sección de este capítulo se resumen las tareas realizadas en el trabajo de maestría y se presentan los resultados obtenidos más destacados. En la siguiente sección se comentan las líneas de investigación propuestas para continuar el trabajo.

4.1. Logros alcanzados

En el trabajo se desarrolló una estrategia genérica que permite resolver problemas fluidodinámicos formulados mediante el Método de Descomposición Disjunta de Dominios. En la última etapa se extendió la estrategia para cubrir la resolución de problemas acoplados en sistemas complejos que requieren análisis multifísicos. Esta estrategia de acoplamiento está compuesta por dos etapas:

1. una primera etapa de modelado, que consiste en la formulación de un problema global, compuesto por subproblemas bien planteados, definición de variables incógnitas y de ecuaciones de residuos (ver [Capítulo 1](#));
2. una segunda etapa de resolución, que consiste en la selección de programas de cálculo que resuelvan los subproblemas parciales, selección del programa *maestro* que resuelva las ecuaciones de residuos, selección de modelos de comunicación, y ejecución de la resolución (ver [Capítulo 2](#));.

Durante el trabajo se resolvieron problemas utilizando códigos cuyas fuentes estaban disponibles para realizar implementaciones de funciones de comunicación, y también utilizando códigos cerrados que se utilizaron como cajas negras de cálculo y se comunicaron mediante manejo de archivos. En las tareas de acoplamiento se utilizaron dos códigos *maestros*: el código **Coupling**, en la resolución de problemas formulados mediante el Método de Descomposición Disjunta de Dominios, y el código **Newton**, que fue diseñado de forma tal que pudiera utilizarse en la resolución de cualquier tipo de problema que requiriera el acoplamiento de códigos, y mediante diversos modelos

de comunicación. Las fuentes de **Newton** fueron publicadas en **Github** junto con un manual de uso.

La herramienta de acoplamiento se utilizó en la sección 3.1 para modelar la dinámica en una fuente fría de neutrones, acoplando un subdominio de cálculo cero-dimensional y otro bi-dimensional. El acople permitió analizar el detalle fluídico en el interior de la cavidad conservando la dinámica global de todo el sistema, incluyendo el circuito de enfriamiento. Se utilizaron diferentes esquemas numéricos de resolución de sistemas no lineales y el método de *Broyden* resultó ser el más eficiente.

El segundo estudio realizado en la sección 3.2 fue el análisis del *mockup* del SSP del OPAL, acoplando un modelo tri-dimensional del arreglo de válvulas presente en la red hidráulica a un modelo cero-dimensional del resto del sistema. El análisis reveló que la inercia del fluido en la red hidráulica solo influye en el transitorio inicial y genera un retardo de hasta un segundo en el drenaje del tanque, respecto de aquellos modelos que no consideran este efecto. Transcurrido este transitorio, el caudal de descarga se mantiene aproximadamente constante y es similar en todos los modelos, lo cual verifica el cálculo mediante estudios independientes. El acoplamiento permitió también estudiar la dinámica del vaciado considerando diferentes válvulas en falla, y los resultados arrojaron diferencias despreciables. También se pudo confirmar que el gas de relleno de la última porción de las cañerías no genera ningún efecto apreciable durante el vaciado. En estos análisis se compararon diferentes métodos numéricos de resolución de sistemas no lineales y el método de *Broyden* demostró también ser el más eficiente, junto con su variante, el método de *Broyden ortonormal*. Se emplearon diferentes métodos de generación de semillas para el vector de incógnitas \bar{x}_n y la matriz de iteración de *Broyden* \mathbb{B}_n en la iteración n , y se concluyó que el esquema idóneo para resolver este tipo de problemas es utilizar extrapolaciones de alto orden para \mathbb{B}_n en las primeras etapas del cálculo, y luego solo continuar con extrapolaciones de algún orden para \bar{x}_n .

En la sección 3.3 se resolvieron sistemas de redes hidráulicas con grandes cantidades de incógnitas. Los modelos de estudio desarrollados para los diferentes subsistemas fueron sencillos, de modo de poder estudiar diferentes métodos de resolución de sistemas de ecuaciones utilizando bajo tiempo de cálculo. En el estudio de sistemas con regímenes de flujo laminar el sistema de ecuaciones a resolver es un sistema lineal. El método de *Newton-Raphson* y otros métodos *quasi-Newton*, entre los que también se encuentra el método de *Broyden* resultaron ser los más eficientes. Se propuso la construcción de una semilla para la matriz de cálculo en el método de *Broyden* que acelera la convergencia de los resultados. En el estudio de sistemas con regímenes de flujo turbulento el sistema de ecuaciones a resolver es un sistema no lineal. Los métodos de resolución más eficientes resultaron ser nuevamente el método de *Newton-Raphson* y otros métodos *quasi-Newton* combinados con evaluaciones de *line-searching* entre las iteraciones no lineales.

En la sección 3.4 se extendió la metodología de acoplamiento a la resolución de problemas multifísicos provenientes de modelos de análisis del núcleo de reactores nucleares. Se desarrolló un modelo de acoplamiento neutrónico-termohidráulico para el estudio de ciclos de quemado de combustibles y se evaluó la eficiencia de resolución de diferentes esquemas numéricos. Se analizaron dos núcleos diferentes, y en ambos se constató que la técnica de *Picard* comúnmente utilizada no es la más eficiente ya que requiere evaluaciones serializadas que bien pueden paralelizarse utilizando el método del punto fijo. El método de *Broyden* resultó ser eficiente en el primer modelo de núcleo, que tenía inferior cantidad de incógnitas. En el segundo modelo de núcleo analizado resultó ser eficiente solo durante la primera mitad del ciclo de quemado, pero luego encontró inestabilidades.

4.2. Trabajos futuros

La estrategia de acoplamiento desarrollada permite resolver cualquier tipo de problemas acoplados. Si bien se ha intentado cubrir diversos tipos de problemas en el área de la fluidodinámica, incluyendo acoples multi-dimensionales y acoples con baja cantidad de incógnitas y con alta cantidad de incógnitas, solo se han realizado algunos ensayos en el área multifísica. Los resultados obtenidos en los modelos de núcleo están lejos de ser concluyentes. Aquí se abren las puertas a trabajos futuros en los que se investiguen nuevos modelos y esquemas numéricos de resolución. En primera instancia, sería bueno investigar otros métodos numéricos para la resolución del acoplamiento neutrónico-termohidráulico en los modelos propuestos. En segunda instancia, podrían ampliarse estos modelos, acoplando al cálculo mayor cantidad de canales de refrigeración. Sería interesante también evaluar el desempeño en el cálculo de la dinámica de núcleos que acoplen el movimiento de las barras de control y el comportamiento de materiales.

Otro trabajo interesante sería evaluar la evolución de la criticidad en el núcleo de reactores que utilizan el vaciado del tanque reflector como SSP. Este tipo de cálculos implicaría acoplamientos fuertes entre modelos multiescalas del SSP, como el analizado en la sección 3.2, y un acoplamiento débil con el modelo neutrónico, ya que si bien el drenaje del material reflector afecta las secciones eficaces, la dinámica del núcleo no genera retroalimentación.

También existe otra línea de investigación fuertemente relacionada con el acoplamiento de códigos. Algunos esquemas de acoplamiento implícito utilizados en el trabajo requirieron la construcción de la matriz jacobiana del sistema de ecuaciones a resolver. En este trabajo se abordó una metodología de aproximación de sus elementos por diferencias finitas, requiriendo numerosas ejecuciones de código. Una técnica alternativa que no ha sido investigada es la de diferenciación automática [49]. La diferenciación

automática requiere implementaciones en el código fuente del programa de cálculo utilizado, el cual en lugar de devolver al código *maestro* que lo está llamando sólo el valor de las variables incógnitas, también debe devolver el valor de sus derivadas con respecto a las variables independientes requeridas (que en este caso, deberían ser las variables que el código *maestro* le envía como dato). Esta técnica permitiría construir la matriz jacobiana de manera mucho más rápida y precisa, con la consecuente aceleración en la convergencia de los resultados.

Apéndice A

Descripción del código maestro Coupling

Coupling es un código escrito en **Fortran 90**, desarrollado por Jorge Leiva, Pablo Blanco y Gustavo Buscaglia. Fue diseñado como programa *maestro* en las funciones de acoplamiento explícito e implícito, estableciendo la comunicación con diversos programas *esclavos* mediante funciones de MPI. Su desempeño fue validado en diversos trabajos de acoplamiento [1] [2] [3] [6].

A.1. Modelado de problemas acoplados

El programa **Coupling** resuelve problemas que fueron formulados mediante el Método de Descomposición Disjunta de Dominios descrito en el [Capítulo 1](#). El esquema de resolución fue diseñado de tal forma que permite que las interfaces de acoplamiento cuenten con múltiples pares de incógnitas vectoriales en diferentes nodos. Las principales variables en la definición de un problema son las siguientes:

- Cantidad de subdominios acoplados (variable $Ncomp$).
- Cantidad de uniones globales (variable $Nbond$).
- Cantidad de superficies en cada subdominio (variable $Nsupc$).
- Matriz de conectividades entre las interfaces de diferentes subdominios (variable con numeraciones locales $Localsur$ y globales $Incid$).
- Cantidad de pares de variables incógnitas en cada interfaz (variable $Npair$). Se supone que cada incógnita de cada interfaz está acompañada de otra variable incógnita relacionada con su gradiente. Por ejemplo, *temperatura* y *flujo de calor*, o *velocidad* y *presión*.

- Cantidad de nodos con incógnitas en cada interfaz (variable *Nodpair*).
- Cantidad de componentes escalares en cada nodo (variable *Npaire*).
- Tipo de condición de borde para cada nodo (variable *indexbc*). Las opciones posibles son condiciones de borde *esenciales* (tipo *Dirichlet*) o *naturales* (tipo *Neumann*), y deben establecerse por separado para cada subdominio.

Para que el problema de acoplamiento quede bien definido, todos estos datos deben ser provistos en el archivo de configuración `mesh.cfg` utilizando palabras claves específicas. Además, debe proveerse un archivo de configuración extra, el archivo `couple.cfg`. En este archivo se detalla el método de acoplamiento a utilizar en la resolución del problema, y sus diferentes parámetros específicos. También se detallan los parámetros necesarios en problemas de evolución.

En la sección [A.3](#) se describe como ejemplo la formulación utilizada en una de las aplicaciones analizadas en el [Capítulo 3](#).

A.2. Metodología de resolución

El archivo `src/couple_ddm.for` contiene la estructura principal del programa. El modelo de comunicación entre programas implementado es el de paso de mensajes entre programas que inicialmente han sido ejecutados en forma separada. Conforme a la estrategia de resolución descrita en el [Capítulo 2](#), se siguen los siguientes pasos:

1. Lectura de archivos de datos `mesh.cfg` y `couple.cfg`.
2. Inicialización de las funciones de MPI y publicación de puertos de conexión.
3. Establecimiento de la comunicación con los diferentes programas *esclavos*.
4. Envío de datos generales del problema a los programas *esclavos* para chequeo de compatibilidad de datos.
5. Ingreso en el bucle de evolución.
 - a) Envío de valores *guess* para las condiciones de borde de cada subdominio a cada programa *esclavo*.
 - b) Recepción de valores calculados para las incógnitas de cada subdominio de cada programa *esclavo*.
 - c) Resolución de las ecuaciones de residuos [1.6](#).
 - d) Evaluación de la convergencia:

- si los resultados están convergidos el problema puede continuar con el siguiente paso de evolución;
 - si los resultados no están convergidos, es necesario proponer nuevos valores *guess* y reiniciar el cálculo.
- e) Envío de orden de avance o de reinicio a cada programa *esclavo*.
6. Finalización del bucle de evolución.
7. Cierre de las conexiones con los programas *esclavos* y finalización.

Los pasos descriptos requieren una arquitectura de acoplamiento específica montada en los códigos *esclavos*, la cual fue comentada en la sección 2.4.

A.3. Ejemplo de uso

A continuación se comenta la formulación del problema analizado en la sección 3.2: *Análisis del segundo sistema de parada de un reactor de investigación*. Se definen dos subdominios: el primero es el subsistema tri-dimensional arreglo de válvulas y el segundo es el subsistema cero-dimensional del tanque del reactor y porción superior de la red hidráulica. Existe una única unión entre ambos subdominios, la *Unión 1*. Es necesario definir una numeración global de interfaces de acoplamiento. El subsistema tri-dimensional contiene la interfaz global *Interfaz 1* y el subsistema cero-dimensional contiene la interfaz global *Interfaz 2*. En cada interfaz existe un solo par de variables acopladas, el par *caudal-presión*. El caudal es impuesto como condición de borde *esencial* al *Subdominio 1* y la presión como condición de borde *natural* al *Subdominio 2*. La Figura A.1 resume las definiciones previas.

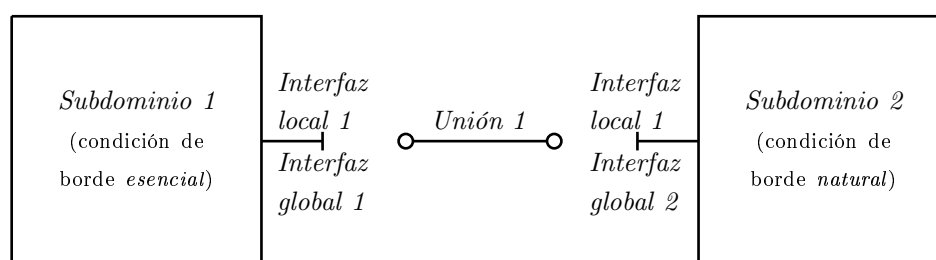


Figura A.1: Definición del problema de acoplamiento en el Segundo Sistema de Parada del reactor de investigación investigado en la sección 3.2.

Las siguientes líneas conforman el archivo de configuración `mesh.cfg`:

```
! Nombre del problema
*TITLE
manifold mockup OPAL
```

```

! Número de subdominios
*NUMBER_OF_COMPONENTS
2      ! Subdominio 3D y subdominio 0D

! Cantidad de interfaces en cada subdominio
*NUMBER_OF_COMPONENT_INTERFACES
1      ! Subdominio (1): 1 interfaz
1      ! Subdominio (2): 1 interfaz

! Uniones en cada componente
*CONNECTIVITY_BETWEEN_COMPONENT_INTERFACES
1 1    ! Subdominio (1); Interfaz local (1): Unión 1
2 1    ! Subdominio (2); Interfaz local (1): Unión 1

! Pares de variables en cada componente
*PAIR_VARIABLES_NUMBER_BY_COMPONENT_INTERFACE
1      ! Subdominio (1); interfaz local (1): 1 par
1      ! Subdominio (2); interfaz local (1): 1 par

! Componentes escalares en cada par de variables
*PAIR_VARIABLES_NUMBER_OF_COMPONENTS
1      ! Subdominio (1); interfaz (1); par (1): 1 componente escalar
1      ! Subdominio (2); interfaz (1); par (1): 1 componente escalar

! Tipo de condición de borde en cada par
*BOUNDARY_CONDITION_TYPE_BY_COMPONENT_PAIRS
1      ! Subdominio (1); interfaz (1); par (1): tipo Dirichlet (1)
-1     ! Subdominio (2); interfaz (1); par (1): tipo Neumann (-1)

! Cantidad de nodos en cada par de variables
*PAIR_VARIABLES_NUMBER_OF_NODES
1      ! Subdominio (1); interfaz (1); par (1): 1 nodo
1      ! Subdominio (2); interfaz (1); par (1): 1 nodo

! Finalización
*END

```

Las siguientes líneas en el archivo de configuración `couple.cfg` definen la metodo-

logía numérica de resolución:

```
! Parámetro de evolución inicial
*INITIAL_CONTINUATION_PARAMETER
0.0

! Parámetro de evolución final
*FINAL_CONTINUATION_PARAMETER
15.0

! Cantidad de pasos de evolución
*NUMBER_OF_CONTINUATION_STEPS
1500

! Maxima cantidad de iteraciones del método de acoplamiento en cada
paso
*MAXIMUM_NONLINEAR_ITERATIONS
800

! Método de acoplamiento
*NONLINEAR_SOLVER
2 ! Broyden

! Tolerancia absoluta en residuos de variables acopladas
*ABSOLUTE_TOLERANCE
1.0e-15

! Tolerancia relativa en residuos de variables acopladas
*TOLERANCE_NONLINEAR
1.0e-08

! Iteraciones lineales máximas en la resolución de sistemas
algebraicos definidos en métodos implícitos
*MAXIMUM_LINEAR_ITERATIONS
800

! Pasos entre las reinicializaciones de la matriz jacobiana
*JACOBIAN_INITIALIZATION
100
```

```
! Parámetro de perturbación en cálculo de la matriz jacobiana mediante
diferencias finitas
*JACOBIAN_PERTURBATION_PARAMETER
0.1

! Máxima cantidad de evaluaciones de funciones en cada paso
*MAXIMUM_FUNCTION_EVALUATIONS
10000

! Orden de extrapolación de variables incógnitas
*STATE_VARS_EXTRAPOLATION_ORDER
1

! Orden de extrapolación de matriz jacobiana
*JACOBIAN_EXTRAPOLATION_ORDER
0

! Finalización
*END
```


Apéndice B

Descripción del código maestro Newton

Newton es un código escrito en C++ desarrollado durante la maestría, publicado en **Github** [50] bajo Licencia Pública General (GPL por sus siglas en inglés, *Public General License*) del Proyecto GNU colaborativo de software libre. Fue diseñado como programa *maestro* con un propósito general, de forma que permita resolver cualquier tipo de ecuaciones acopladas, parcialmente resueltas por códigos *esclavos*. Algunos ejemplos de los problemas que pueden resolverse con **Newton** son los siguientes:

- Cálculos formulados con el Método de Descomposición Disjunta de Dominios: acoplamientos fluidodinámicos multiescala, con o sin transferencia de calor, como los presentados en las secciones 3.1, 3.2 y 3.3.
- Cálculos multifísicos: acoplamiento fluido-estructura, acoplamiento neutrónico-termohidráulico, como los presentados en la sección 3.4. También podrían pensarse modelos de núcleo completo (*full core models*), acoplando el comportamiento de los materiales a la dinámica neutrónica-termohidráulica y otros fenómenos de interés.

B.1. Principales características

Archivo de configuración

La ejecución de **Newton** requiere el archivo de configuración `newton.config` en el que debe detallarse la formulación del problema a resolver, la forma de comunicación con cada código *esclavo*, los mapeos utilizados, y métodos numéricos y demás parámetros asociados a la resolución del sistema 1.8. El formato de entrada fue pensado de forma tal que resulte simple e intuitivo al usuario. Las funciones implementadas en

la clase `Parser` se encargan de analizar las diferentes palabras claves ingresadas y sus atributos. Se desarrolló un manual de comandos de entrada [51].

Mapeos

En ciertas formulaciones las variables de acoplamiento pueden ser expresadas bajo transformaciones en las diferentes ecuaciones acopladas. Por ejemplo, en acoplamientos fluidodinámicos es común que en algunos modelos se calculen velocidades medias en interfaces de acople y que en otros modelos se calculen valores de caudales. En estos casos es necesario realizar mapeos *velocidad-caudal*. En otros tipos de problemas también es necesario realizar mapeos. En acoplamiento neutrónico-termohidráulico, por ejemplo, las variables de cálculo del programa termohidráulico podrían ser densidades y temperaturas, pero el programa neutrónico utiliza como variables secciones eficaces, que dependen de ellas. Además, las variables transformadas podrían ser condensadas o multiplicadas. Aquí podría pensarse un mapeo *termohidráulico-secciones eficaces*.

En general, los mapeos son transformaciones simples de las variables de acoplamiento, y pueden extraerse de la resolución de las ecuaciones parciales, definiendo ecuaciones extras que pueden ser resueltas por el programa *maestro*. Debido a esta generalización, es necesario definir cuál va a ser la variable acoplada utilizada para resolver el sistema de residuos 1.8. Diferentes mapeos pueden ser utilizados para diferentes códigos *esclavos*, ya sea para adecuar variables *guess* o variables calculadas. Su implementación requiere una mínima programación en funciones listas para ser utilizadas pertenecientes a la clase `Mapper`. Luego deben ser incluidos mediante palabras claves en el archivo de configuración `newton.config`.

Modelos de comunicación

Con la finalidad de poder establecer conexiones con programas *esclavos* cuyos códigos fuente no están disponibles, se incorporaron diferentes modos de comunicación, conforme a la estrategia descrita en el Capítulo 2:

- Comunicación por MPI entre programas ejecutados en simultáneo o entre programas ejecutados de manera independiente, cuando es posible acceder al código fuente.
- Comunicación por lectura y escritura de archivos con programas sin acceso al código fuente.

Todas estas funciones fueron implementadas en la clase `Communicator`. **Newton** puede ser ejecutado en múltiples procesos de modo que la conexión mediante manejo de archivos sea paralelizada. Las tareas se distribuyen automáticamente de forma eficiente conforme a la cantidad de procesos lanzados por el usuario.

Métodos numéricos

Newton puede resolver acoplamientos utilizando diferentes métodos numéricos:

- Métodos explícitos:
 - método *Picard* simple;
 - método *Picard* combinado.
- Métodos implícitos:
 - método de *Newton-Raphson*;
 - método de *Shamanskii*;
 - método de *Broyden*.

A futuro sería posible implementar otros métodos en la clase **Solver**. Los sistemas algebraicos resultantes en los métodos implícitos son resueltos mediante la biblioteca **PETSc** [52] altamente eficiente para este tipo de cálculos.

Manejo de errores

El manejo eficiente de errores fue pensado como una de las características principales durante el diseño del programa, debido a la complejidad de conexiones y consecuente diversidad en origen de fallas. Cualquier error generado comienza la siguiente cascada de eventos:

1. Devolución de un mensaje correspondiente en la salida estándar.
2. Comunicación del error a todos los procesos de **Newton**.
3. Envío de orden de aborto a los programas *esclavos* por parte del proceso *raiz*.
4. Finalización de las tareas.

Depuración

Se desarrolló un visualizador genérico en la clase **Debugger** para realizar seguimiento de la evolución de las variables pertenecientes a las diferentes clases implementadas. El usuario puede requerir su uso en clases específicas mediante palabras claves ingresadas en el archivo de configuración para la ejecución de **Newton**. **Debugger** va imprimiendo la salida requerida en archivos particulares para cada clase.

Validación

Las funciones implementadas y la metodología de cálculo fueron puestas a prueba exitosamente en la resolución de sistemas de ecuaciones lineales y no lineales acopladas. Las mismos pueden encontrarse dentro de la carpeta **examples** en el directorio principal de **Newton**. Se verificó el correcto funcionamiento de los diferentes tipos de comunicación, de las instancias de mapeos y de los distintos métodos numéricos implementados para la resolución del sistema de ecuaciones de residuos.

B.2. Modelado de problemas acoplados

Newton resuelve problemas que comprenden algún sistema de ecuaciones acopladas, en el que las ecuaciones son resueltas por separado por diferentes programas. Conforme a la estrategia de acoplamiento extendida comentada en la sección 3.4, es necesario definir qué variables van a ser datos y qué variables van a ser incógnitas para cada subsistema de análisis. Como existe la posibilidad de transformaciones previas o posteriores a la resolución del sistema de ecuaciones de residuos característico de cada problema, es necesario además definir en forma clara cuáles van a ser las variables transformadas y los mapeos. Para organizar esta formulación en forma clara **Newton** trabaja con cuatro instancias de variables para cada programa *esclavo*: las instancias α , β , γ y δ .

Alfas, betas, gammas y deltas

Existen cuatro instancias de variables para cada programa *esclavo*:

1. Instancia α : corresponde al valor crudo de las variables calculadas por el programa.
2. Instancia β : corresponde al valor transformado de las variables α . En el caso de que no se haya definido una transformación, se utiliza la transformación de identidad por defecto. Las variables β están listas para ser utilizadas en el cálculo de residuos.
3. Instancia γ : corresponde a los valores *guess* generados por **Newton** para ese programa.
4. Instancia δ : corresponde a los valores γ transformados, utilizando también la transformación de identidad por defecto.

La Figura B.1 esquematiza lo expresado.

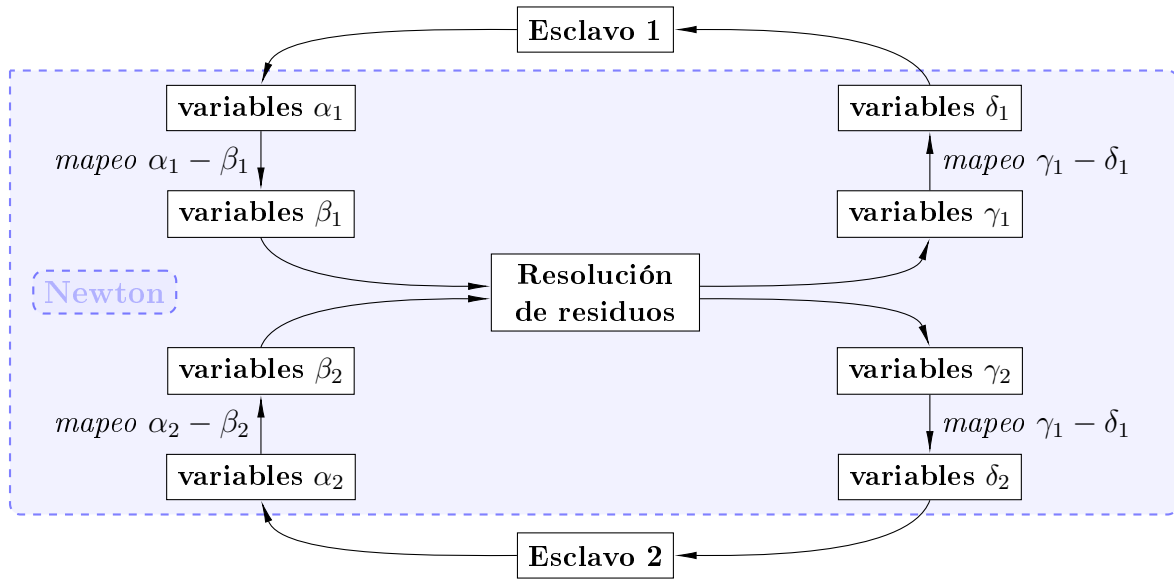


Figura B.1: Instancias de cálculo α , β , γ y δ de las variables relacionadas con cada programa esclavo. En este ejemplo los programas **Esclavo 1** y **Esclavo 2** se comunican con **Newton**.

Configuración del problema

Una vez definidas estas instancias para cada subsistema de análisis, debe completarse el archivo de configuración `newton.config`. En el mismo deben definirse *clientes*, que son los diferentes programas esclavos. Para cada *cliente* es necesario ingresar el nombre de las variables de instancia β después de la palabra clave **CALCS**, y de instancia γ después de la palabra clave **GUESSES**. En el caso de que no sean requeridos mapeos no debe especificarse nada sobre las instancias α y δ . Si se requieren transformaciones, éstas deben ser ingresadas en otra instancia del archivo, bajo la palabra clave **MAPPER**. Allí se detalla el *cliente*, si corresponde a una transformación $\alpha - \beta$ o a una transformación $\gamma - \delta$, y la cantidad de variables implicadas en la transformación.

Para cada *cliente* también es necesario ingresar el tipo de comunicación con **Newton**, y otras opciones de conexión en el caso de manejo de archivos.

Finalmente, es necesario definir el método de acoplamiento a utilizar y sus parámetros específicos.

B.3. Metodología de resolución

El archivo `src/main.cpp` contiene la estructura principal del programa. En el mismo se crea un objeto de clase **Newton** y se ejecutan sus tres funciones principales:

1. Función de inicio: `Newton::initialize`.
2. Función de ejecución: `Newton::run`.
3. Función de finalización: `Newton::finish`.

A continuación se describen brevemente las tareas desarrolladas en cada función.

Función de inicio

La función `Newton::initialize` ejecuta todas las tareas necesarias para comenzar el cálculo:

1. Creación de objetos de uso interno.
2. Lectura del archivo de configuración.
3. Creación de comunicadores con procesos *raíces* de programas ejecutados en simultáneo junto con `Newton`.
4. Publicación de puertos y establecimiento de conexiones con procesos *raíces* de programas que necesitan establecer comunicación por MPI.
5. Envío de datos generales del problema a los programas *esclavos* para chequeo de compatibilidad de datos.
6. Asignación de espacio en memoria a los arreglos de uso interno dependientes del problema.

Función de ejecución

La función `Newton::run` ejecuta todas las tareas necesarias para completar el cálculo:

1. Ingreso en el bucle de evolución.
 - a) Comunicación de valores *guess* para las condiciones de borde de cada subdominio a cada programa *esclavo*:
 - 1) escritura de los valores en archivos de entrada y ejecución de los programa *esclavos* conectados por manejo de archivos;
 - 2) envío de valores por MPI a aquellos programas conectados por paso de mensajes.
 - b) Recepción de valores calculados para las incógnitas de cada subdominio de cada programa *esclavo*:
 - 1) lectura de los valores en archivos de salida de los programa *esclavos* conectados por manejo de archivos;
 - 2) recepción de valores por MPI desde aquellos programas conectados por paso de mensajes.

- c) Resolución de las ecuaciones de residuos 1.6.
- d) Evaluación de la convergencia:
 - si los resultados están convergidos el problema puede continuar con el siguiente paso de evolución;
 - si los resultados no están convergidos, es necesario proponer nuevos valores *guess* y reiniciar el cálculo.
- e) Envío de orden de avance o de reinicio a cada programa *esclavo* conectado por MPI.

2. Finalización del bucle de evolución.

Función de finalización

La función `Newton::finish` ejecuta todas las tareas necesarias para terminar el programa de forma segura:

1. Desconexión de programas comunicados por MPI.
2. Liberación de comunicadores.
3. Finalización de **PETSc** y de MPI.
4. Cierre de archivos de depuración.

B.4. Ejemplo de uso

A continuación se comenta la resolución de uno de los problemas utilizados para la validación de las funciones desarrolladas. Se quiere resolver el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} 1w + 2x + 3y + 4z = 17 \\ 12w + 13x + 14y + 5z = 18 \\ 11w + 16x + 15y + 6z = 19 \\ 10w + 9x + 8y + 7z = 20 \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

Uno de los programas *esclavos* calcula (w, x, y) en función de algún valor z_{guess} proporcionado, y resuelve las primeras tres ecuaciones:

$$\begin{cases} w = (17 - 2x - 3y - 4z_{guess})/1 \\ x = (18 - 12w - 14y - 5z_{guess})/13 \\ y = (19 - 11w - 16x - 6z_{guess})/15 \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

El otro programa *esclavo* calcula z como función de los valores $(w_{guess}, x_{guess}, y_{guess})$ proporcionados, resolviendo la última ecuación de B.1:

$$z = (20 - 10w_{guess} - 9x_{guess} - 8y_{guess})/7 \quad (\text{B.3})$$

La solución analítica para este problema es la siguiente:

$$\begin{cases} w = -0,70909 \\ x = -1,89091 \\ y = 2,36364 \\ z = 3,60000 \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

Para formular este problema comunicando los programas por MPI, mediante una ejecución en modo MISD de **Newton** y los dos programas *esclavos*, el archivo de configuración `newton.config` se completa como sigue:

```
# Métodos numéricos

METHOD secant # Método seleccionado
ABS_TOL 1e-15 MAX_ITER 10 # Parámetros de iteración
X_INI w 1 x 2 y 3 z 4 # Semilla inicial

# Especificaciones para códigos esclavos

CLIENT linear1 # Apodo del primer programa esclavo
ROOT_GLOBAL_RANK 1 # Rango global del proceso raíz
CALCS w x y GUESSES z # Variables de cálculo y variables dato
CONNECTION mpi_comm # Tipo de conexión

CLIENT linear2 # Apodo del primer programa esclavo
ROOT_GLOBAL_RANK 2 # Rango global del proceso raíz
CALCS z GUESSES w x y # Variables de cálculo y variables dato
CONNECTION mpi_comm # Tipo de conexión
```

Notar que en este modo de ejecución **Newton** debe conocer cuál es la numeración global de los procesos raíces de los programas *esclavos* para poder establecer los comunicadores con ellos. Con el método de resolución seleccionado, **Newton** construye la matriz jacobiana del sistema y luego converge a la solución B.4 en una sola iteración, utilizando en total 6 evaluaciones de funciones.

Apéndice C

Acoplamiento de Par-GPFEP

Par-GPFEP (programa de elementos finitos de propósito general paralelizado, el nombre se debe a sus siglas en inglés) es un código escrito en **Fortran 90** y en **C**, desarrollado inicialmente por G. Buscaglia, S. Felicelli, E. Dari, A. Lew y M. Raschi, y que ha ido teniendo contribuciones a partir de diferentes trabajos y tesis realizadas en el Departamento de Mecánica Computacional de la Comisión Nacional de Energía Atómica ([20], [21]).

En el presente trabajo se trabajó con las rutinas relacionadas con el bucle de resolución general y el ensamblaje de matrices para las ecuaciones de *Navier-Stokes*, de modelos de turbulencia, flujo multifase y transporte de energía. Además, se implementaron las rutinas necesarias para realizar el acoplamiento mediante el modelo de comunicación por paso de mensajes a partir de la conexión a puertos publicados por el código *maestro*, de modo que pudiera comunicarse con **Coupling** y con **Newton** de forma exitosa. Estos trabajos son comentados en la sección C.1. También se desarrolló un programa para la identificación de condiciones de borde sobre conjuntos de nodos específicos, el cual es comentado en la sección C.2.

C.1. Implementación de la arquitectura de acoplamiento en Par-GPFEP

La estructura principal de acoplamiento se compone de cuatro instancias genéricas. Estas cuatro instancias fueron descriptas en la sección 2.4 y se programaron en la rutina `pargpfep_control.for`. Cada una de estas instancias es llamada desde el bucle de resolución general en momentos adecuados. Pero para que este acoplamiento resultara exitoso, fue necesario además implementar una serie de funciones extra:

- Análisis de palabras clave del archivo de configuración `gpfep.cfg` específicas a la formulación del problema de acoplamiento (implementado en el archivo `cfgreadingCoup.for`).

- Seteo paralelizado de variables sobre grupos de superficie conforme a perfiles previstos:
 - para condiciones de borde *esenciales* (modificaciones en el archivo `bcfemco.for`);
 - para condiciones de borde *naturales* (modificaciones en el archivo `nssurf.for`);
- Cálculo integral paralelizado de variables sobre grupos de superficie (implementado en el archivo `sendValuesCoupling.for`).
- Cálculo de campos vectoriales gradientes a partir de campos escalares (modificaciones en el archivo `gpmain.F`).
- Condicionamiento sobre el avance evolutivo para respetar las órdenes de reinicio o continuación recibidas desde programa *maestro* (modificaciones en el archivo `gpmain.F`).
- Resguardo (*back-up*) de las soluciones calculadas debido a la posibilidad de reinicio en determinados pasos de cálculo (modificaciones en el archivo `gpmain.F`).

C.2. El programa `genbco`

Normalmente, las condiciones de borde de tipo *Dirichlet* se establecen con los programas `genbcc` y `gpboco`. Estos programas imponen para alguna variable dada, el mismo valor a todos los nodos que pertenecen a un grupo de superficie seleccionado. Durante el trabajo realizado, resultó necesario diferenciar los nodos sobre los que se aplicaba las condiciones de borde. Por ejemplo, era necesario sustraer los nodos de las aristas a los nodos de una cara, englobar varias aristas en un mismo grupo, englobar varias caras en un mismo grupo, etc. Con estos fines fue desarrollado el código `genbco`. `genbco` unifica las funciones previamente desempeñadas por los códigos `genbcc` y `gpboco`. Los archivos de entrada necesarios para su uso son el archivo de nodos de superficie y conectividades `.sur` específico de **Par-GPFEP** y el archivo de configuración `genbco.cfg`. En `genbco.cfg` se especifican los conjuntos de nodos sobre los que se desea imponer condiciones de borde de tipo *Dirichlet* para cada variable de cálculo. Esta especificación se realiza a partir de operaciones *booleanas* sobre los grupos originales de superficie. Las operaciones permitidas son:

- unión (U);
- intersección (I);
- sustracción (m).

Sobre cada uno de los conjuntos se especifican, además, los valores iniciales de contorno. El archivo de salida `gp.bco` contiene una lista con todos los nodos y sus condiciones de borde para cada variable y está listo para ser leído posteriormente por **Par-GPFEP**.

C.3. Ejemplo de uso de **Par-GPFEP** en forma acoplada

A continuación se comentan las consideraciones necesarias en **Par-GPFEP** para la resolución del problema *Análisis del segundo sistema de parada de un reactor de investigación* analizado en 3.2.

En primer lugar, es necesario notificar en el archivo de configuración `gpfep.cfg` que las condiciones de borde de algunas interfaces están acopladas. El llamado a las funciones de acoplamiento se activa con la siguiente bandera:

```
! Switch para acople
*COUPLING_SWITCH
1
```

El método de comunicación utilizado es el de conexión a puertos previamente publicados por el programa *maestro*. En este método es necesario definir un código de identificación para cada programa *esclavo*:

```
! ID del código
*CODE_ID
1
```

Las siguientes tarjetas se utilizan para definir las interfaces y las variables de acople:

```
! Cantidad de interfaces de acople
*INTERFACES
1

! Área [m2] de cada interfaz
*INTERFACES_AREAS
0.05067

! Grupo de la malla correspondiente a cada interfaz
*INTERFACES_GROUPS
3
```

```

! Pares de variables en cada interfaz
*UNKNOWN_PAIRS_PER_INTERFACE
1

! Tipo de par intercambiado en cada interfaz:
! (Tipo 1: caudal-presión; Tipo 2: temperatura-flujo de calor)
*INTERFACES_PAIRS_TYPES
1

```

A continuación es necesario definir el tipo de perfil que va a ser utilizado para calcular los vectores de velocidades en cada interfaz con condición de borde de tipo *Dirichlet*.

```

! Tipo de perfil de velocidades para la componente x, componente y,
! componente z, en cada interfaz con seteo de caudal
! (Tipo 0: nulo; Tipo 1: uniforme; Tipo 2: parabólico 2D; Tipo 3:
! parabólico 3D )
*FLOW_PROFILES
1 ! Cantidad de perfiles
1 0 0 ! Tipo para cada componente escalar (x,y,z)

```

Si bien en el modelado del problema se utiliza un perfil de velocidades plano, en ciertas ocasiones puede requerirse el uso de perfiles parabólicos. Para calcular estos perfiles es necesario proveer algunas coordenadas de referencia. Si se hubiera utilizado un perfil parabólico tri-dimensional, y dado que la sección es circular, debe proveerse la posición del centro de la misma y el valor de su radio del siguiente modo:

```

! Coordenadas del punto de referencia de cada interfaz con seteo de
! caudal
*INTERFACES_REFERENCES
0.0 0.0 0.0

! Radio en cada interfaz con seteo de caudal
*INTERFACES_RADIUS
0.127

```

Previo al modelado de futuros problemas acoplados, debe verificarse la implementación de ciertas particularidades bajo la palabra clave **USUARIO** en los archivos comentados en la sección C.1. Por ejemplo, cuando la variable de acople en una interfaz dada es una fuerza, ésta puede recibirse con diferentes signos según la formulación del problema, por lo que es responsabilidad del usuario su correcto uso.

Bibliografía

- [1] Leiva, J., Buscaglia, G. Estrategias de acoplamiento entre códigos 0d/1d and códigos cfd 3d. *Mecánica Computacional*, **XXV**, 53–82, 2006.
- [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.
- [3] Leiva, J., Blanco, P., Buscaglia, G. C. Partitioned analysis for dimensionally-heterogeneous hydraulic networks. *Multiscale Model. Simul.*, **9**, 872–903, 2011.
- [4] Quarteroni, A. Introduction to domain decomposition methods. *6th Summer School in Analysis and Applied Mathematics*, 2011.
- [5] Caccia, F., Dari, E. A. Acoplamiento multiescala en cálculos fluidodinámicos. *Mecánica Computacional*, **XXXIV**, 1955–1972, 2016.
- [6] Leiva, J., Blanco, P. J., Buscaglia, G. Iterative strong coupling of dimensionally heterogeneous models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **81**, 1558–1580, 2009.
- [7] Broyden, C. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations. *American Mathematical Society*, **19**, 577–593, 1965.
- [8] Dennis, J., Shnabel, R. Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations. Society for industrial and applied mathematics, 1996.
- [9] Kelley, C. Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations. siam, 1995.
- [10] Hendrickson, B., Devine, K. Dynamic load balancing in computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, págs. 485–500, 2000.
- [11] Calviño, B. Estrategias de descomposición en dominios para entornos grid. *Tesis Doctoral, Universidad Politécnica de Cataluña*, 2007.
- [12] Newton: a multiphysics coupling master code. *Repositorio GitHub: <https://github.com/fedecaccia/newton>*, 2017.

- [13] Buscaglia, G., Dari, E., Martín, E., Arnica, D., Bonetto, F. Finite element modeling of liquid deuterium flow and heat transfer in a cold-neutron source. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, **18**, 355–365, 2004.
- [14] Gunzburger, M. Finite Element Methods for Viscous Incompressible FLOws. 1989.
- [15] Kays, W., Crawford, M. Convective Heat and Mass Transfer, 3rd Edition. 1993.
- [16] Fries, T., Matthies, H.-G. A Review of Petrov-Galerkin Stabilization Approaches and an Extension to MeshFree Methods. 2004.
- [17] Codina, R. Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **156**, 185–210, 1998.
- [18] Hughes, T., Franca, L., Balestra, M. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: V. circumventing the babuška-brezzi condition: a stable petrov-galerkin formulation of the stokes problem accomodating equal-order interpolations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **59**, 85–99, 1986.
- [19] Geuzaine, C., Remacle, J. Gmsh reference manual, 2016.
- [20] Buscaglia, G., Felicelli, S. Un sistema de generación de programas de elementos finitos. *Documentación: Versión 1.1*, 1995.
- [21] Buscaglia, G., Dari, E., Lew, A., Raschi, M. Un programa general de elementos finitos en paralelo. *Mecánica Computacional*, págs. 845–854, 1999.
- [22] Iedelchik, I. Handbook of Local Resistance and Friction. 1960.
- [23] Buscaglia, G., Dari, E. Numerical investigation of flow through a cavity with internal heat generation. *Numerical Heat Transfer*, págs. 525–541, 2003.
- [24] Brollo, F., Blaumann, H., Vertullo, A., Corcuera, R., Parkansky, D., Ramirez, P., et al. Descripción general del reactor ra-10. *Informe técnico CNEA IT-40/RA-10/0000-1-002-0*, 2015.
- [25] Rechiman, L., Cantero, M., Dari, E. Modelo del segundo sistema de parada del reactor ra-10 para análisis hidrodinámico computacional. *Informe técnico CNEA IN-ATN40MC-01/2015*, 2015.
- [26] Rechiman, L., Chacoma, A., Cantero, M., Dari, E. Modelo multiescala del *mockup* del segundo sistema de parada del reactor ra-10. *Informe técnico CNEA IN-ATN40MC-02/2015*, 2015.

- [27] Rechiman, L., Cantero, M., Dari, E., Caccia, F., Chacoma, A. Análisis hidrodinámico del segundo sistema de parada del reactor ra-10. *Informe técnico CNEA IN-ATN40MC-04/2015*, 2015.
- [28] Rechiman, L., Cantero, M., Caccia, F., Dari, E., Chacoma, A. Three-dimensional hydrodynamic modeling of the second shutdown system of an experimental nuclear reactor. *Nuclear Engineering and Design*, **319**, 163–175, 2017.
- [29] Rechiman, L., Cantero, M., Caccia, F., Dari, E. Validation of a multiscale model of the sencond shutdown system of an experimental nuclear reactor. *Mecánica Computacional*, **XXXIV**, 2199–2215, 2016.
- [30] Invap. Segundo sistema de parada - validación del cfd para drenaje del tanque reflector, 2013.
- [31] Bird, R., Stewart, W., Lightfoot, E. Transport Phenomena, 2nd Edition. 2002.
- [32] CEA/DEN, E. R., CASCADE, O. Salome version 7.8.0: Public release announcement, 2016.
- [33] Lew, A., Buscaglia, G., Carrica, P. A note on the numerical treatment of the k-epsilon turbulence model. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 2001.
- [34] Durbin, P., Reif, B. P. Statistic Theory and Modeling for Turbulent Flows. 2011.
- [35] Mohammadi, B., Pironneau, O. Analysis of the k-epsilon turbulence model. 1994.
- [36] Lew, A. El método de elementos finitos en entornos computacionales de alta performance. *Trabajo Especial Carrera de Ingeniería Nuclear, Instituto Balseiro*, págs. 57–64, 1998.
- [37] Osher, S., Fedkiw, R. Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces. 2003.
- [38] Ausas, R., Buscaglia, G., Idelsohn, S. A new enrichment space for the treatment of discontinuous pressures in multi-fluid flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2011.
- [39] White, F. Fluid Mechanics, 4th edition. Mc Graw Hill Education, 1998.
- [40] Griewank, A. Broyden Updating, the Good and the Bad! 2000.
- [41] Henry, A. Nuclear-reactor analysis. MIT press Cambridge, 1975.
- [42] Lamarsh, J. Introduction to NUCLEAR REACTOR THEORY. Addison Wesley publishing company, 1996.

- [43] RELAP5/MOD3.3 CODE MANUAL VOLUME I: CODE STRUCTURE, SYSTEM MODELS, AND SOLUTION METHODS. Idaho National Laboratory, 2001.
- [44] Breitembücher, A., Etchepareborda, A., Hosid, A., Lema, F. Acople neutrónico-termohidráulico entre pumita y relap5 para la simulación de transitorios del reactor carem-25.
- [45] Fermi: a core nuclear code. *Repositorio GitHub*: <https://github.com/gg1991/fermi>, 2017.
- [46] Delmastro, D., Gómez, S., Mazzi, R., de Soler, S. G., Santecchia, A., Ishida, V. Características generales del reactor carem-25. *XXVII Reunión Anual de la Asociación Argentina de Tecnología Nuclear (AATN)*, Buenos Aires, 2010.
- [47] Grant, C. Manual del sistema "puma" versión 6. *Comisión Nacional de Energía Atómica*, 2010.
- [48] Caccia, F. A. Tema: Análisis de evento de pérdida de sumidero de energía (lohs) en un reactor autopresurizado integrado mediante un modelo detallado con código relap5. *Monografía de modelado de sistemas termohidráulicos en reactores mediante códigos de planta*, 2016.
- [49] Griewank, A. Automatic Differentiation. Princeton Companion to Applied Mathematics, Nicolas Higham Ed., Princeton University Press, 2014.
- [50] GitHub, Inc. Plataforma de desarrollo colaborativo. <https://github.com>, 2008.
- [51] Newton: a multiphysics coupling master code user's manual. *Repositorio GitHub*: <https://github.com/fedecaccia/newton/doc/newton-u-m.pdf>, 2017.
- [52] Balay, S., Abhyankar, S., Adams, M. F., Brown, J., Brune, P., Buschelman, K., et al. PETSc Web page. <http://www.mcs.anl.gov/petsc>, 2016. URL <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.

Publicaciones asociadas

- Informes técnicos en Comisión Nacional de Energía Atómica:
 - 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-04/2015 Mayo de 2015, Bariloche, Argentina.
- Publicaciones en revistas internacionales:
 - 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.
- Presentaciones en congresos con publicación en actas:
 - Caccia, F. and Dari, E. “Acoplamiento multiescala en cálculos fluidodinámicos”. Mecánica Computacional, vol XXXIV, págs 1955-1972.
 - Rechiman, L.; Chacoma, A.; Caccia, F.; Dari E. and Cantero, M. "Validation of a multiscale model of the second shutdown system of an experimental nuclear reactor" ("Validación del modelo multiescala del segundo sistema de parada del reactor nuclear experimental RA-10"). Mecánica Computacional, vol XXXIV, págs 2199-2215.

