

TESIS CARRERA DE MAESTRÍA EN INGENIERÍA

**ACOPLAMIENTO MULTIESCALA EN CÁLCULOS  
FLUIDODINÁMICOS**

**Ing. Federico Agustín Caccia**  
**Maestrando**

**Dr. Enzo Dari**  
Director

**Miembros del Jurado**

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

31 de Julio de 2017

Departamento de Mecánica Computacional – Centro Atómico  
Bariloche

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



# Índice de símbolos

**CFD:** Fluidodinámica Computacional (*Computational Fluid Dynamics*)

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

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

**GPL:** Licencia Pública General (*Public General License*)

**MIMD:** Múltiples Instrucciones, Múltiples Datos (*Multiple Instruction, Multiple Data*)

**MISD:** Múltiples Instrucciones, Un Dato (*Multiple Instruction, Single Data*)

**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*)

**SIMD:** Una Instrucción, Múltiples Datos (*Single Instruction, Multiple Data*)

**SISD:** Una Instrucción, Un Dato (*Single Instruction, Single Data*)

**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
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación . . . . .	1
1.2. Abordaje del modelado . . . . .	2
1.3. Objetivos y estructura de trabajo . . . . .	9
<b>2. Estrategia de acoplamiento</b>	<b>11</b>
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 códigos <i>esclavos</i> comunicados por paso de mensajes . . . . .	16
<b>3. Ejemplos de aplicación</b>	<b>21</b>
3.1. Movimiento por fuerza boyante en un circuito cerrado . . . . .	21
3.2. Análisis del segundo sistema de parada de un reactor de investigación .	28
3.3. Resolución de redes hidráulicas de múltiples componentes . . . . .	40
3.4. Extensión a problemas acoplados en modelos de núcleo . . . . .	46
<b>4. Conclusiones</b>	<b>55</b>

<b>A. Descripción del código maestro Coupling</b>	<b>57</b>
A.1. Modelado de problemas acoplados . . . . .	57
A.2. Metodología de resolución . . . . .	58
A.3. Ejemplo de uso . . . . .	59
<b>B. Descripción del código maestro Newton</b>	<b>63</b>
B.1. Principales características . . . . .	63
B.2. Modelado de problemas acoplados . . . . .	66
B.3. Metodología de resolución . . . . .	67
B.4. Ejemplo de uso . . . . .	69
<b>C. Acoplamiento de Par-GPFEP</b>	<b>71</b>
C.1. Implementación de la arquitectura de acoplamiento en <b>Par-GPFEP</b> .	71
C.2. El programa <b>genbco</b> . . . . .	72
C.3. Ejemplo de uso de <b>Par-GPFEP</b> en forma acoplada . . . . .	73
<b>Bibliografía</b>	<b>75</b>
<b>Publicaciones asociadas</b>	<b>79</b>

# Índice de figuras

1.1. Esquema 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 . . . . .	15
2.2. Esquema de acoplamiento entre programas implementado . . . . .	19
3.1. Modelo de la fuente fría compuesto por un subsistemas cero-dimensional y otro subsistema bi-dimensional. . . . .	22
3.4. Evolución en el transitorio inicial del fluido dentro de la cavidad bidimensional con fuente interna . . . . .	26
3.7. Evolución hacia el estado estacionario del fluido dentro de la cavidad bidimensional con fuente interna . . . . .	26
3.8. 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. . . . .	27
3.9. Esquema del segundo sistema de parada del reactor RA10. . . . .	28
3.10. Evolución de la presión y del caudal volumétrico en la interfaz de acople . . . . .	33
3.11. Evolución del nivel de líquido en el <i>mockup</i> del tanque del reflector del reactor OPAL ante accionamiento del SSP . . . . .	34
3.12. 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 . . . . .	35
3.13. Evolución del nivel de líquido en el <i>mockup</i> del tanque del reflector del reactor OPAL ante accionamiento del SSP . . . . .	36
3.14. 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 . . . . .	37
3.15. Evaluación de diferentes métodos numéricos no lineales en el problema del vaciado del tanque reflector del <i>mockup</i> del reactor OPAL . . . . .	38

3.16. Eficiencia para diferentes esquemas de extrapolación en la generación de semillas . . . . .	40
3.17. Descomposición disjunta de dominios en el modelado de redes hidráulicas	42
3.18. Comparación de diferentes métodos numéricos para la resolución de sistemas de redes hidráulicas . . . . .	43
3.19. Comparación de diferentes esquemas <i>quasi-Newton</i> para la resolución de sistemas de redes hidráulicas con regímenes de flujo laminar . . . . .	44
3.20. Comparación de diferentes métodos numéricos para la resolución de sistemas de redes hidráulicas con regímenes de flujo turbulento . . . . .	45
3.21. Núcleo simple en análisis de acoplamiento neutrónico-termohidráulico utilizando <i>RELAP5</i> y <i>Fermi</i> . . . . .	50
3.22. Instancias de cálculo de las variables relacionadas con cada programa <i>esclavo</i> . . . . .	52
3.23. Núcleo simple en análisis de acoplamiento neutrónico-termohidráulico utilizando <i>RELAP5</i> y <i>Fermi</i> . . . . .	53
3.24. Esquema del núcleo del reactor CAREM en corte axial . . . . .	53
A.1. Definición del problema de acoplamiento en el SSP de un reactor de investigación . . . . .	59
B.1. Instancias de cálculo de las variables relacionadas con cada programa <i>esclavo</i> . . . . .	67



# Índice de tablas

3.1. Parámetros del subsistema del tanque del reflector con acople de sección de red hidráulica . . . . .	31
--------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----



# 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 neutron-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 el problema general para analizar cada subsistema por separado mediante condiciones de borde dinámicas. Como referencia a este enfoque se citan los trabajos desarrollados por J. S. Leiva y G. C. Buscaglia (2006) [1], P.J. Blanco et al. (2010) [2] y J. S. Leiva et al. (2011) [3].

## 1.2. Abordaje del modelado

### Desglosado del sistema original en subsistemas acoplados

Dado un sistema  $S$  en un dominio  $\Omega$  con borde  $\Gamma$ , 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  $\Gamma$ , ahora se imponen sobre cada fragmento de la curva. La Figura 1.1 presenta el esquema propuesto. La notación utilizada es la siguiente:

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

En principio, existen tantas incógnitas como 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 continuidad<sup>1</sup> 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  $(F_m)_i^l$  las relaciones funcionales que calculan el valor de las incógnitas  $(x_m)_{S_i}^{I_l}$  en la interfaz  $l$  del subsistema  $i$ , a partir del valor de otras incógnitas y de los datos de contorno sobre la frontera exterior  $\Gamma_i$ . Se tiene que:

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

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

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



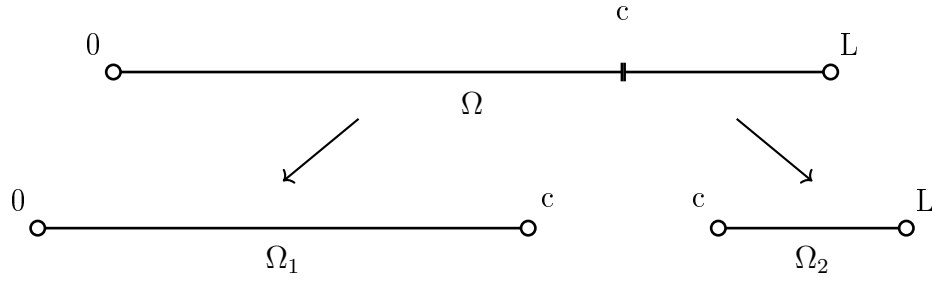


**Figura 1.1:** Esquema de subsistemas de estudio relacionados mediante condiciones de borde dinámicas en interfaces de acoplamiento.

donde  $(\alpha_i(\Gamma_i))$  representa las condiciones de borde impuestas sobre la curva  $\Gamma_i$ . Estas relaciones, 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 en la misma interfaz, la relación funcional recibe el nombre de operador *Steklov-Poincaré*. En matemática, el operador *Steklov-Poincaré* mapea el valor de una condición de borde de una PDE elíptica en un dominio al valor de otra condición de borde (por ejemplo, una condición de borde de tipo *Dirichlet* en una condición de borde de tipo *Neumann*). Usualmente, cualquiera de las dos condiciones determinan la solución.

## Estrategia de resolución

A continuación se propone un ejemplo didáctico para comprender las estrategias de acoplamiento posteriormente comentadas. Se desea resolver un problema de cálculo de



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

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:

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

El dominio original  $[0, L]$  es particionado en los subdominios  $[0, c]$  y  $[c, L]$  (ver Figura 1.2). Se va a resolver la ecuación 1.3 en cada uno de ellos, pero la condición de borde *Dirichlet* ahora solo aplica 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 del método empleado 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. Si se decidiera, por ejemplo, comenzar con el subsistema de la izquierda, luego es necesario decidir qué tipo de condición de borde se le va a aplicar. Estas primeras decisiones son arbitrarias. Si se decide imponer una temperatura (condición *Dirichlet*) al borde del primer subsistema, luego de realizar el cálculo de temperaturas quedaría definido un flujo calórico a través de su interfaz de conexión con el segundo subsistema. 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 supuesto 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  $\mathcal{L}$  es el operador que mapea condiciones de borde de tipo *Dirichlet* en condiciones de borde de tipo *Neumann*,  $(T_{guess})_{S_1}$  es la temperatura que fue impuesta como

condición de borde en el primer subsistema y  $(q''_{calc})_{S_1}$  es el flujo calórico 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 una temperatura en la interfaz de acople, mediante el segundo operador *Steklov-Poincaré* definido:

$$(T_{calc})_{S_2} = \mathcal{D}_2((q''_{calc})_{S_1}) \quad (1.5)$$

donde  $\mathcal{D}$  es el operador que mapea condiciones de borde de tipo *Neumann* en condiciones de borde de tipo *Dirichlet*, y  $(T_{calc})_{S_2}$  es la temperatura calculada. Si  $(T_{calc})_{S_2}$  coincide con  $(T_{guess})_{S_1}$ , los resultados están convergidos y entonces finaliza el cálculo. En caso contrario, el proceso debe repetirse, pero ahora se impone  $T_2$  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]).

Existe una forma alternativa de resolver el acoplamiento, y es mediante una técnica implícita. Esta técnica es una metodología iterativa, y consiste en la evaluación de residuos sucesivos contruidos por diferencia entre valores propuestos y valores calculados. En primera instancia se propone un valor *guess* para todas las incógnitas  $(x_{m,guess})_{S_i}^{I_i}$ . Estos valores deben respetar las relaciones de continuidad 1.1. En segunda instancia se decide arbitrariamente qué tipos de condiciones de borde va a recibir cada interfaz de cada subsistema, definiendo problemas parciales bien planteados. En el ejemplo analizado, sería posible definir condiciones de borde de tipo *Dirichlet* en ambos subsistemas. En función de esta decisión, se toman los valores correspondientes del vector  $\bar{x}_{guess}$  y se establecen como datos para cada problema parcial. Una vez resuelto el problema en cada subdominio, se calcula el valor de las variables que no fueron tomadas como

dato en las interfaces de acople. En el ejemplo, si se había establecido un valor de temperatura como condición de borde de tipo *Dirichlet* en ambas interfaces, se calcula entonces el valor del flujo de calor en la misma interfaz para cada subsistema, mediante los operadores de *Steklov-Poincaré*  $\mathcal{N}_1$  y  $\mathcal{N}_2$ :

$$\begin{cases} (q''_{calc})_{S_1} = \mathcal{N}_1((T_{guess})_{S_1}) \\ (q''_{calc})_{S_2} = \mathcal{N}_2((T_{guess})_{S_2}) \end{cases} \quad (1.6)$$

Al hacer esto se están resolviendo las ecuaciones 1.2, obteniéndose los valores  $(x_{m,calc})_{S_i}^{I_l}$ . Finalmente, se computan las diferencias entre los valores *guess* y los valores calculados, obteniendo los residuos  $(r_m)_i^l$ :

$$(r_m)_i^l = (x_{m,guess})_{S_i}^{I_l} - (x_{m,calc})_{S_i}^{I_l} \quad (1.7)$$

donde  $m$  es el índice de incógnita,  $l$  de la interfaz e  $i$  del subsistema. En el ejemplo, las ecuaciones de residuos quedarían:

$$\begin{cases} (r_{q''})_{S_1}^1 = (q''_{guess})_{S_1} - (q''_{calc})_{S_1} \\ (r_{q''})_{S_2}^1 = (q''_{guess})_{S_2} - (q''_{calc})_{S_2} \end{cases} \quad (1.8)$$

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

$$\bar{r} = \bar{0} \quad (1.9)$$

donde  $\bar{r}$  es el vector de residuos de las ecuaciones. Comúnmente en la primera iteración esto no sucede, y por lo tanto es necesario repetir el proceso sucesivas veces hasta obtener convergencia. En general los sistemas acoplados se modelan con sistemas de ecuaciones no lineales y por ello se investigan distintos métodos numéricos para la resolución de 1.9.

## Métodos numéricos para la resolución de sistemas de ecuaciones de residuos

Existen diferentes métodos numéricos para hallar las raíces del sistema de ecuaciones 1.9. 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:

$$\bar{r}(\bar{x}_{n+1}) = \bar{r}(\bar{x}_n) + \nabla \bar{r}(\bar{x}_n)(\bar{x}_{n+1} - \bar{x}_n) \quad (1.10)$$

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 1.10 y operando algebraicamente se llega a la siguiente expresión:

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

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

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

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:

$$J_{ij} \approx \frac{r_i(\bar{x}_j + \Delta \bar{x}_j) - r_i(\bar{x}_j)}{\|\Delta \bar{x}_j\|} \quad (1.13)$$

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 esa 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 requeriría excesivos recursos de cálculo.

Una forma alternativa y elegante de resolver el sistema de ecuaciones planteado en 1.9 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  $\mathbb{B}_{n-1}$ :

$$\mathbb{B}_n = \mathbb{B}_{n-1} + \frac{\Delta \bar{r}_n - \mathbb{B}_{n-1} \Delta \bar{x}_n}{\|\Delta \bar{x}_n\|^2} \Delta \bar{x}_n^T \quad (1.14)$$

donde  $\Delta \bar{r}_n = \bar{r}_n - \bar{r}_{n-1}$  y  $\Delta \bar{x}_n = x_n - \bar{x}_{n-1}$ . 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*. 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 1.9. 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.

Notar que los métodos presentados en el presente apartado resuelven el sistema de ecuaciones 1.9 de forma monolítica, y es por este motivo que permiten incluir estrategias para la selección de condiciones de borde prohibidas al método *Dirichlet-to-Neumann*. Podría pensarse que el método *Dirichlet-to-Neumann* resuelve un sistema de ecuaciones similar pero solo para ciertas estrategias de condiciones de borde y en forma segregada, actualizando los valores de las variables a medida que avanza en el cálculo. En este caso, los residuos se definirían como la diferencia entre el valor de las variables calculadas en dos iteraciones consecutivas. Para el ejemplo de cálculo de temperaturas analizado en este capítulo, si se comenzara resolviendo el subsistema izquierdo, en la iteración  $n$  el sistema de ecuaciones a resolver quedaría:

$$\begin{cases} (r_{q''})_{S_1}^1 &= (q''_{calc,n})_{S_1} - (q''_{calc,n-1})_{S_1} &= \mathcal{N}((T_{calc,n-1})_{S_2}) - (q''_{calc,n-1})_{S_1} \\ (r_T)_{S_2}^1 &= (T_{calc,n})_{S_2} - (T_{calc,n-1})_{S_2} &= \mathcal{D}\left((q''_{calc,n})_{S_1}\right) - (T_{calc,n-1})_{S_2} \end{cases} \quad (1.15)$$

donde se ha supuesto que  $(T_{guess,n})_{S_1} = (T_{calc,n-1})_{S_2}$ , y que  $(q''_{guess,n})_{S_2} = (q''_{calc,n})_{S_1}$ , empleando las relaciones de continuidad 1.1.

## Problemas de evolución

En problemas de evolución la estrategia es permitir que cada subsistema avance por separado acoplando sus resultados mediante las ecuaciones 1.9 solo cada ciertos pasos. Esto se permite porque cada subsistema podría requerir subpasos de evolución

diferentes<sup>2</sup>. 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:

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

La estructura de la tesis es detallada a continuación. En el presente capítulo se han planteado las ecuaciones que surgen al dividir sistemas complejos mediante interfaces con condiciones de borde dinámicas, y se han presentado alternativas numéricas para la resolución de las mismas. En el Capítulo 2 se describe la estrategia 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 fluido cerrado gobernado por fuerzas naturales, que 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 Segundo Sistema de Parada (SSP). Se abordan distintos modelos multi-escala del mismo, para estudiar el detalle fluido tridimensional en un componente del sistema, acoplando con condiciones de borde dinámicas a modelos cero-dimensionales que representan 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

---

<sup>2</sup> 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.

neutrónico-termohidráulico.



# Capítulo 2

## Estrategia de acoplamiento

*“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 1.7. En base a estos residuos propone<sup>1</sup> 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 distribuida. Incluso podrían lanzarse diferentes procesos del código *maestro* en la resolución de algún problema. Debido a la complejidad en destinatarios de mensajes,

---

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

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 paralelizada<sup>2</sup>. 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 modos de comunicación implementados son los siguientes:

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

En ambos casos los programas esclavos se comunican solo con el programa maestro. Si bien estos tipo de comunicaciones remotas 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, *Message Passing Interface*). MPI es una especificación de paso de mensajes aceptada como estándar por todos los fabricantes de computadores. El objetivo principal de MPI es proporcionar un estándar para escribir programas (lenguajes C, C++, *texttt*) con paso de mensajes. De esta forma,

---

<sup>2</sup> 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* se podría tener cierta experiencia en su modo de ejecución óptimo para alguna tarea dada. Esta ejecución podría requerir múltiples nodos en un clúster, por ejemplo.

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 en uno (SISD por sus siglas en inglés, Single Instruction, Single Data) o múltiples procesos (SIMD por sus siglas en inglés, Single Instruction, Multiple Data). El código *maestro* publica una serie de puertos a los cuales cada código *esclavo* puede conectarse<sup>3</sup>. 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 al mismo tiempo en uno (MISD por sus siglas en inglés, Multiple Instruction, Single Data) o varios procesos (MIMD por sus siglas en inglés, Multiple Instruction, Multiple Data). 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* administradas desde el código *maestro*. Para ello 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. En problemas de evolución, el código *maestro* debe notificar en el archivo de entrada el parámetro de evolución, así como otros valores de variables de estado del paso previo, ya que cada corrida del código *esclavo* solo vive para realizar un cálculo entre dos pasos de evolución acoplados.

La ejecución de programas *esclavos* se implementó de dos formas alternativas. La primera forma es mediante el uso de la función *system* de la librería de *c*. Esta función deja al proceso que la ejecuta en pausa hasta que el programa *esclavo* finaliza, cuando ella retorna algún mensaje de error o de éxito. La ventaja de esto es que no debe

---

<sup>3</sup> Para que los programas puedan encontrar los puertos publicados, es necesario que todos ellos pertenezcan a un mismo servicio de comunicación generado por el *ompi-server*.

implementarse alguna función extra para conocer cuándo leer los archivos de salida del programa *esclavo*. Sin embargo, no es posible disparar múltiples procesos de un programa mediante la función *system* desde un proceso que actualmente utiliza *MPI*. Ésta prohibición es necesaria para controlar el disparo de procesos. Para este tipo de ejecuciones, existe la función *MPI\_Comm\_Spawn* de *MPI*, que se implementó como forma alternativa de ejecución de programas *esclavos*. Esta función permite especificar la cantidad de procesos de ejecución del programa a disparar. El problema es que la función devuelve el control al programa *maestro* de forma instantánea, sin esperar a que el código disparado finalice, por lo que, en principio, debe implementarse alguna función extra para saber cuándo es posible leer el archivo 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 extras específicas dedicadas a la escritura de archivos de entrada y lectura de archivos de salida de distintos códigos *esclavos*.

## Estructura de comunicación implementada

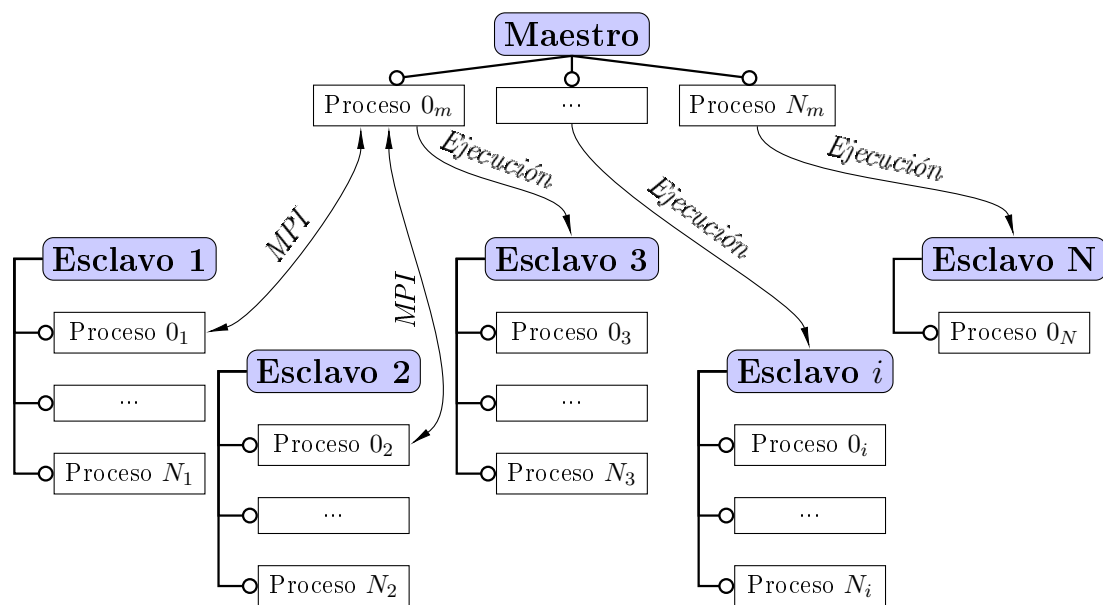
Se desarrollaron funciones híbridas con la finalidad de cubrir todas las formas de comunicación descritas en la sección previa. En el caso de comunicación por intercambio de mensajes, la estrategia definida establece comunicaciones siempre entre un único proceso del código *maestro*, el proceso *raíz*, y un único proceso de cada código *esclavo* (sus propios procesos *raíces*<sup>4</sup>). En el caso de lectura y escritura de archivos y ejecución de programas *esclavos*, 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 en modos SISD y SIMD. El código maestro está diseñado de tal forma que los códigos acoplados resuelvan las ecuaciones 1.2 para pares de incógnitas en las intefaces. Cada par de incógnitas debe contener una variable que corresponda a una condición de borde de tipo *Dirichlet* y otra variable que co-

---

<sup>4</sup> Es responsabilidad del código *esclavo* la comunicación de los datos recibidos por el proceso *raíz* a los demás procesos.



**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 través de intercambio de mensajes por *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.

responda a una condición de borde de tipo *Neumann*. Con la idea de extender estas capacidades al acoplamiento de programas en modos MISD y MIMD, al acoplamiento de programas por lectura y escritura de archivos, así como a programas cuyos cálculos no dependieran exclusivamente de variables seteadas como condiciones de borde, sino de otros parámetros generales del sistema, 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 códigos *esclavos* comunicados por paso de mensajes

En general, los códigos *esclavos* son programas de cálculo particulares que no han sido diseñados para mantenerse acoplados a otros códigos. 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 el llamado o evadirlo. Los problemas que no involucren 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 los esquemas SISD o SIMD los pasos a realizar son los siguientes:

- búsqueda del puerto publicado por el 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 los modos MISD o MIMD, 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. En este paso se llama a la instancia 2, en la cual se recibe valores de condiciones de borde para el primer paso de acoplamiento, en  $t_{coup,1}$ . En base a estos valores, el programa *esclavo* resuelve las ecuaciones implicadas en el subdominio correspondiente. Es posible que además utilice subpasos de evolución  $\Delta t_{local}$  locales (como se explicó en el apartado [1.2 Problemas de evolución](#)), 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. Este proceso se repite al principio de cada paso de acople.

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

Una vez resuelto cada  $\Delta t_{coup}$ , el programa *esclavo* envía al programa *maestro* los valores de las incógnitas calculadas en las interfaces de acoplamiento. Tras este envío, el

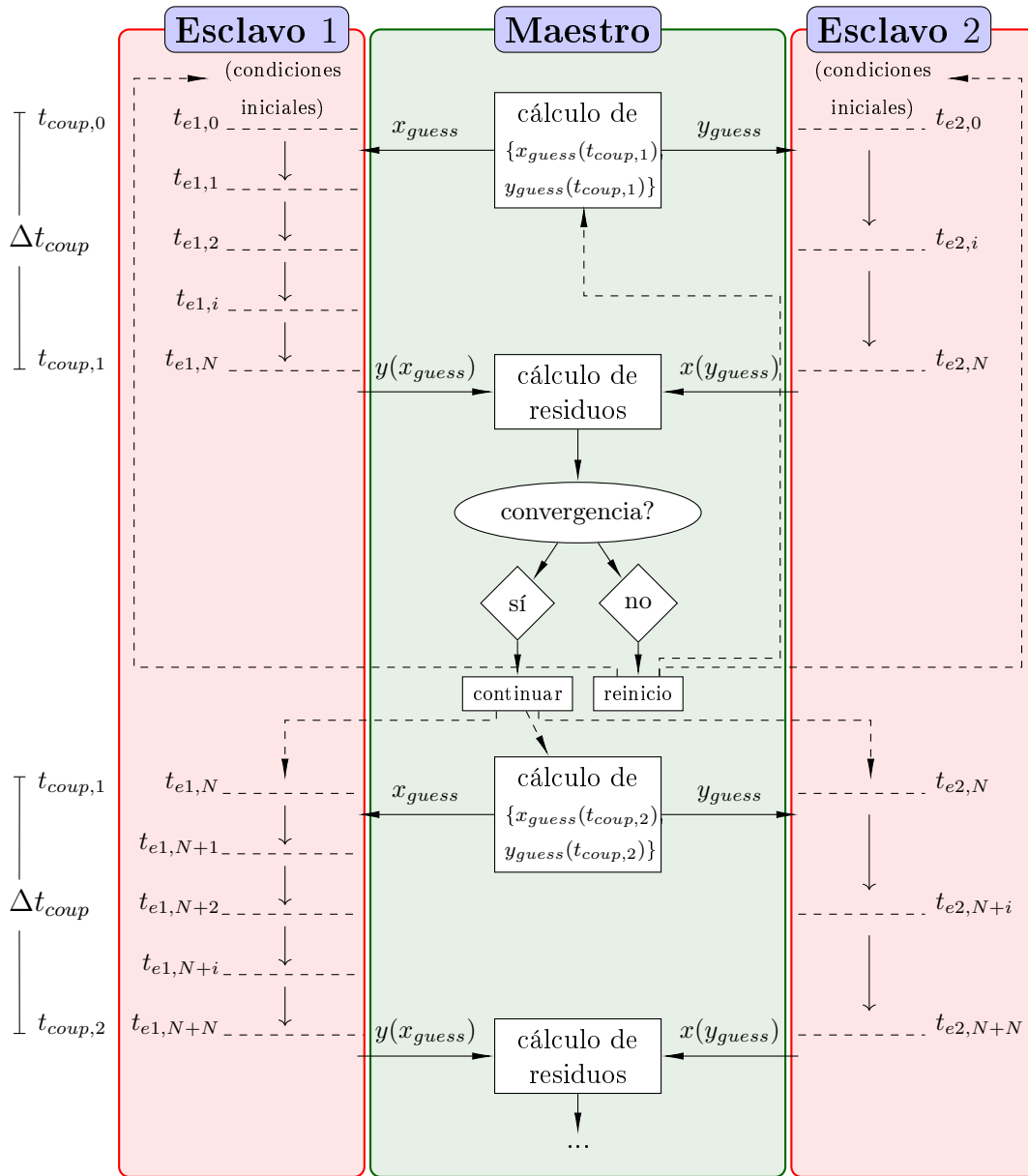
programa queda en espera de la orden para continuar. Mientras, el programa *maestro* recepciona los valores de las incógnitas calculados por los demás códigos *esclavos*. Con estos valores resuelve las ecuaciones de residuos 1.9. Si el módulo del residuo cae por debajo de cierta tolerancia prefijada 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 el cálculo.

La Figura 2.2 esquematiza lo comentado para un caso sencillo en que se acoplan dos programas *esclavos* al programa *maestro*. En este ejemplo, las variables  $x, y$  son las incógnitas en las interfaces de acople. La estrategia definida consiste en imponer al primer subdominio un valor *guess* para  $x$  y al segundo subdominio un valor *guess* para  $y$ . **Maestro** es el programa que se ocupa de proponer estos valores *guess* y de enviarlos a los *esclavos*. El programa **Esclavo 1** resuelve cada paso de evolución acoplado 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**. **Maestro** entonces resuelve las ecuaciones de residuos, y decide si los resultados están convergidos o si es necesario continuar con las iteraciones.

## 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. Cada programa *esclavo* debe recibir una orden para ejecutar estas acciones.





**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  $\Delta t_{coup}$ , pero cada programa utiliza subpasos de cálculos locales. El código **Esclavo 1** inicia recibiendo como *guess* para el tiempo  $t_{coup,1}$  la variable  $x_{guess}$ . El valor de  $x_{guess}$  utilizado en los pasos intermedios de cálculo es simplemente una interpolación entre la condición inicial y el valor recibido. El código **Esclavo 2** recibe alternativamente como *guess* para el tiempo  $t_{coup,1}$  la variable  $y_{guess}$ . Al finalizar  $\Delta t_{coup}$  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 *guesses* propuestos. En caso contrario, cuando los resultados convergen, envía la orden de continuación, y ambos *esclavos* prosiguen con el cálculo. Notar que en problemas sin evolución, el proceso es similar, pero todos los programas calculan un único paso temporal ficticio. Es necesario resaltar que el esquema también aplica para el caso de comunicación entre programas mediante lectura y escritura de archivos, en el que de cada programa *esclavo* solo vive durante cada  $\Delta t_{coup}$ .



# Capítulo 3

## Ejemplos de aplicación

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

— C-3PO, from Star Wars

### 3.1. Movimiento por fuerza boyante en un circuito cerrado

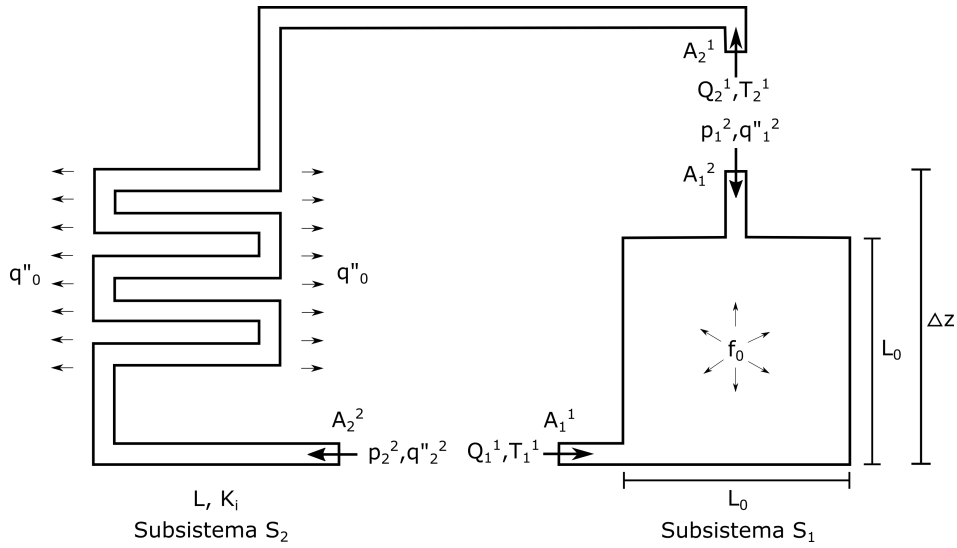
#### Presentación del problema

Como primer ejemplo se presenta un sistema que 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 modela un fluido en un tanque de paredes adiabáticas y con fuente interna de energía. El segundo subsistema representa un circuito en el que el fluido transfiere energía en un intercambiador de calor para bajar su temperatura. Ambos 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. El sistema completo 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]. En la Figura 3.1 puede apreciarse un diagrama del sistema.

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, que servirá como una de las variables de acoplamiento<sup>1</sup>. En el caso de las fuerzas se utilizan valores promediados para la fuerza

---

<sup>1</sup> 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



**Figura 3.1:** Modelo de la funete fría analizada. El subsistema de la izquierda es un intercambiador de calor y se estudia con un código cero-dimensional. El modelo de la derecha es una cavidad con una fuente de energía interna y se estudia con un código bi-dimensional. El sistema completo es abordado con una estrategia de acoplamiento mediante condiciones de borde dinámicas. En el esquema se ejemplifica una de las elecciones posibles para las variables que son datos en cada subsistema.

normal (presión). 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 promediados en la interfaz, y el flujo de calor 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. Por lo tanto el sistema queda definido por ocho ecuaciones de continuidad de campos de variables y otras ocho ecuaciones de residuos que relacionan las incógnitas de forma similar a la que se presentó en la sección 1.2.

Las ecuaciones de continuidad en las interfaces implican que:

---

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 la persona que está modelando considera adecuada conforme a la física del problema. Este paso debe analizarse con cuidado ya que los resultados del acoplamiento dependen de ello.

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_1^1 = Q_2^2 \\ Q_1^2 = Q_2^1 \\ p_1^1 = p_2^2 \\ p_1^2 = p_2^1 \\ T_2^1 = T_2^2 \\ T_2^2 = T_2^1 \\ q''_2^1 = -q''_2^2 \\ q''_2^2 = -q''_2^1 \end{array} \right. \quad (3.1)$$

donde  $Q$  es caudal,  $P$  es presión,  $T$  es temperatura y  $q''$  es flujo de calor. 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 el [Capítulo 1](#). Al evaluar los residuos en cada interfaz, se genera una ecuación no lineal por cada incógnita en cada interfaz. Para que las ecuaciones queden bien planteadas se selecciona solo una de las relaciones para el par presión-caudal y solo una para el par temperatura-flujo de calor en cada interfaz. Así entonces, entre las dos interfaces del subsistema 1 se generan cuatro ecuaciones de residuos <sup>2</sup> del tipo  $(R_m)_i^l = 0$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} (R_{p,Q})_1^1 (Q_1^1, p_1^1, T_1^1, Q_1^2, p_1^2, T_1^2) = 0 \\ (R_{T,q''})_1^1 (Q_1^1, T_1^1, q''_1^1, Q_1^2, T_1^2, q''_1^2) = 0 \\ (R_{p,Q})_1^2 (Q_1^1, p_1^1, T_1^1, Q_1^2, p_1^2, T_1^2) = 0 \\ (R_{T,q''})_1^2 (Q_1^1, T_1^1, q''_1^1, Q_1^2, T_1^2, q''_1^2) = 0 \end{array} \right. \quad (3.2)$$

y entre las dos interfaces del subsistema 2 se generan otras cuatro ecuaciones de residuos:

$$\left\{ \begin{array}{l} (R_{p,Q})_2^1 (Q_2^1, p_2^1, T_2^1, Q_2^2, p_2^2, T_2^2) = 0 \\ (R_{T,q''})_2^1 (Q_2^1, T_2^1, q''_2^1, Q_2^2, T_2^2, q''_2^2) = 0 \\ (R_{p,Q})_2^2 (Q_2^1, p_2^1, T_2^1, Q_2^2, p_2^2, T_2^2) = 0 \\ (R_{T,q''})_2^2 (Q_2^1, T_2^1, q''_2^1, Q_2^2, T_2^2, q''_2^2) = 0 \end{array} \right. \quad (3.3)$$

Notar que según la estrategia de acoplamiento seleccionada, algunas de las dependencias pueden anularse. En la [Figura 3.1](#) se presenta una estrategia en la que las condiciones de borde dinámicas son de tipo de tipo Dirichlet para la interfaz inferior de la cavidad y la interfaz superior del intercambiador de calor, y de tipo de tipo Neumann para las restantes. Como el circuito es cerrado es necesario proveer un valor de referencia para la presión. En la formulación desarrollada se fija un valor de presión arbitrario en la interfaz superior del intercambiador de calor, por lo que la ecuación

<sup>2</sup> Cada ecuación de residuo relaciona las incógnitas según el modelo aplicado. En  $R_{p,Q}$  se considera dependencia entre el caudal  $Q$ , la presión  $p$  y la temperatura  $T$ , y en  $R_{T,q''}$  se considera dependencia entre el caudal  $Q$ , la temperatura  $T$  y el flujo de calor  $q''$ .

$(R_{p,Q})_2^1 = 0$  queda descartada, y es sustituida por la siguiente:

$$p_2^1 = 0.$$

## Subsistemas de estudio

Los parámetros del modelo del intercambiador de calor son los siguientes: flujo de calor por unidad de superficie  $q_0'' = -2 \cdot 10^5 W/m^2$ , longitud de cañerías  $L = 30 \text{ m}$ , sumatoria de coeficientes de pérdida de carga concentrada  $\sum K_i = 1,72$ , rugosidad de cañerías  $\epsilon = 0,5 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ . Las áreas de las interfaces de acople son  $A_2^1 = A_2^2 = 0,03 \text{ m}^2$ . La altura total  $\Delta z$  de este subsistema es equivalente a la de la cavidad bidimensional. La evolución de las variables  $\{p, Q, T, q''\}$  en el subsistema se calcula mediante un código cero-dimensional que resuelve ecuaciones de pérdida de carga en una red hidráulica con flujo turbulento [14] y de transferencia de energía en un intercambiador de calor con flujo constante [15]:

$$\begin{cases} p_2^1 + \rho g \Delta z &= p_2^2 + \rho_2^1 \left( \frac{Q_1^1}{A_2^1} \right)^2 \left( \frac{f_D L}{D} + \sum_i K_i \right) \\ T_2^2 &= T_2^1 + 2 \frac{q_0'' L}{\frac{D}{2} \frac{Q_1^1}{A_2^1} \rho c_p} \end{cases} \quad (3.4)$$

donde  $f_D$  es el factor de Darcy de pérdida de carga distribuida y  $D$  es el diámetro de la tubería. 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. Con este modelo, ninguna de las dos ecuaciones puede recibir valores de contorno *Dirichlet* en ambas interfaces, ya que los valores de caudal y temperatura en una interfaz determinan el valor en la otra. Por lo tanto, en la estrategia de acoplamiento, la primera ecuación debe tener, o bien ambos contornos con condiciones de tipo *Neumann*, o bien uno con condición de tipo *Neuman* y otro con condición de tipo *Dirichlet*. La segunda ecuación debe tener uno de los bordes con condición de tipo *Dirichlet* y otro con condición de tipo *Neumann*. Esta condición es necesaria a pesar de que el flujo de calor recibido no va a ser utilizado, basado en la hipótesis de que es despreciable. Si el flujo de calor fuera efectivamente apreciable, debería cambiarse el modelo en la ecuación planteada.

La cavidad bidimensional se modela con  $L_0 = 0,3 \text{ m}$ , y  $A_1^1 = A_1^2 = 0,03 \text{ m}^2$ . El fluido de trabajo es agua ( $\rho_0 = 10^3 \text{ Kg/m}^3$ ,  $\mu = 6 \cdot 10^{-4} \text{ Kg/ms}$ ,  $c_p = 4184 \text{ J/KgK}$ ,  $k = 0,64 \text{ W/mK}$ ,  $\beta = 0,44 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ ) con fuente interna  $f_0 = 10^6 \text{ W/m}^3$ . La evolución de las variables  $\{p, Q, T, q''\}$  en este subsistema se calcula resolviendo las ecuaciones de Navier-Stokes [16] y de transporte de energía [15]. Se utiliza la aproximación de *Bous-sinesq* considerando variaciones de densidad solo en el término de fuerza volumétrica:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) \bar{u} + \frac{\nabla p}{\rho_0} - \nabla \cdot [(\nu + \nu_T) (\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T)] \\ \quad - (1 - \beta(T - T_{ref})) \bar{g} = 0 \\ \nabla \cdot \bar{u} = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) T = 0 - \frac{k}{\rho_0 c_p} \Delta T = \frac{f_0}{\rho_0 c_p} \end{array} \right. \quad (3.5)$$

donde  $\rho_0$  es la densidad del fluido a la temperatura de referencia  $T_{ref}$ .

Las ecuaciones (3.5) se resuelven mediante una formulación 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*, que básicamente impone restricciones sobre los espacios de elementos utilizados en el problema de *Stokes*.

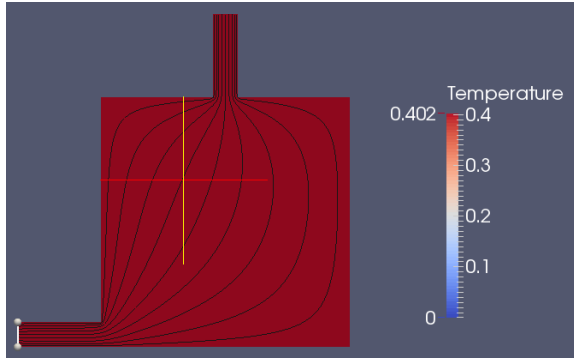
Las paredes imponen condiciones de no deslizamiento para las ecuaciones de *Navier-Stokes* y de flujo de energía nulo para la ecuación de energía. En las interfaces de acople, deben definirse una serie de condiciones de borde. En las ecuaciones de *Navier-Stokes*, en cada interfaz pueden setearse valores 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. Los cálculos se realizaron implementando diferentes estrategias y verificando que los mismos convergieran.

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  $\Delta x \approx 0,005m$ .

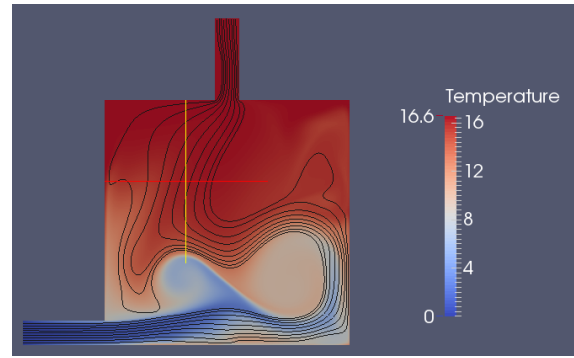
Como se mencionó previamente, no existe necesidad de que ambos códigos utilicen el mismo paso temporal de cálculo. Sin embargo en ambos modelos se utiliza  $\Delta t = 0,01s$ , debido a que ninguno requiere una mayor discretización temporal.

Los cálculos cero-dimensionales se realizan con un programa escrito para este propósito. Los cálculos bi-dimensionales se realizan con **Par-GPFEP** [20] [21]. Las modificaciones necesarias para implementar el acoplamiento de **Par-GPFEP** son comentadas en el Apéndice C.

## Resultados del cálculo

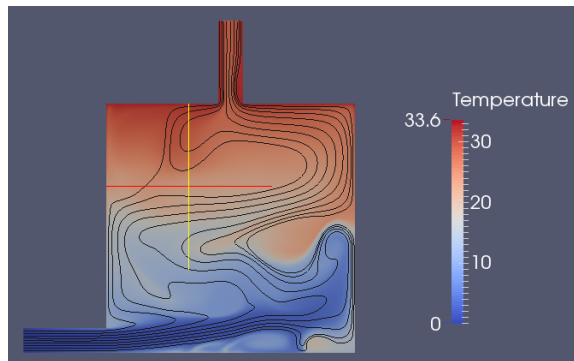


**Figura 3.2:**  $t=0$  s

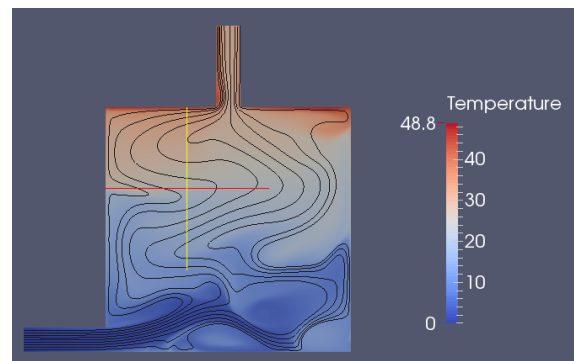


**Figura 3.3:**  $t=40$  s

**Figura 3.4:** Evolución del fluido dentro de la cavidad bidimensional con fuente interna. El número de Richardson del fluido  $Ri = 28,34$ . Pueden apreciarse las líneas de corriente que se establecen al comienzo de la simulación.



**Figura 3.5:**  $t=80$  s



**Figura 3.6:**  $t=250$  s

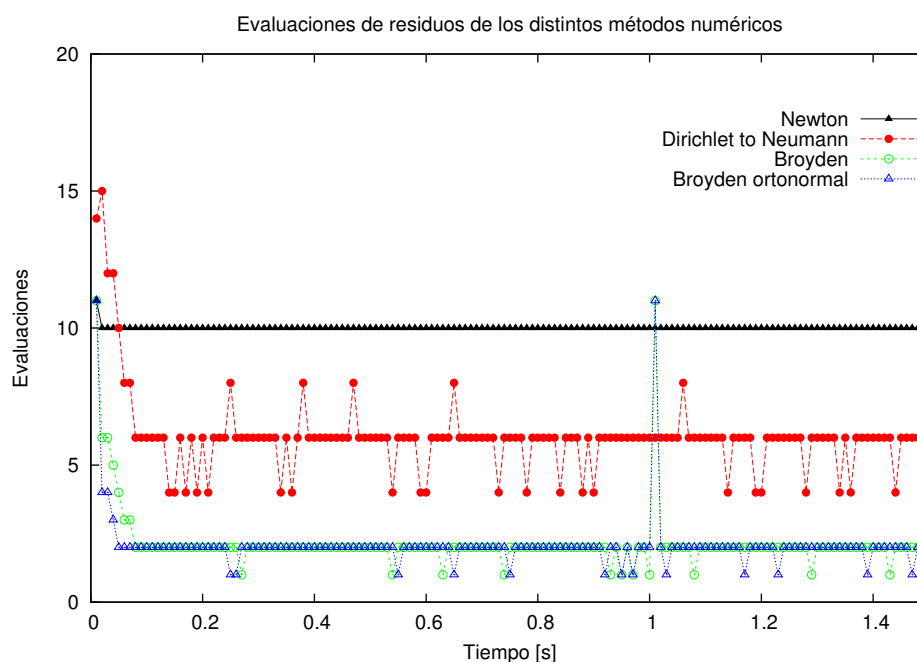
**Figura 3.7:** Evolución del fluido dentro de la cavidad bidimensional con fuente interna. El número de Richardson del fluido  $Ri = 28,34$ . Pueden apreciarse las líneas de corriente serpenteantes y la estratificación del fluido alcanzando un estado estacionario.

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. El régimen del fluido depende del número adimensional de Richardson  $Ri$ , [22], que representa la relación entre las fuerzas boyantes y las fuerzas inerciales. Con los parámetros del subsistema bidimensional el  $Ri$  del fluido queda definido en  $Ri = 28,34$ . Como este valor es alto, el fluido se estratifica en capas de diferentes temperaturas. Las líneas de corrientes serpentean entre la entrada y la salida, manteniendo corrientes paralelas horizontales. En las Figuras 3.4 y 3.7 puede observarse la evolución de las líneas de corriente y del campo de temperatura en la cavidad bidimensional.



## Análisis de métodos de resolución del sistema de ecuaciones de residuos

Se exploran diferentes métodos numéricos para resolver el sistema de ecuaciones de residuos presentado en 3.2 y 3.3. En la Figura 3.8 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 3.8:** 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.

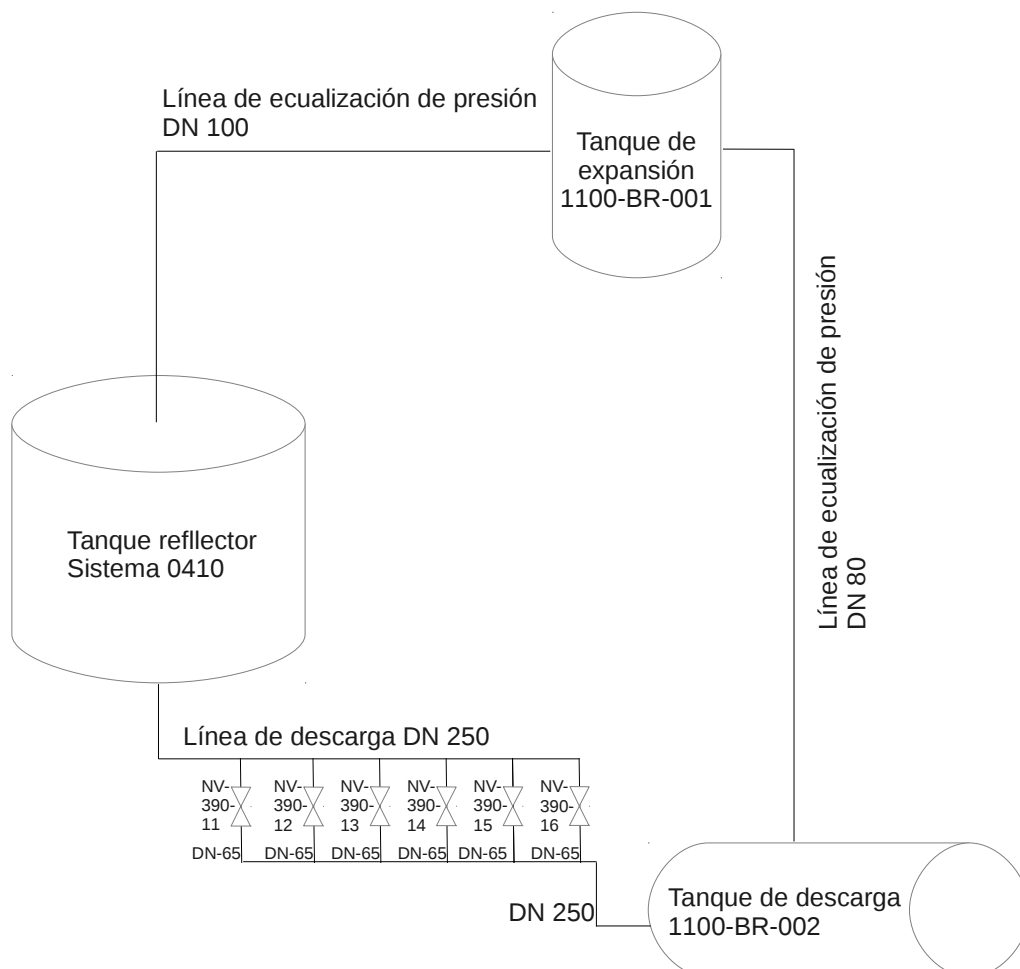
Los métodos *quasi-Newton* inicializan la matriz jacobiana sólo en el primer paso temporal, y luego utilizan aproximaciones económicas de la misma. Cada cierta cantidad de pasos temporales pueden reinicializar la matriz también mediante diferencias finitas. En los modelos realizados se utiliza reinicialización cada 100 pasos temporales, y por lo tanto la primera reinicialización se efectúa en el paso 101. 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* 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. El SSP consiste en el accionamiento del vaciado del tanque reflector. El drenado del material reflector (agua pesada) disminuye drásticamente la reactividad, apagando el reactor. La tarea 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 [23].



**Figura 3.9:** Esquema del segundo sistema de parada del reactor RA10.

La Figura 3.9 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 rellenado con gas Helio, excepto una porción del tanque de expansión que también permanece rellena 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, rellenando 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 modelo 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 [24] [25]. Durante el 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 tanque del reflector del *mockup* del reactor OPAL, montado por INVAP en San Carlos de Bariloche, [26].

Debido a que el mockup del OPAL está abierto a la atmósfera, no cuenta con línea de ecualización de presiones y por lo tanto no se consideró en el modelo.

En un estudio [27] 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. En el estudio aquí presentado se 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. El propósito de este estudio es investigar si existe algún efecto 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. Ambos 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 ya que se utilizan como variables de acoplamiento el caudal volumétrico y la presión promedio. 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  $I_{21}$ . Las ecuaciones de continuidad implican que:

$$\begin{cases} p_1^1 = p_2^1 \\ Q_1^1 = Q_2^1 \end{cases} \quad (3.6)$$

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 válvulas<sup>3</sup>. En base al caudal recibido en este subsistema se calcula un perfil de velocidades. Las ecuaciones de residuos quedan entonces:

$$\begin{cases} (R_{p,Q})_1^1(p_1^1) = 0 \\ (R_{p,Q})_2^1(Q_2^1) = 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

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 [28]:

$$\ddot{h}h + \frac{\dot{h}^2}{2} \left( 1 - \left( \frac{A_T}{A_D} \right)^2 \right) + g\Delta h_{red} + \ddot{h}l_D = \frac{p_{atm} - p_1^1}{\rho} + \Delta\hat{u} \quad (3.8)$$

donde  $p_1^1$  es la presión en la interfaz de acople, que se recibe como dato de contorno,  $A_T$  es la área transversal del tanque del reflector,  $A_D$  es la sección transversal de la línea de descarga,  $\Delta h_{red}$  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  $\rho$  es la densidad del agua.  $\Delta u$  representa la pérdida de carga por unidad de masa y puede modelarse como:

$$\Delta u = \frac{1}{2}v_D^2 \left( \frac{f_D l_D}{D} + \sum_i K_i \right) \quad (3.9)$$

donde  $v_D$  es la velocidad del fluido en la línea de descarga, (que puede escribirse en

<sup>3</sup> 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.

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

**Tabla 3.1:** Parámetros del subsistema del tanque del reflector con acople de sección de red hidráulica

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.

CB

La Tabla 3.1 reúne los parámetros del subsistema. Los datos geométricos pueden consultarse en las referencias [26]. El factor de pérdida de carga concentrada fue calculado en función de estos datos geométricos [14], 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.

Una vez resuelta la ecuación (3.8) para un dado valor de tiempo, el caudal de descarga  $Q_1^1$  puede calcularse simplemente como:

$$Q_1^1 = -\dot{h} A_D \quad (3.10)$$

El subsistema arreglo de válvulas es modelado con una malla tridimensional de elementos tetraédricos realizada en **Salomé** [29]. 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 [26].

Debido a que el régimen del fluido es turbulento durante la mayor parte de la

descarga, y una simulación DNS demandaría elevados recursos computacionales, se utiliza un modelo de turbulencia de tipo RANS para modelar la fricción interna del fluido. El modelo utilizado es el modelo  $\kappa - \epsilon$  *realizable*, en el que las ecuaciones se estabilizan mediante un método de control de coeficientes [30]. El sistema de ecuaciones resultantes en el segundo subsistema es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + (\bar{U} \cdot \nabla) \bar{U} + \frac{\nabla P^*}{\rho} - \nabla \cdot [(\nu + \nu_T) (\nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T)] - \bar{f} = 0 \\ \nabla \cdot \bar{U} = 0 \\ \nu_T - c_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} = 0 \\ \frac{\partial \kappa}{\partial t} + (\bar{U} \cdot \nabla) \kappa - \frac{c_\mu}{2} \kappa^2 \epsilon |\nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T|^2 - \nabla \cdot \left( c_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \nabla \kappa \right) + \epsilon = 0 \\ \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + (\bar{U} \cdot \nabla) \epsilon - \frac{c_1}{2} \kappa |\nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T|^2 - \nabla \cdot \left( c_\epsilon \frac{\kappa^2}{\epsilon} \nabla \epsilon \right) + c_2 \frac{\epsilon}{\kappa} = 0 \end{array} \right. \quad (3.11)$$

donde  $\bar{f}$  es una fuerza volumétrica,  $\kappa$  es la energía cinética turbulenta,  $\epsilon$  es la disipación viscosa de energía turbulenta,  $\nu_T$  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  $\kappa$  y  $\epsilon$  toman los siguientes valores:  $c_\mu = 0,09$ ,  $c_1 = 0,126$ ,  $c_2 = 1,92$  y  $c_\epsilon = 0,07$  [31].

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 [16]. Las condiciones de borde al ingreso de la cañería dependen del valor  $Q_2^1$  impuesto, a partir del cual se define un perfil de velocidades plano del fluido. En base a estas velocidades se calcula un valor para la intensidad turbulenta  $I_T$ , y con ella se aproximan los valores de  $\kappa$  y  $\epsilon$  en la interfaz. En la descarga de la cañería se impone una fuerza normal que depende de la presión atmosférica, despreciando las fuerzas tangenciales. Las ecuaciones de  $\kappa$  y  $\epsilon$  no requieren condiciones 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 [32]. Este modelo impone condiciones de tipo *Dirichlet* para  $\kappa$  y  $\epsilon$  en la frontera en que se impone la ley de pared.

El sistema de ecuaciones (3.11) es resuelto en pasos fraccionados [33] mediante una formulación de elementos finitos con elementos lineales, estabilizada mediante *SUPG* [17] y *PSPG* [18]. En el primer paso fraccionado se resuelve el transporte de  $\kappa$ , en el segundo paso se resuelve el transporte de  $\epsilon$ , y en el último paso se resuelven en forma monolítica las ecuaciones de *Navier-Stokes*.

Una vez resueltas las ecuaciones es posible calcular el valor de la presión promedio

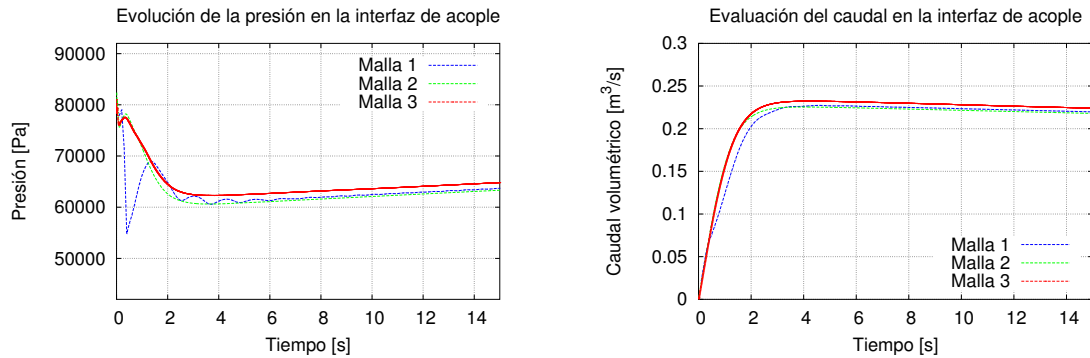
$\langle p_2^1 \rangle$  en la interfaz  $I_{21}$ , a partir de los valores  $\langle P_{I_2}^* \rangle$  y  $\langle \kappa_{I_2} \rangle$  promediados en ella:

$$\langle p_2^1 \rangle = \langle P_{I_2}^* \rangle - \frac{2}{3} \langle \kappa_{I_2} \rangle \quad (3.12)$$

Los cálculos cero-dimensionales se realizan con un programa escrito para este propósito. Los cálculos tri-dimensionales se realizan con **Par-GPFEP**.

## Resultados del cálculo

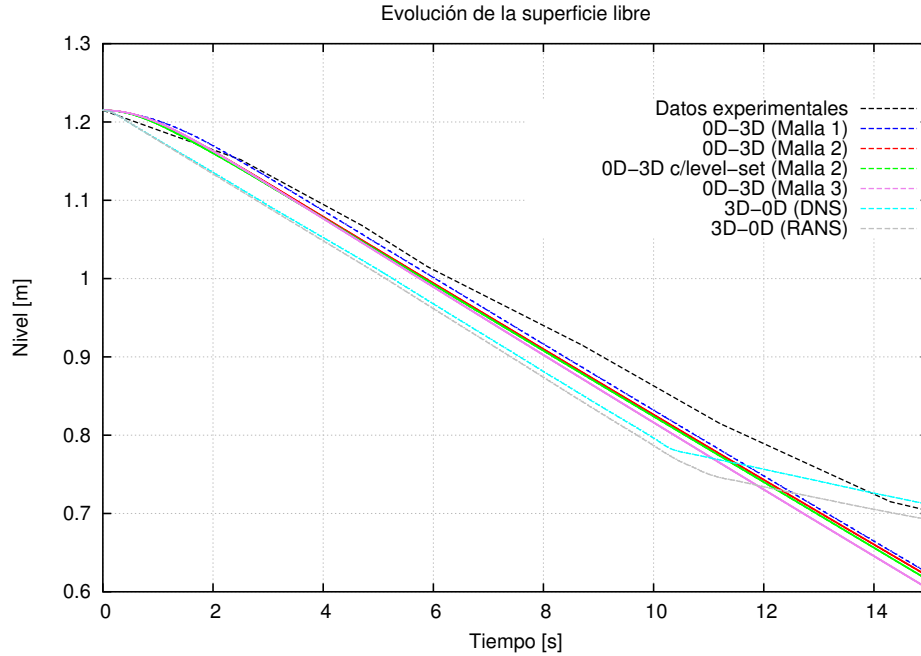
Se realizan cálculos utilizando mallas del modelo tri-dimensional con diferente refinamiento para estudiar la convergencia de los resultados. La primera es una malla con  $\Delta x = 0,01m$  y 1145659 de elementos. La segunda es malla tiene  $\Delta x = 0,008m$  y 1806202 elementos. La tercera es la 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 estudiando diferentes métodos numéricos, mediante el método de Broyden ortonormal, con reinicialización de la matriz jacobiana cada 100 pasos temporales. En la Figura 3.10 se reportan los resultados obtenidos para la evolución de los caudales y de las presiones en la interfaz de acople.



**Figura 3.10:** 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 3.11 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 comentada en la sección 3.2. 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 [24],

obtenidas sin utilizar modelo de turbulencia, y utilizando el modelo *RANS* previamente comentado. Comparativamente se muestran también los valores experimentales reportados en la referencia [26].



**Figura 3.11:** 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.

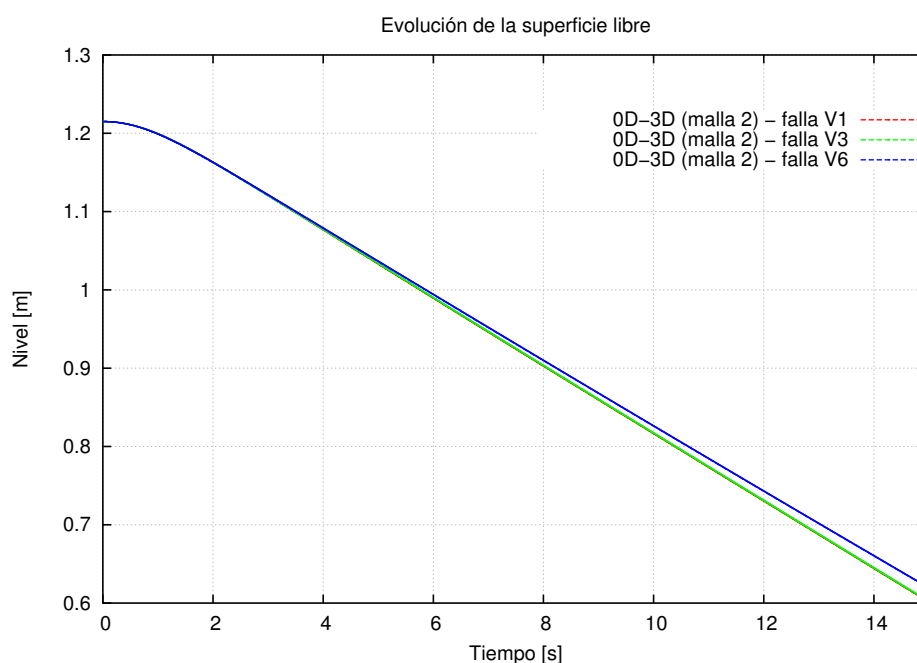
Los modelos computacionales predicen un comportamiento dinámico similar al reportado experimentalmente. Durante los primeros segundos de evolución existe una cierta inercia en la descarga que solo es captada por los modelos que describen el detalle en el arreglo de válvulas. Tras este transitorio inicial, 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 el modelo tri-dimensional del tanque ya que la curva reporta una altura efectiva, calculada a partir del volumen restante de líquido en el tanque. Transcurridos los diez segundos de descarga, 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 3.12 se compara la evolución de la superficie libre ante fallas en la primera, la tercera y la sexta válvula.



**Figura 3.12:** Evolución del nivel de líquido en el *mockup* del tanque del reflector del OPAL ante accionamiento del SSP considerando falla simple en diferentes válvulas.

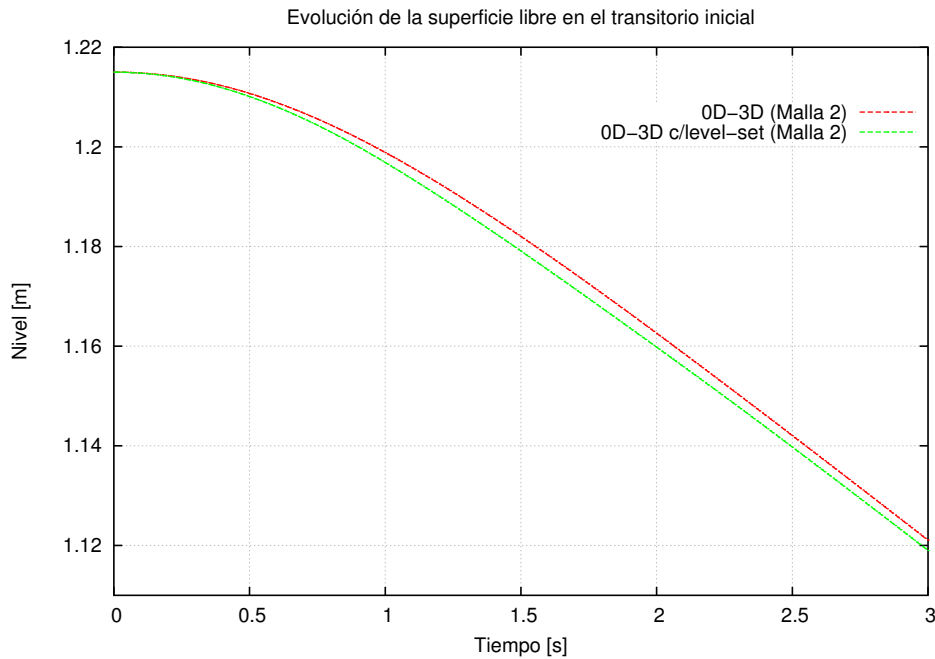
Como puede observarse no es posible notar diferencias considerables en la evolución de la descarga. La pérdida de carga total del arreglo de válvulas es levemente sensible a la válvula que falla.

## 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 [34]. Para ello se añade un paso fraccionado extra al sistema de ecuaciones (3.11):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \phi}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) \phi = 0 \end{array} \right. \quad (3.13)$$

donde  $\phi$  es el campo que representa la distancia con signo de cada punto a la superficie libre. Las porciones del sistema con líquido tienen  $\phi$  positivo y las porciones con gas tienen  $\phi$  negativo.  $\phi$  tiene valor nulo en la superficie libre. La ecuación (3.13) 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 [35]. El campo del level set es reinicializado mediante cálculos geométricos cada 10 pasos temporales.

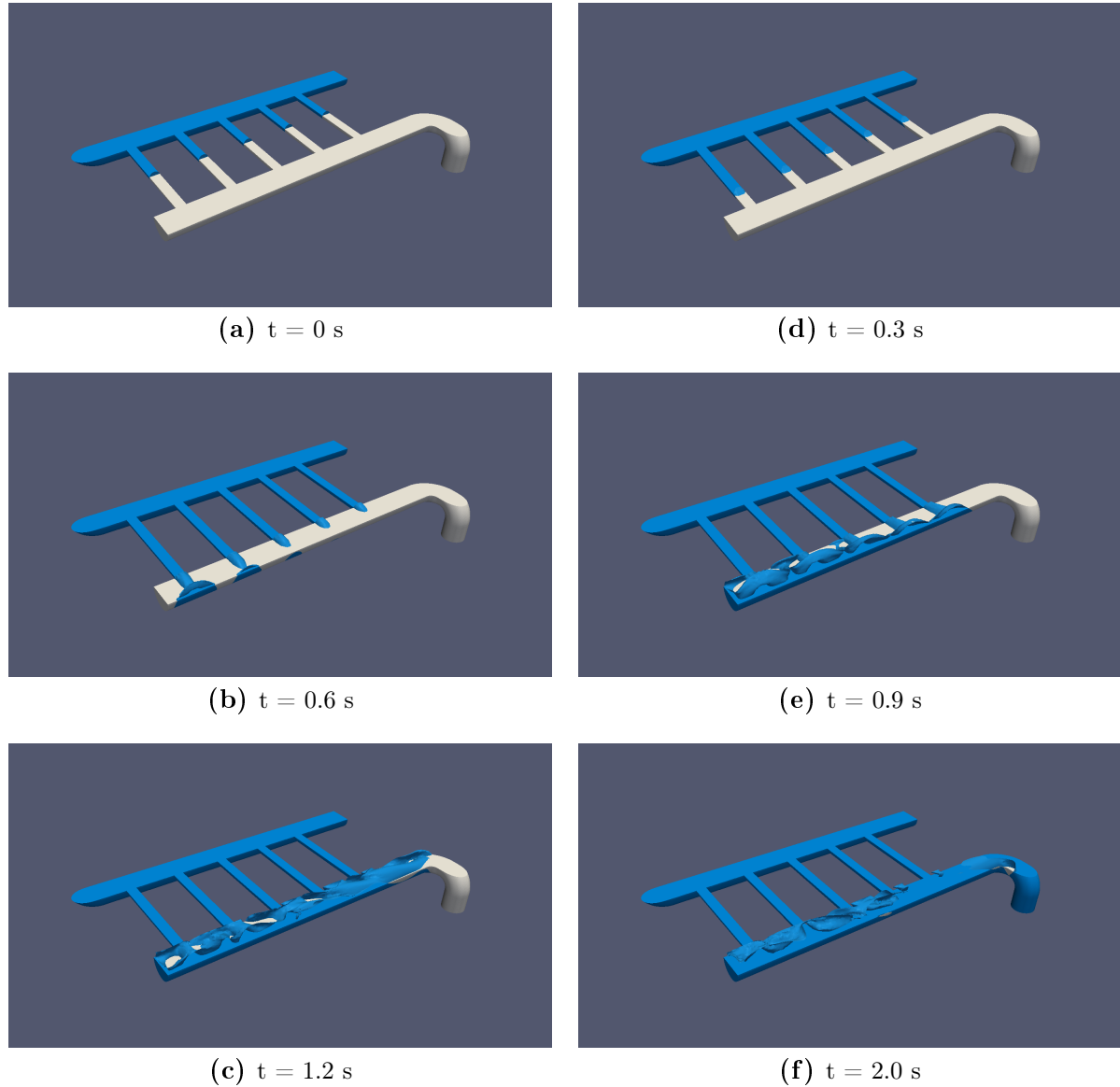


**Figura 3.13:** Evolución del nivel de líquido en el *mockup* del tanque del reflector del reactor OPAL ante accionamiento del SSP durante el transitorio inicial. Se comparan la solución obtenida despreciando el gas en la cañería y la obtenida con transporte de superficie libre mediante la técnica de *level-set*.

En la Figura 3.11 se compara la evolución obtenida de la superficie libre con los resultados anteriores, y en la Figura 3.13 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 efecto

no tiene mayor peso. 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 3.14 se observa la evolución de la superficie libre durante los primeros instantes de tiempo.



**Figura 3.14:** 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.

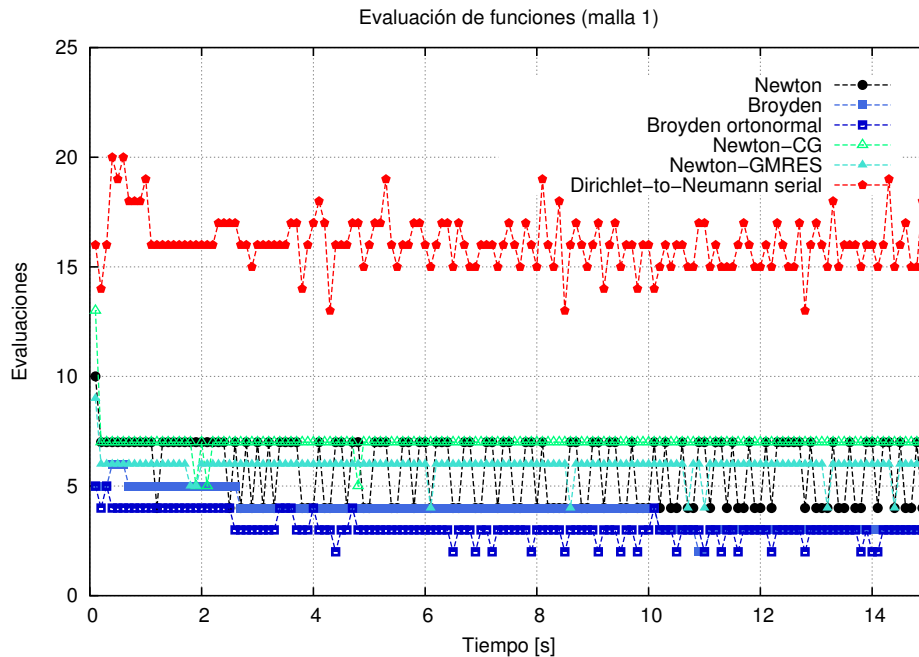
## Conclusiones del análisis

La herramienta de análisis de acoplamiento fuerte de subsistemas permite incorporar el estudio de la inercia fluidica en la red hidráulica de descarga. Este estudio

concluye que los modelos que incluyen el fenómeno inercial del fluido en la red hidráulica 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.

## 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. 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. La Figura 3.15 compara la cantidad de evaluación de funciones en función de paso temporal para diferentes métodos de resolución.



**Figura 3.15:** 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.

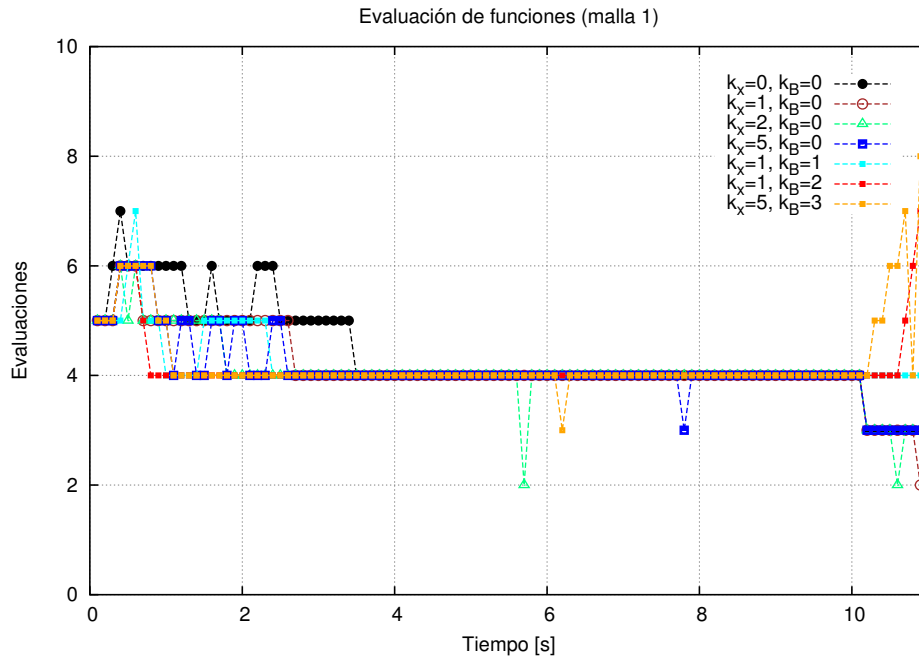
El método explícito *Dirichlet-to-Neumann* es el que mayor cantidad de evaluaciones consume, debido a que requiere una excesiva cantidad de iteraciones para converger. Los métodos de tipo *Newton-Krylov*: *Newton-GMRES* y *Newton-CG* (*Newton-Gradientes*

*Conjugados*) requieren baja cantidad de iteraciones, pero debido a la forma de resolución toman más evaluaciones que los métodos *quasi-Newton*: *Broyden* y *Broyden ortonormal*, los cuales convergen con baja cantidad de iteraciones y de evaluaciones asociadas. 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. Las 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 cuando  $n > k_{\bar{x}} + 1$  y  $n > k_{\mathbb{B}} + 1$  respectivamente.

La Figura 3.16 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 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. 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 3.10). Ante un 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



**Figura 3.16:** 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.

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 ideal requeriría 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 el interés de conocer el comportamiento de la metodología de resolución para problemas abordados mediante el Método de Descomposición Djsunta de Dominios en sistemas con grandes cantidades de incógnitas, se propuso analizar redes hidráulicas de múltiples componentes interconectados. La idea es utilizar modelos sencillos para describir el comportamiento de cada componente particular para poder centrar el análisis solo en el estudio de convergencia.

## 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 3.17 esquematiza un modelo de estudio con 5 subsistemas acoplados. Cada subdominio es modelado con balances cero-dimensionales de conservación de masa y energía. Las ecuaciones resultantes para un subsistema genérico que no contiene bordes del dominio original son las siguientes:

$$\begin{cases} \frac{p_1}{\rho} + \frac{v_1^2}{2} = \frac{p_2}{\rho} + \frac{v_2^2}{2} + gz_2 + \Delta u_{12} \\ \frac{p_1}{\rho} + \frac{v_1^2}{2} = \frac{p_3}{\rho} + \frac{v_3^2}{2} + gz_3 + \Delta u_{13} \\ A_1 v_1 = A_2 v_2 + A_3 v_3 \end{cases} \quad (3.14)$$

donde los subíndices 1, 2 y 3 refieren a diferentes extremos locales del contorno del 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  $\Delta u_{ij}$  refiere a la diferencia de energía del flujo entre los extremos  $i$  y  $j$ . El extremo 1 siempre corresponde al izquierdo de cada subdominio, y las 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.

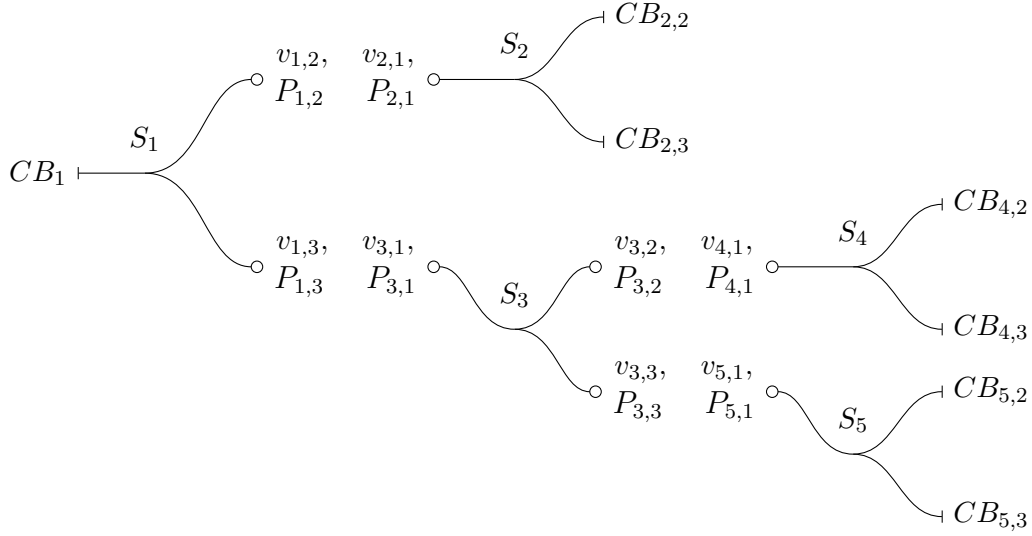
Los términos de presión estática  $\frac{p_i}{\rho}$  y presión dinámica  $\frac{v_i^2}{2}$  para el extremo  $i$  pueden agruparse en una única incógnita  $P_i$  para simplificar el cálculo:

$$P_i = \frac{p_i}{\rho} + \frac{v_i^2}{2} \quad (3.15)$$

El término  $\Delta u_{ij}$  puede aproximarse mediante una función de pérdida de carga como [36]:

$$\Delta u_{ij} = \frac{v_i^2}{2} \left( \frac{f_{D_i} L_i}{D_i} + \sum_t K_{i,t} \right) + \frac{v_j^2}{2} \left( \frac{f_{D_j} L_j}{D_j} + \sum_t K_{j,t} \right) \quad (3.16)$$

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



**Figura 3.17:** 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 en el extremo  $j$  del subsistema  $i$ . La incógnita  $P_{i,j}$  agrupa las presiones estática y dinámica en el extremo  $j$  del subsistema  $i$ . Las incógnitas pueden reducirse rápidamente a la mitad aplicando las relaciones de continuidad 1.1.

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,  $f_{D_i}$  puede modelarse como [36]:

$$f_{D_i, lam} = \frac{64}{Re_{D_i}} \quad (3.17)$$

donde  $Re_{D_i} = \frac{\rho v_i D_i}{\mu_i}$ , siendo  $\mu$  la viscosidad dinámica del fluido. Bajo esta aproximación, la ecuación 3.18 queda lineal en  $v_i$  y en  $v_j$  para aquellos subsistemas en los que pudiera despreciarse la pérdida de carga concentrada:

$$\Delta u_{ij, lam} = \frac{v_i}{2} \left( \frac{64\mu L_i}{\rho D_i^2} \right) + \frac{v_j}{2} \left( \frac{64\mu L_j}{\rho D_j^2} \right) \quad (3.18)$$

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  $P$ ).

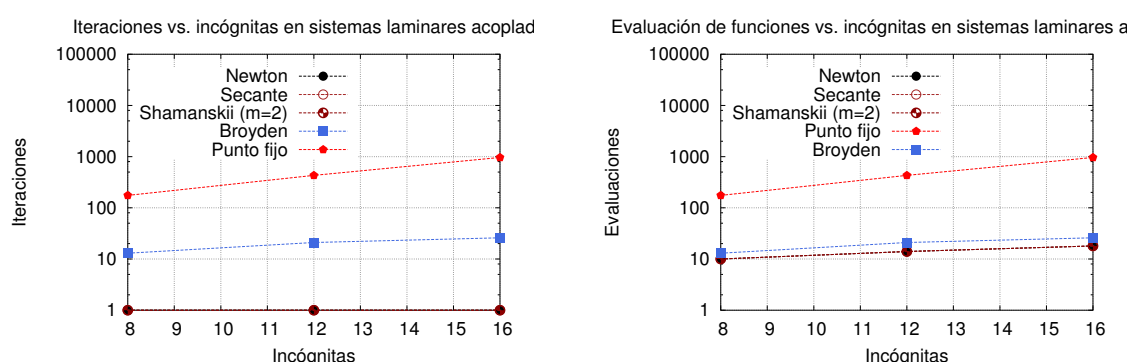
Cada subdominio es modelado con funciones *esclavas* sencillas escritas en `Octave`. Los parámetros geométricos de cada subsistema se sortean aleatoriamente entre valores típicos. El fluido de trabajo es agua a temperatura y presión ambiente. Los códigos esclavos calculan el valor de las incógnitas en cada una de las interfaces de acoplamiento a partir de los datos recibidos como condiciones de borde. El sistema de ecuaciones de



residuos 1.9 resultante tras aplicar las ecuaciones de continuidad 1.1 entre subdominios, es resuelto por una función *maestra*.

## Redes hidráulicas con regímenes de flujo laminar

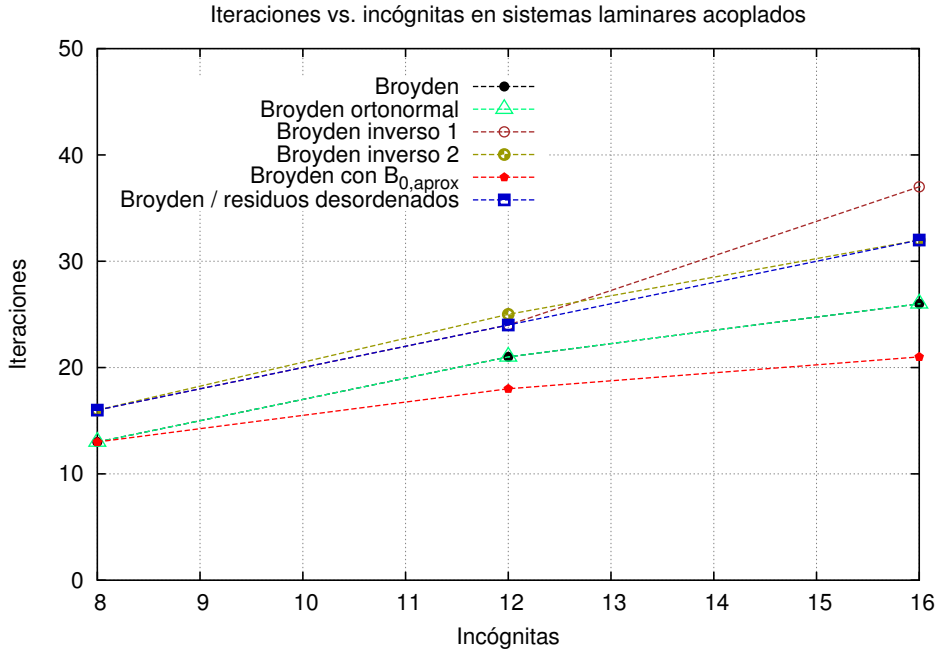
En la Figura 3.18 (a) se pueden observar la cantidad de iteraciones requeridas por diferentes métodos para la convergencia de resultados en sistemas hidráulicos laminares sin pérdidas de carga concentrada, variando la cantidad de subsistemas acoplados. La cantidad de incógnitas en el eje  $x$  corresponde a una simplificación obtenida tras aplicar las ecuaciones de continuidad.



**Figura 3.18:** Comparación de diferentes métodos numéricos para la resolución de sistemas de redes hidráulicas: (a) iteraciones requeridas y (b) evaluaciones de funciones requeridas.

El método del punto fijo reportado es un método explícito. En este método se genera una semilla inicial  $\bar{x}_0$  para las incógnitas y se las envía a los códigos *esclavos*. Los resultados que ellos devuelven conforman directamente el vector de iteración  $\bar{x}_1$ . El método del punto fijo podría pensarse como una combinación múltiple de métodos *Dirichlet-to-Neumann*, en el que los residuos se computan directamente entre vectores de iteración contiguos. En la figura se observa que este método 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* (construye la matriz jacobiana solo en la primera iteración y luego la utiliza sin cambios en las siguientes iteraciones) y el método de *Shamanskii* (construye la matriz jacobiana cada  $m$  iteraciones) 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 en estos casos para medir la eficiencia de cada método es la cantidad total de evaluaciones que requiere. En la Figura 3.18 (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 3.19 se reportan los resultados.



**Figura 3.19:** Comparación de diferentes esquemas *quasi-Newton* para la resolución de sistemas de redes hidráulicas con regímenes de flujo laminar.

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*) [37] y en la figura puede verse que tienen eficiencia inferior.

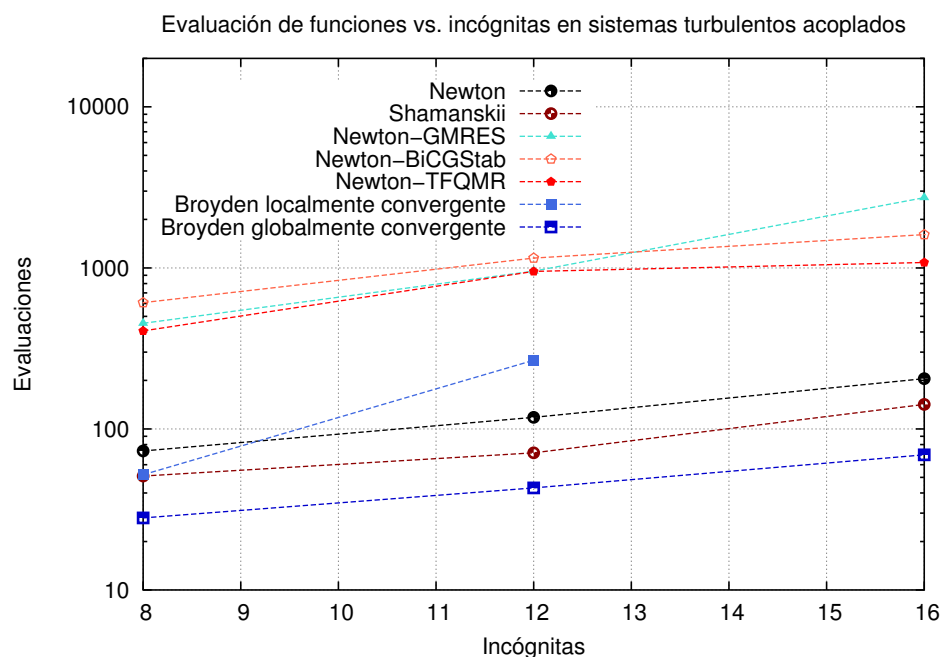
El método de *Broyden* se utilizó también mejorando la semilla inicial para la matriz  $\mathbb{B}_n$ . En todos los estudios reportados se venía utilizando la matriz identidad, pero aquí se reemplazó por una matriz con *unos* en los elementos que corresponden a posiciones llenas de la matriz jacobiana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

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  $\mathbb{B}_n$  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  $\mathbb{B}_n$ . 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 3.18 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 3.20 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 3.20:** Comparación de diferentes métodos numéricos para la resolución de sistemas de redes hidráulicas con regímenes de flujo turbulento.

Los métodos *Newton-Krylov* toman demasiadas evaluaciones para converger. El método de *Broyden localmente convergente*, que no es otro sino el método de *Broyden* que hasta ahora se venía utilizando, solo se comporta bien a baja cantidad de incógnitas, y cuando la cantidad de incógnitas es elevada diverge. 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*, que realiza búsquedas del mínimo a lo largo de la dirección de cambio en cada iteración (empleando evaluaciones de funciones extras). Estas búsquedas son conocidas en la bibliografía como *line searching* [9].

### 3.4. Extensión a problemas acoplados en modelos de núcleo

#### Estrategia de acoplamiento extendida

Si bien la estrategia de acoplamiento 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 dos 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 este acoplamiento se resuelve mediante iteraciones explícitas de tipo *Picard* dentro de cada paso de tiempo.

En esta sección se propone un modelo simplificado para el análisis de la dinámica de núcleo de un reactor nuclear considerando solo los fenómenos neutrónicos y termo-hidráulicos.

## Subsistemas de estudio

El cálculo de núcleo se efectúa mediante un modelo de difusión estacionario <sup>4</sup> [38]:

$$\Delta \bar{\phi} = \frac{1}{k_{eff}} \Sigma \bar{\phi} \quad (3.19)$$

donde  $\bar{\phi}$  es una función vectorial con el valor del flujo neutrónico en cada punto del espacio para diferentes grupos de energía, un vector con el valor del flujo neutrónico a diferentes grupos de energía en cada punto<sup>5</sup> de cálculo del reactor,  $\Sigma$  es la matriz de secciones eficaces asociada a diferentes reacciones para diferentes grupos de energía, y  $k_{eff}$  es el factor de criticidad del reactor. En el modelo propuesto las secciones eficaces dependen de la densidad del refrigerante  $N_{ref}$ , de la temperatura del refrigerante  $T_{ref}$  y de la temperatura del combustible  $T_{comb}$ , para cada punto espacial y cada grupo de energía, de modo que:

$$\Sigma = \Sigma(N_{ref}, T_{ref}, T_{comb}) \quad (3.20)$$

y esto de donde sale?

La ecuación 3.19 requiere condiciones de borde en el contorno del dominio de cálculo. En el primer ejemplo analizado se utilizan condiciones de borde homogéneas<sup>6</sup> sobre  $\phi$ . 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

<sup>4</sup> Al 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).

<sup>5</sup> Los puntos de cálculo pueden corresponder a nodos en formulaciones de diferencias finitas o de elementos finitos, o a celdas integrales en formulaciones de volúmenes finitos.

<sup>6</sup> Imponer un flujo 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* ??), y asumir al mismo tiempo que esta distancia es despreciable, para de esta forma no extender el dominio de cálculo.

la malla del cálculo.

Una vez obtenido el flujo neutrónico  $\phi$ , la distribución de potencia  $P$  puede calcularse a partir del ritmo de reacciones de fisión [39]:

$$P = \int_{vol} E_{fis,i} \Sigma_{fis,i} \phi_i \quad (3.21)$$

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  $\phi_i$  es la componente del flujo neutrónico también condensada en el grupo de energía  $i$ . La distribución de potencia  $\bar{P}$  hallada es utilizada como fuente de energía en los cálculos acoplados de transferencia de energía.

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:

$$\rho \frac{\partial T_{comb}}{\partial t} = \nabla (k \nabla T) + S \quad (3.22)$$

donde  $\rho$  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. Éste 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:

$$-k \frac{\partial T_{comb}}{\partial n} = h (T - T_{sk}) \quad (3.23)$$

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 [40]. Las primeras dos son las ecuaciones de continuidad en cada fase:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_g \rho_g + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_g \rho_g v_g A) = \Gamma_g \\ \frac{\partial}{\partial t} \alpha_f \rho_f + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_f \rho_f v_f A) = \Gamma_f \end{cases} \quad (3.24)$$

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  $A$ ,  $\alpha_i$  refiere a la fracción parcial de área que la fase  $i$  ocupa en  $A$ ,  $\rho_i$  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  $\Gamma_i$  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:

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_g \rho_g A \frac{\partial v_g}{\partial t} + \frac{1}{2} \alpha_g \rho_g A \frac{\partial v_g^2}{\partial x} = -\alpha_g A \frac{\partial P}{\partial x} + \alpha_g \rho_g B_x A - (\alpha_g \rho_g A) FWG(v_g) \\ \quad + \Gamma_g A (v_{gI} - v_g) - (\alpha_g \rho_g A) FIG(v_g - v_f) \\ \quad - C \alpha_g \alpha_f \rho_m A \left[ \frac{\partial(v_g - v_f)}{\partial t} + v_f \frac{\partial v_g}{\partial x} - v_g \frac{\partial v_f}{\partial x} \right] \\ \alpha_f \rho_f A \frac{\partial v_f}{\partial t} + \frac{1}{2} \alpha_f \rho_f A \frac{\partial v_f^2}{\partial x} = -\alpha_f A \frac{\partial P}{\partial x} + \alpha_f \rho_f B_x A - (\alpha_f \rho_f A) FWF(v_f) \\ \quad - \Gamma_g A (v_{fI} - v_f) - (\alpha_f \rho_f A) FIF(v_f - v_g) \\ \quad - C \alpha_f \alpha_g \rho_m A \left[ \frac{\partial(v_f - v_g)}{\partial t} + v_g \frac{\partial v_f}{\partial x} - v_f \frac{\partial v_g}{\partial x} \right] \end{array} \right. \quad (3.25)$$

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[40], las ecuaciones son las siguientes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g U_g) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_g \rho_g U_g v_g A) = -P \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} - \frac{P}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_g v_g A) \\ \quad + Q_{wg} + Q_{ig} + \Gamma_{ig} h_g^* + \Gamma_w h_g' + DISS_g \\ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f U_f) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_f \rho_f U_f v_f A) = -P \frac{\partial \alpha_f}{\partial t} - \frac{P}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_f v_f A) \\ \quad + Q_{wf} + Q_{if} - \Gamma_{ig} h_f^* + \Gamma_w h_f' + DISS_f \end{array} \right. \quad (3.26)$$

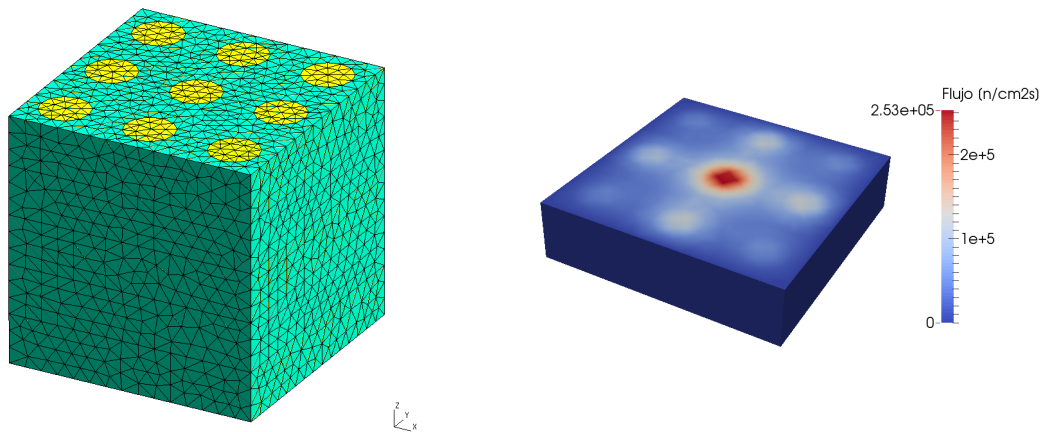
La primera ecuación corresponde a la fase gaseosa y la segunda corresponde a la fase líquida. Los términos de la izquierda representan el transporte de energía en cada fase. Los dos primeros términos de la derecha representan trabajo por cambio de fase. El tercer término de la derecha en cada ecuación representa la transferencia de calor con las paredes de las estructuras, y son los términos que acoplan la dinámica fluídica a la distribución de temperatura en los combustibles, (ver ecuación 3.23. 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  $\Gamma_{ij}$  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  $\Gamma_w$  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 3.25 y 3.26 quedan sin definir una serie de coeficientes. Todos estos coeficientes se modelan a partir de ecuaciones de cierre extras [40]. 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.

## 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 3.23 puede observarse la geometría utilizada.



**Figura 3.21:** (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.

El dominio de cálculo termohidráulico consiste en una simplificación de la geometría del núcleo, considerando un único canal de refrigeración con longitud extendida que recibe una potencia igual a la potencia total generada por el reactor. Este tipo de modelos es comúnmente utilizado en análisis de acoplamiento neutrónico-termohidráulico



[42]. 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  $\Sigma$  dependientes en  $T_{comb}$ ,  $T_{ref}$ ,  $N_{ref}$  y el valor del quemado  $B$  a partir de tablas de secciones eficaces proporcionadas por DIFRA (departamento de División de Física de Reactores Avanzados de CNEA).

La evolución temporal se discretiza en intervalos de 10 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 termohidráulico<sup>7</sup>. El cálculo termohidráulico arroja variables promediadas en cinco zonas axiales diferentes del canal. En el cálculo neutrónico, también se definen cinco zonas axiales, 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 en cada una de las cinco zonas axiales. 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  $P_i$ , es decir, en total, veinte incógnitas de acoplamiento. En la Figura 3.22 se esquematiza esta 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.

El modelo neutrónico es resuelto con **Fermi** [41]. **Fermi** es un código de núcleo que calcula el flujo neutrónico a un grupo de energía a partir de un esquema de elementos finitos de la ecuación 3.19. Las ecuaciones modelos presentadas en 3.22, 3.24, 3.25 y 3.26

---

<sup>7</sup> 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.