

ACOPLAMIENTO MUTIESCALA EN CÁLCULOS FLUIDODINÁMICOS

Federico Agustín Caccia^{a,b} y Enzo Dari^{a,b,c}

^a*Departamento Mecánica Computacional, Centro Atómico Bariloche, 8400 Bariloche, Río Negro, Argentina, <http://mecom.cnea.gov.ar/>, cacciaf@cab.cnea.gov.ar, darie@cab.cnea.gov.ar*

^b*Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, 8400 Bariloche, Río Negro, Argentina, <http://www.ib.edu.ar/>*

^c*CONICET, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas*

Palabras Clave: Acoplamiento fuerte, modelado multiescala, fluidodinámica computacional, método de elementos finitos.

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.

1. INTRODUCCIÓN

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 apropiadas (Leiva y Buscaglia, 2006, P.J. Blanco et al., 2010 y Leiva et al., 2011). En la Sección 2 se presenta este enfoque: se plantean las ecuaciones que surgen al dividir el sistema mediante interfaces con condiciones de borde dinámicas, y luego se presentan alternativas numéricas para la resolución del sistema planteado. En la Sección 3 se presentan dos ejemplos de aplicación de esta herramienta. El primero es un sistema fluídico cerrado que se estudia subdividiéndolo en dos subsistemas con dos interfaces de acople. El movimiento del fluido está gobernado por fuerzas naturales y por lo tanto interesa acoplar variables de caudal, presión, temperatura y flujo de calor en cada interfaz. El siguiente sistema de estudio es el vaciado del tanque reflector de un reactor de investigación. Interesa analizar los tiempos de descarga ya que el mismo es diseñado como Segundo Sistema de Parada (SSP). El modelado multiescala del mismo fue abordado previamente analizando el detalle tridimensional del movimiento del fluido en el tanque (Rechiman et al., 2014), modelando la red hidráulica acoplada mediante ecuaciones cero-dimensionales. En este caso se estudia el detalle fluídico tridimensional en un componente de la red hidráulica, acoplado con condiciones de borde dinámicas a un modelo cero-dimensional que representa el resto del sistema. Finalmente, en la última sección se resumen las principales características de la herramienta presentada.

2. ABORDAJE DEL MODELADO

2.1. Desglosado del sistema original en subsistemas acoplados

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

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

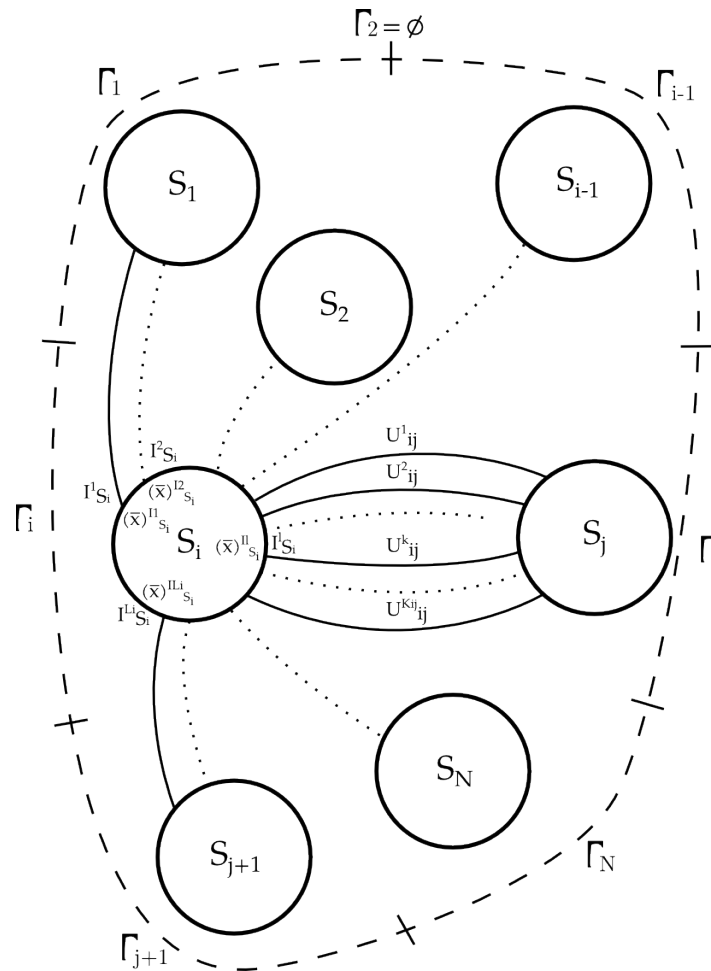


Figura 1: Esquema de subsistemas de estudio relacionados mediante condiciones de borde dinámicas en interfaces de acoplamiento.

En principio, existen tantas incógnitas como valores de variables en cada interfaz. Sin embargo, es posible notar que la unión $U_{i,j}^k$ que relaciona los sistemas S_i y S_j mediante las interfaces $I_{S_i}^1$ e $I_{S_j}^2$ respectivamente, define una relación de continuidad entre las incógnitas $(x_m)_{S_i}^{I_{S_i}^1}$ y $(x_m)_{S_j}^{I_{S_j}^2}$ ¹, de tal forma que:

$$(x_m)_{S_i}^{I_{S_i}^1} = (x_m)_{S_j}^{I_{S_j}^2} \tag{1}$$

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

¹Las 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:

$$(q^n)_{S_i}^{I_{S_i}^1} = -(q^n)_{S_j}^{I_{S_j}^2}$$

valor de otras incógnitas y de los datos de contorno sobre la frontera exterior Γ_i :

$$(x_m)_{S_i}^{I_l} = (F_m)_i^l \left((\bar{x})_{S_i}^{I_1}, (\bar{x})_{S_i}^{I_2}, \dots, (\bar{x})_{S_i}^{I_{L_i}}, (\alpha_i(\Gamma_i)) \right) \quad (2)$$

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

2.2. Sistema de ecuaciones a resolver

Restando el lado derecho en (2) a ambos lados, se obtienen relaciones del tipo $(R_m)_i^l = 0$, para cada incógnita m de cada interfaz l del subsistema i . Debido a las relaciones de continuidad (1), es posible descartar ecuaciones, seleccionándolas de tal forma que el sistema de ecuaciones en cada subsistema quede bien planteado, como se explica más adelante. El sistema global de ecuaciones restante se reduce a la siguiente expresión:

$$\bar{R} = \bar{0} \quad (3)$$

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

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

Existen diferentes estrategias para hallar las raíces del sistema (3). La forma clásica es el conocido método *Dirichlet – to – Neumann*. En este método los valores tentativos para las condiciones de borde que son datos en cada subsistema no pueden elegirse arbitrariamente. Las interfaces $I_{S_i}^{l_1}$ y $I_{S_j}^{l_2}$ comunes a cada unión $U_{i,j}^k$ deben alternar condiciones de borde de tipo Dirichlet y de tipo Neumann para las ecuaciones que relacionan las mismas variables de estado. Por ejemplo, en el subsistema S_1 se calcula el campo de temperaturas a partir de una condición de tipo Neumann (flujo de calor) en la interfaz $I_{S_1}^{l_1}$. Luego el valor de temperatura resuelto en la interfaz, se fija como condición de borde de tipo Dirichlet en la interfaz $I_{S_2}^{l_2}$ de S_2 . A partir de este dato se calcula en S_2 el flujo de calor en la interfaz, que pasa nuevamente como condición de borde de tipo Neumann a S_1 , y así sucesivamente. En general, esta estrategia toma demasiadas iteraciones.

Otra forma de resolver el problema es haciendo un desarrollo de Taylor de las ecuaciones para los residuos y truncando los términos superiores al primer orden. El sistema de ecuaciones resultantes puede resolverse entonces mediante el método de Newton. El problema es que para utilizar este método se requiere la construcción de la matriz jacobiana en cada paso de tiempo, lo cual es demasiado costoso. Una sencilla aproximación mediante diferencias finitas de primer orden de cada elemento de la matriz jacobiana requiere una primera resolución del paso temporal por parte de cada código, y luego otras tantas resoluciones extras del mismo paso temporal

como tantas incógnitas existan, ya que deben evaluarse perturbaciones en todas las variables. En el caso analizado de la cavidad acoplada al intercambiador de calor se requerirían nueve iteraciones extras en cada paso temporal. Este método, por tanto, es excesivamente costoso.

Una forma alternativa y elegante de resolver el sistema de ecuaciones antes planteado es mediante métodos cuasi-Newton. Estos métodos tienen convergencia superlineal, y por lo tanto se ubican entre los métodos presentados anteriormente en orden de eficiencia. Sin embargo, representan una mejora respecto del método de Newton ya que aproximan la matriz jacobiana sin necesidad de realizar iteraciones extras. El método de Broyden es uno de ellos (Broyden, 1965). También existe otra variante del método, el método de Broyden Ortonormal. En esta versión se asegura que la resolución converge en N iteraciones, donde N es la dimensión de la matriz jacobiana (Dennis y Shnabel, 1996).

2.4. Evolución temporal

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

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

3. EJEMPLOS DE APLICACIÓN

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 por separado, 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 debajo 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 (Buscaglia et al., 2004). En la Figura 2 puede apreciarse un diagrama del sistema.

En cada interfaz de acople existen incógnitas de caudal, presión, temperatura y flujo de calor. Por lo tanto el sistema queda definido por ocho ecuaciones de continuidad de campos de variables y ocho ecuaciones de residuos que relacionan las incógnitas de forma similar a la que se presentó en la sección 2.

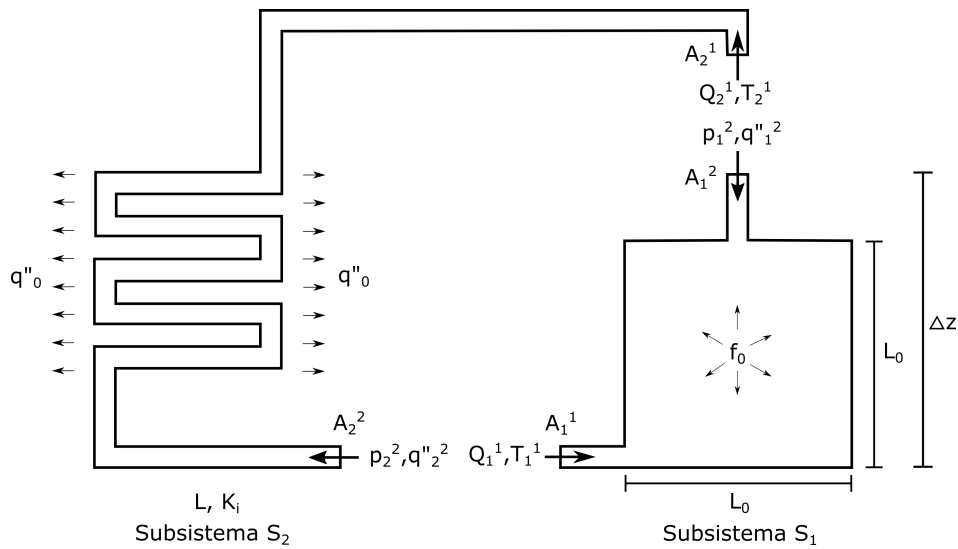


Figura 2: Esquema del sistema analizado. El subsistema de la izquierda es un intercambiador de calor y se estudia con un código cero-dimensional. El modelo de la derecha es una cavidad con una fuente de energía interna y se estudia con un código bi-dimensional. El sistema completo es abordado con una estrategia de acoplamiento mediante condiciones de borde dinámicas. En el esquema se ejemplifica una de las elecciones posibles para las variables que son dato en cada subsistema.

Las ecuaciones de continuidad en las interfaces implican que:

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_1^1 = Q_2^2 \\ Q_1^2 = Q_2^1 \\ p_1^1 = p_2^2 \\ p_1^2 = p_2^1 \\ T_2^1 = T_2^2 \\ T_2^2 = T_2^1 \\ q''_2^1 = -q''_2^2 \\ q''_2^2 = -q''_2^1 \end{array} \right. \quad (4)$$

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. 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. sí entonces, entre las dos interfaces del subsistema 1 se generan 4 ecuaciones de residuos ²: $(R_m)_i^l = 0$,

$$\left\{ \begin{array}{l} (R_{p,Q})_1^1 (Q_1^1, p_1^1, T_1^1, Q_1^2, p_1^2, T_1^2) = 0 \\ (R_{T,q''})_1^1 (Q_1^1, T_1^1, q''_1^1, Q_1^2, T_1^2, q''_1^2) = 0 \\ (R_{p,Q})_1^2 (Q_1^1, p_1^1, T_1^1, Q_1^2, p_1^2, T_1^2) = 0 \\ (R_{T,q''})_1^2 (Q_1^1, T_1^1, q''_1^1, Q_1^2, T_1^2, q''_1^2) = 0 \end{array} \right. \quad (5)$$

² 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'' .

y entre las dos interfaces del subsistema 2 se generan otras 4 ecuaciones de residuos:

$$\left\{ \begin{array}{l} (R_{p,Q})_2^1 (Q_2^1, p_2^1, T_2^1, Q_2^2, p_2^2, T_2^2) = 0 \\ (R_{T,q''})_2^1 (Q_2^1, T_2^1, q''_2^1, Q_2^2, T_2^2, q''_2^2) = 0 \\ (R_{p,Q})_2^2 (Q_2^1, p_2^1, T_2^1, Q_2^2, p_2^2, T_2^2) = 0 \\ (R_{T,q''})_2^2 (Q_2^1, T_2^1, q''_2^1, Q_2^2, T_2^2, q''_2^2) = 0 \end{array} \right. \quad (6)$$

Notar que según la estrategia de acoplamiento seleccionada, algunas de las dependencias pueden anularse. En la Figura 2 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 $(R_{p,Q})_2^1 = 0$ 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 $L = 30 m$, sumatoria de coeficientes de pérdida de carga concentrada $\sum K_i = 1,72$, rugosidad de cañerías $\epsilon = 0,5 \cdot 10^{-3} m$. Las áreas de las interfaces de acople son $A_2^1 = A_2^2 = 0,03 m^2$. La altura total Δz 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 (Jedelchik, 1960) y de transferencia de energía en un intercambiador de calor con flujo constante (Kays y Crawford, 1993):

$$\left\{ \begin{array}{l} p_1^2 + \rho g \Delta z = p_2^2 + \rho \Delta u \\ \Delta u = \frac{1}{2} \left(\frac{Q_1^1}{A_2^1} \right)^2 \left(\frac{f_D L}{D} + \sum_i K_i \right) \\ T_2^2 = T_2^1 + 2 \frac{q_0'' L}{\frac{D}{2} \frac{Q_1^1}{A_2^1} \rho c_p} \end{array} \right. \quad (7)$$

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.

La cavidad bidimensional se modela con $L_0 = 0,3 m$, y $A_1^1 = A_1^2 = 0,03 m^2$. El fluido de relleno es agua ($\rho_0 = 10^3 Kg/m^3$, $\mu = 6 \cdot 10^{-4} Kg/ms$, $c_p = 4184 J/KgK$, $k = 0,64 W/mK$, $\beta = 0,44 \cdot 10^{-3} K^{-1}$), y con fuente interna $f_0 = 10^6 W/m^3$. La evolución de las variables $\{p, Q, T, q''\}$ en este subsistema se calcula resolviendo las ecuaciones de Navier-Stokes (Gunzburger, 1989) y de transporte de energía (Kays y Crawford, 1993). Se utiliza la aproximación

de Boussinesq considerando variaciones de densidad solo en el término de fuerza volumétrica:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) \bar{u} + \frac{\nabla p}{\rho_0} - \nabla \cdot [(\nu + \nu_T) (\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T)] \\ \quad \quad \quad - (1 - \beta(T - T_{ref})) \bar{g} = 0 \\ \quad \quad \quad \nabla \cdot \bar{u} = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) T = 0 - \frac{k}{\rho_0 c_p} \Delta T = \frac{f_0}{\rho_0 c_p} \end{array} \right. \quad (8)$$

donde ρ_0 es la densidad del fluido a la temperatura de referencia T_{ref} .

Las paredes imponen condiciones de no deslizamiento para las ecuaciones de Navier-Stokes y de flujo de energía nulo para la ecuación de temperatura. Las ecuaciones (8) se resuelven mediante una formulación de elementos finitos, con elementos lineales para aproximar tanto presiones, como velocidades y temperaturas, estabilizando con el método SUPG/PSPG (Cordina, 1998 y Hughes et al., 1986).

La malla de cálculo se genera con Gmsh (Geuzaine y Remacle, 2016) y se discretiza el dominio en 43874 elementos triangulares con un $\Delta x \approx 0,005m$.

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

Resultados del cálculo

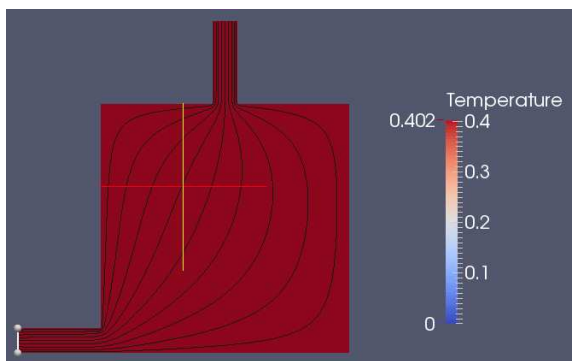


Figura 3: t=0 s

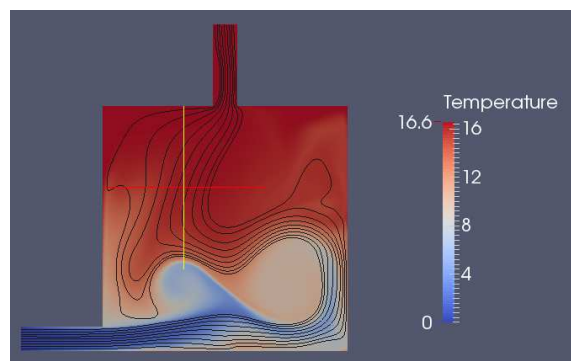


Figura 4: t=40 s

Figura 5: 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.

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 , (Buscaglia y Dari, 2003), 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 5 y 8 pueden observarse la evolución de las líneas de corriente y del campo de temperatura en la cavidad bidimensional.

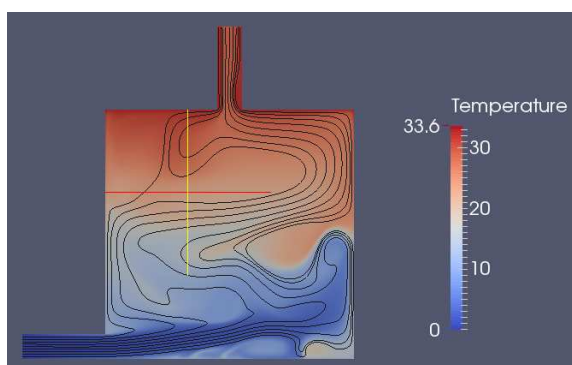
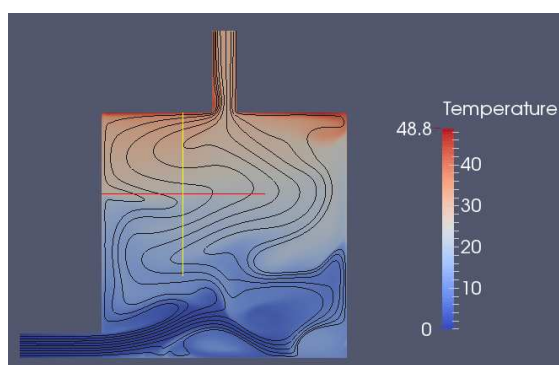
Figura 6: $t=80$ sFigura 7: $t=250$ s

Figura 8: 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.

Análisis de métodos de resolución del sistema de ecuaciones de residuos

Se exploran los métodos mencionados para resolver el sistema de residuos presentado en el modelado multiescala de la cavidad bidimensional acoplada al intercambiador de calor. En la Figura 9 puede apreciarse la cantidad de iteraciones requeridas por cada método descripto para disminuir los residuos debajo de cierta tolerancia prefijada, para cada paso temporal. El método de Newton necesita inicializar la matriz jacobiana en cada paso temporal, y por lo tanto requiere siempre nueve iteraciones extras. Puede observarse que la cantidad de iteraciones reales del método para converger es en promedio una sola. Los métodos cuasi-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 mediante diferencias finitas. En las simulaciones realizadas 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 los nueve llamados extras a códigos en cada paso de reinicialización.

No es posible hallar aquí diferencia alguna entre el método de Broyden original y el método de Broyden ortonormal, pero demuestran ser más eficientes que el método clásico. El método *Dirichlet - to - Neumann* es el que mayor cantidad de iteraciones reales necesita por cada paso temporal, excediendo el doble de los pasos requeridos por los métodos cuasi-Newton.

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

Presentación del problema

La estrategia de análisis presentada puede aplicarse al estudio del vaciado del tanque reflector del reactor RA-10 como Segundo Sistema de Parada (SSP). El drenado del material reflector (agua pesada) disminuye drásticamente la reactividad, apagando el reactor. Es de interés 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).

La Figura 10 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 equalización de presiones. En operación normal del reactor las válvulas que pueden observarse en la red hidráulica

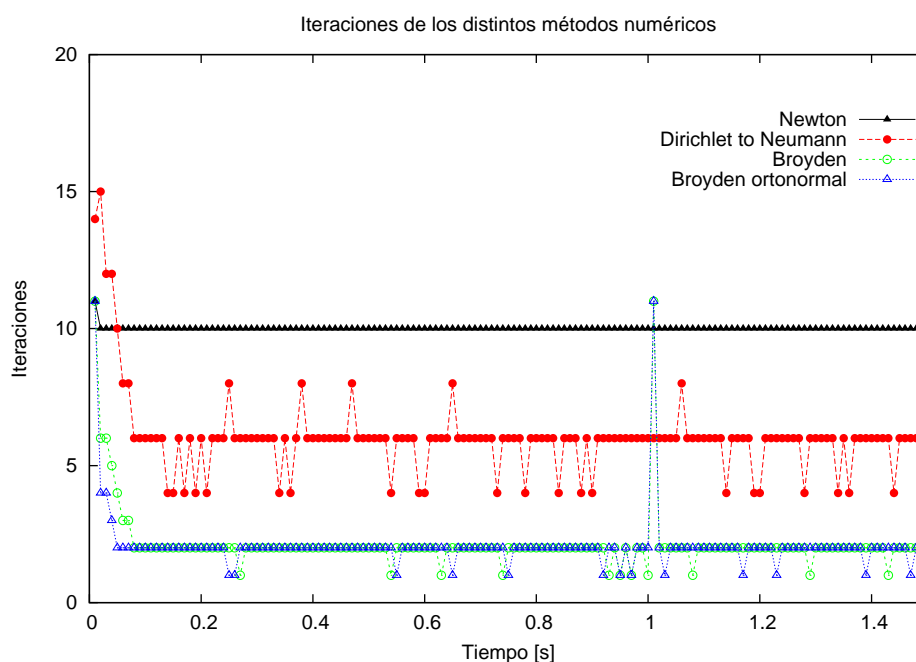


Figura 9: Iteraciones requeridas por diversos métodos numéricos para resolver los sistemas de ecuaciones de residuos planteados en el problema doblemente acoplado descrito de la fuente fría de neutrones.

permanecen cerradas, y el agua pesada rellena las cañerías y el tanque de reflector. El resto del sistema es relleno con gas Helio, excepto una porción del tanque de expansión que también permanece 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, relleno el volumen desplazado de líquido.

La simulación del problema completo demandaría elevados recursos computacionales debido a los requerimientos de malla. Por ello se propone desarrollar un modelo multiescala del sistema, desacoplándolo en subsistemas que pueden estudiarse por separado, aplicando la estrategia presentada en este trabajo para acoplarlos mediante condiciones de borde apropiadas. El SSP del RA10 se divide en tres subsistemas:

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

Como validación de las herramientas para el cálculo de la evolución de la descarga, se estudia un problema muy similar en el que se conocen datos experimentales del tiempo de vaciado, y sirve a modo de problema modelo para contrastar los resultados obtenidos. Este problema es el vaciado del tanque del reflector del mockup del reactor OPAL, montado por INVAP en San Carlos de Bariloche, (Invap, 2013).

Debido a que el mockup del OPAL está abierto a la atmósfera, la línea de equalización de presiones no está presente y por lo tanto no es considerada en este estudio.

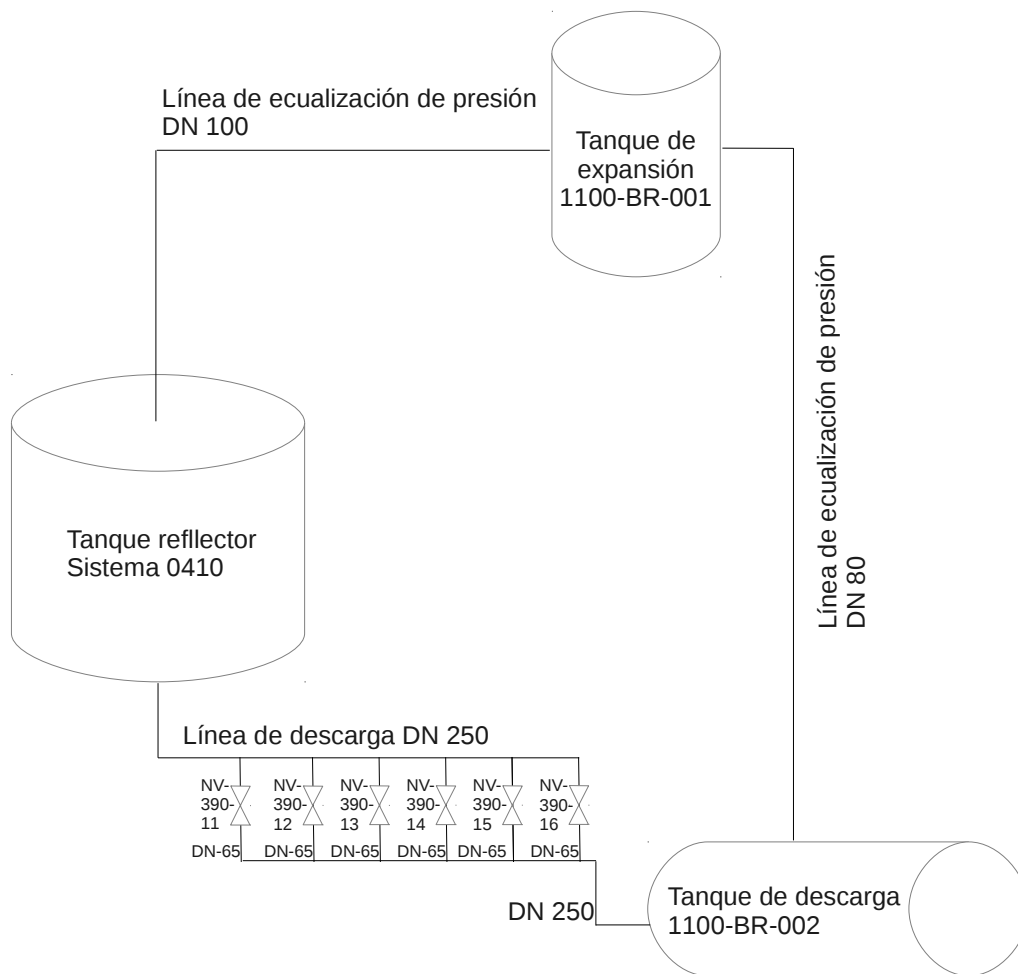


Figura 10: Esquema del segundo sistema de parada del reactor RA10.

Subsistemas de estudio

En estudios previos 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 (Rechiman et al., 2014). Es de interés ahora estudiar con mayor detalle la distribución de caudales a través del arreglo de válvulas, ya que si bien existen factores de pérdida de carga concentrada tabulados para diferentes geometrías, no existe un valor tabulado para el arreglo de codos y tuberías presente en la configuración de válvulas del SSP. La pérdida de carga se construyó de manera aproximada a partir de valores en tés y codos.

Se proponen entonces 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 caudal y presión. 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:

$$\begin{cases} p_1^1 = p_2^1 \\ Q_1^1 = Q_2^1 \end{cases} \quad (9)$$

Se selecciona la siguiente estrategia: que el subsistema tanque del reflector tenga una condición de borde tipo Neumann en la interfaz, y que el subsistema arreglo de válvulas tenga una

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

Tabla 1: Parámetros del subsistema del tanque del reflector con acople de sección de red hidráulica

condición de tipo Dirichlet. Las ecuaciones de residuos quedan entonces:

$$\begin{cases} (R_{p,Q})_1^1 (p_1^1) = 0 \\ (R_{p,Q})_2^1 (Q_2^1) = 0 \end{cases} \quad (10)$$

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 (Bird et al., 2002):

$$\ddot{h}h + \frac{\dot{h}^2}{2} \left(1 - \left(\frac{A_T}{A_D} \right)^2 \right) + g\Delta h_{red} + \ddot{h}l_D = \frac{p_{atm} - p_1^1}{\rho} + \Delta \hat{u} \quad (11)$$

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, Δh_{red} es la altura total de la columna de líquido en el subsistema, l_D es la longitud total de cañerías en el subsistema, p_{atm} es la presión sobre la superficie libre, y ρ es la densidad del agua. Δu representa la pérdida de carga por unidad de masa y puede modelarse como:

$$\Delta u = \frac{1}{2}v_D^2 \left(\frac{f_D l_D}{D} + \sum_i K_i \right) \quad (12)$$

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

La Tabla 1 reúne los parámetros del subsistema. Los datos geométricos pueden consultarse en las referencias (Invap, 2013). El factor de pérdida de carga concentrada fue calculado en función de estos datos geométricos (Iedelchik, 1960), 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 (11) para un dado valor de tiempo, el caudal de descarga Q_1^1 puede calcularse simplemente como:

$$Q_1^1 = -\dot{h}A_D \quad (13)$$

El subsistema arreglo de válvulas es modelado con una malla tridimensional de elementos tetraédricos realizada en Salomé (CEA/DEN y CASCADE, 2016). 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. 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 (Invap, 2013).

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 el modelo de turbulencia de tipo RANS $\kappa - \epsilon$ para modelar la fricción interna del fluido. Las ecuaciones se estabilizan mediante un método de control de coeficientes (Lew et al., 2001). El sistema de ecuaciones resultantes en el segundo subsistema es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + (\bar{U} \cdot \nabla) \bar{U} + \frac{\nabla P^*}{\rho} - \nabla \cdot [(\nu + \nu_T) (\nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T)] - \bar{f} = 0 \\ \nabla \cdot \bar{U} = 0 \\ \nu_T - c_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} = 0 \\ \frac{\partial \kappa}{\partial t} + (\bar{U} \cdot \nabla) \kappa - \frac{c_\mu \kappa^2 \epsilon}{2} |\nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T|^2 - \nabla \cdot \left(c_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \nabla \kappa \right) + \epsilon = 0 \\ \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + (\bar{U} \cdot \nabla) \epsilon - \frac{c_1}{2} \kappa |\nabla \bar{U} + \nabla \bar{U}^T|^2 - \nabla \cdot \left(c_\epsilon \frac{\kappa^2}{\epsilon} \nabla \epsilon \right) + c_2 \frac{\epsilon}{\kappa} = 0 \end{array} \right. \quad (14)$$

donde \bar{f} es una fuerza volumétrica, κ es la energía cinética turbulenta, ϵ es la disipación viscosa de energía turbulenta, ν_T es la viscosidad turbulenta y P^* es la presión efectiva del sistema, que se calcula como $P^* = P + \frac{2}{3} \kappa$. Las variables mayúsculas refieren a valores medios estadísticos. Los parámetros de las ecuaciones de transporte de κ y ϵ toman los siguientes valores: $c_\mu = 0,09$, $c_1 = 0,126$, $c_2 = 1,92$ y $c_\epsilon = 0,07$ (Durbin y Reif, 2011).

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 (Mohammadi y Pironneau, 1994). Este modelo impone condiciones de tipo Dirichlet para κ y ϵ en la frontera en que se impone la ley de pared. Las condiciones de borde al ingreso de la cañería dependen del valor Q_2^1 impuesto, que define las velocidades 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 κ y ϵ en la interfaz. En la descarga de la cañería se impone una fuerza normal que depende de la presión atmosférica.

El sistema de ecuaciones (14) es resuelto en pasos fraccionados mediante una formulación de elementos finitos con elementos lineales, estabilizada mediante SUPG/PSPG ((Codina, 1998) y (Hughes et al., 1986)). En el primer paso fraccionado se resuelve el transporte de κ , en el segundo paso se resuelve el transporte de ϵ , y en el último paso se resuelven en forma monolítica las ecuaciones de Navier-Stokes (en (Lew, 1998) se detalla la implementación).

Una vez resueltas las ecuaciones es posible calcular el valor de la presión p_2^1 en la interfaz

I_{21} :

$$p_2^1 = P_{I_2}^* - \frac{2}{3} \kappa_{I_2}^1 \quad (15)$$

Resultados del cálculo

Se realizan simulaciones utilizando dos mallas con diferente refinamiento para el modelo tri-dimensional, con fines de obtener convergencia de los resultados. La primera es una malla con $\Delta x = 0,01m$ y 1145659 de elementos. La segunda es una malla más fina, con $\Delta x = 0,008m$ y 1806202 elementos. Se utiliza $\Delta t = 0,01s$ en los cálculos. Las ecuaciones de residuos se resuelven mediante el método de Broyden ortogonal, con reinicialización de la matriz jacobiana cada 100 pasos temporales.

En la Figura 11 se observa la evolución de la altura de la superficie libre del líquido en el tanque obtenida en las dos simulaciones. Comparativamente se reportan también los valores obtenidos acoplando el modelo cero-dimensional del tanque a un modelo cero-dimensional que modela la pérdida de carga en el arreglo de válvulas, y los resultados del cálculo en el que se modela el transporte de gas en las cañerías (se comenta en el siguiente apartado). También se muestran los valores experimentales reportados en la referencia (Invap, 2013).

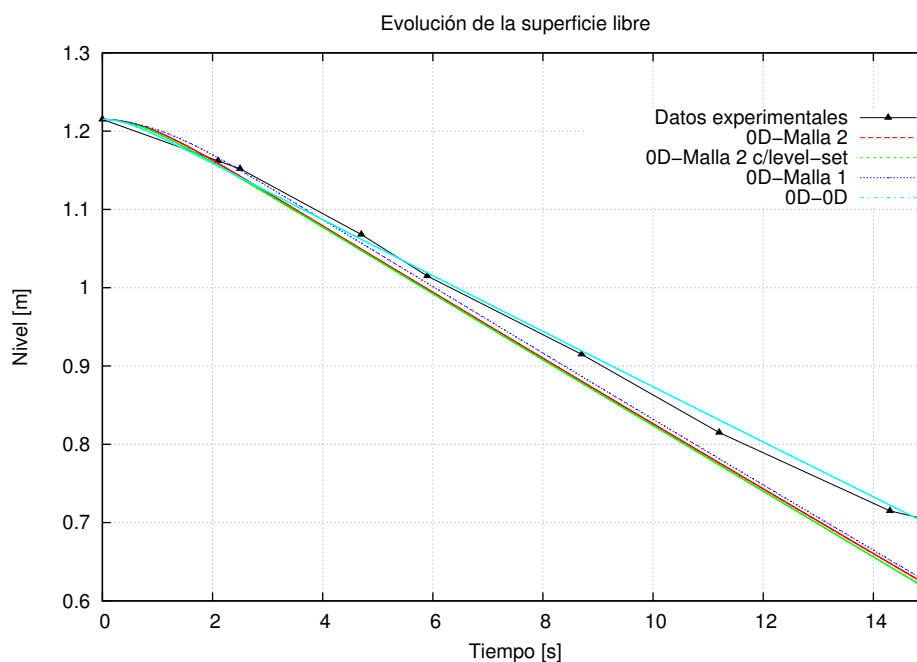


Figura 11: Evolución del nivel de líquido en el mockup del tanque del reflector ante accionamiento del SSP.

Puede notarse cómo la evolución simulada modela la dinámica hallada experimentalmente. Durante los primeros segundos los resultados del cálculo imitan al experimento. Luego comienzan a separarse. Sobre el final esto puede explicarse considerando la geometría del tanque del reflector. 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.

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 12 se compara la evolución de la superficie libre ante fallas en la primera, la tercera y la sexta válvula. Como puede observarse no se notan diferencias considerables en la evolución de la descarga. La pérdida de carga total del arreglo de válvulas apenas llega a ser sensible a la válvula que falla.

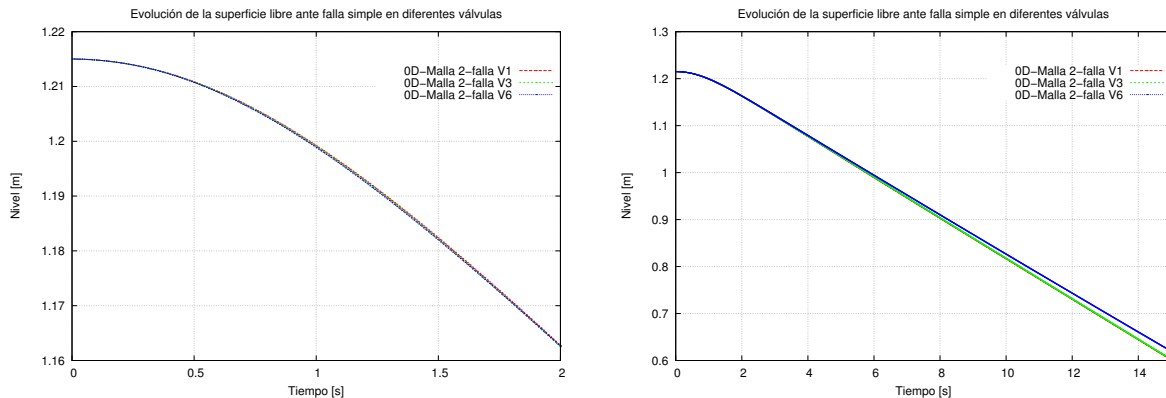


Figura 12: Comparación de la evolución del nivel de líquido en el mockup del tanque del reflector ante accionamiento del SSP considerando falla simple en diferentes válvulas.

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 (Osher y Fedkiw, 2003). Para ello se añade un paso fraccionado extra al sistema de ecuaciones (14):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \phi}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \nabla) \phi = 0 \end{array} \right. \quad (16)$$

donde ϕ es el campo que representa la distancia con signo de cada punto a la superficie libre. Las porciones del sistema con líquido tienen ϕ positivo y las porciones con gas tienen ϕ negativo. ϕ tiene valor nulo en la superficie libre. La ecuación (16) 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 (Ausas et al., 2011). El campo del level set es reinicializado mediante cálculos geométricos cada 10 pasos temporales.

En la Figura 11 se compara la evolución obtenida de la superficie libre con los resultados anteriores, y en la Figura 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.

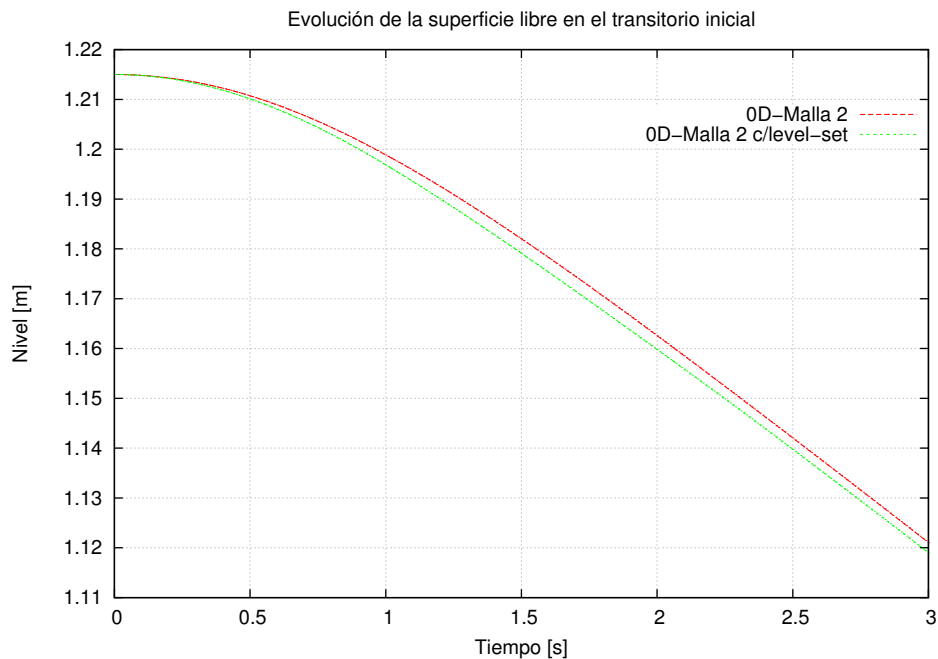


Figura 13: Evolución del nivel de líquido en el mockup del tanque del reflector ante accionamiento del SSP durante el transitorio inicial. Se comparan la solución obtenida despreciando el gas en la cañería y la obtenida con transporte de level-set.

En la Figura 14 se observa la evolución de la superficie libre durante los primeros instantes de tiempo.

4. CONCLUSIONES

El análisis de sistemas complejos puede abordarse desglosándolo en subsistemas correctamente acoplados mediante condiciones de borde dinámicas.

Las aplicaciones presentadas en este trabajo demuestran el éxito de la técnica permitiendo el estudio detallado de ciertos componentes, sin dejar de lado la dinámica global de los sistemas completos, que son modelados con ecuaciones cero-dimensionales que derivan de balances de energía y masa.

El estudio del sistema hidráulico cerrado permitió comparar diferentes métodos numéricos en la resolución de sistemas de ecuaciones de acoplamiento. El método de Broyden demostró su eficiencia frente al clásico método *Dirichlet – to – Neumann* y al método de Newton.

Finalmente la técnica pudo ser aplicada al estudio de un componente industrial, analizando diferentes escenarios que hubieran requerido excesivo tiempo de cálculo si se hubiera necesitado modelar el sistema completo.

REFERENCIAS

- Ausas R.F., Buscaglia G.C., y Idelsohn S.R. A new enrichment space for the treatment of discontinuous pressures in multi-fluid flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2011.
- Bird R., Stewart W., y Lightfoot E. *Transport Phenomena, 2nd Edition*. 2002.
- Broyden C. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations. *American Mathematical Society*, 19:577–593, 1965.

- Buscaglia G.C. y Dari E.A. Numerical investigation of flow through a cavity with internal heat generation. *Numerical Heat Transfer*, páginas 525–541, 2003.
- Buscaglia G.C., Dari E.A., Martín E.J., Arnica D.L., y Bonetto F.J. Finite element modeling of liquid deuterium flow and heat transfer in a cold-neutron source. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 18:355–365, 2004.
- CEA/DEN E.R. y CASCADE O. Salome version 7.8.0: Public release announcement. 2016.
- Codina R. Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 156:185–210, 1998.
- Dennis J. y Shnabel R. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. 1996.
- Durbin P. y Reif B.P. *Statistic Theory and Modeling for Turbulent Flows*. 2011.
- Geuzaine C. y Remacle J.F. Gmsh reference manual. 2016.
- Gunzburger M.D. *Finite Element Methods for Viscous Incompressible FLOws*. 1989.
- Hughes T., Franca L., y Balestra M. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: V. circumventing the babuška-brezzi condition: a stable petrov-galerkin formulation of the stokes problem accomodating equal-order interpolations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 59:85–99, 1986.
- Iedelchik I. *Handbook of Local Resistance and Friction*. 1960.
- Invap. Segundo sistema de parada - validación del cfd para drenaje del tanque reflector. 2013.
- Kays W. y Crawford M. *Convective Heat and Mass Transfer, 3rd Edition*. 1993.
- Leiva J.S., Blanco P.J., y Buscaglia G.C. Partitioned analysis for dimensionally-heterogeneous hydraulic networks. *Multiscale Model. Simul.*, 9:872–903, 2011.
- Leiva J.S. y Buscaglia G.C. Estrategias de acoplamiento entre códigos 0d/1d and códigos cfd 3d. *Mecánica Computacional*, XXV:53–82, 2006.
- Lew A.J. El método de elementos finitos en entornos computacionales de alta performance. *Trabajo Especial Carrera de Ingeniería Nuclear, Instituto Balseiro*, páginas 57–64, 1998.
- Lew A.J., Buscaglia G.C., y Carrica P.M. A note on the numerical treatment of the k-epsilon turbulence model. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 2001.
- Mohammadi B. y Pironneau O. *Analysis of the K-Epsilon TURBULENCE MODEL*. 1994.
- Osher S. y Fedkiw R. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. 2003.
- P.J. Blanco J.L., Feijóo R., y Buscaglia G. Black-box decomposition approach for computational hemodynamics: One-dimensional models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200:1389–1405, 2010.
- Rechiman L., Cantero M., y Dari E. Hydrodynamic transient assesment of a draining tank. *Mecánica Computacional*, 2014.



Figura 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 relleno las cañerías hasta la posición de las válvulas. Al otro lado el gas (blanco) rellena el resto de la red hidráulica.