

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1983

08.83.04

CNEA-NT 26/83

REPUBLICA ARGENTINA
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
Dependiente de la Presidencia de la Nación
CENTRO ATOMICO BARILOCHE
Sección Termohidráulica

NUEVAS OPCIONES PARA EL CODIGO COBRA-IV-1
UNA VERSION CON CAPACIDAD DE REDIMENSIONAMIENTO
IBM COMPATIBLE

M. Susevich y J. Converti

Buenos Aires
1983

Nuevas opciones para el código COBRA-IV-i
Una versión con capacidad de redimensionamiento
IBM compatible

M. Susevich

J. Conventi

Sección termohidráulica. Centro Atómico Bariloche.

Resumen

El presente trabajo se origina en un requerimiento de la empresa ENCE para solucionar distintos problemas que se suscitaron al calcular geometrías de reactores HWK con el código COBRA.

Como resultado se han ~~implementado~~^{implantado} nuevas opciones que permiten calcular mas eficientemente problemas con caída de presión especificada en el canal y problemas con un número grande de subcanales.

Estas opciones se encuentran implementadas en una versión a la cual se ha llamado redimensionable ya que por medio de un programa auxiliar se puede ajustar las dimensiones de los numerosos arreglos del código al tamaño del caso que se desea calcular.

La versión redimensionable, el programa auxiliar y un archivo de datos necesario para el proceso de redimensionamiento se encuentran disponibles en la Sección Termohidráulica del Centro Atómico Bariloche.

La condición DPS--Caída de presión especificada

El código CDBRA IV posee una opción que permite especificar el caudal de entrada al canal en forma aproximada y ajustar luego el valor de este para obtener una dada caída de presión en el canal. La utilidad de esta opción es muy grande para calculos de potencias críticas por ejemplo, en los cuales se aumenta la potencia y se mantiene constante la caída de presión del canal pudiéndose observar la disminución del caudal de refrigerante.

Se observó que para algunas geometrías como ser la tomada en la referencia 1, no se obtenía la convergencia ni aun después de un número muy grande de iteraciones exteriores. Este hecho llevo a estudiar detenidamente el problema.

1. Método de solución

La forma de alcanzar una dada caída de presión es variar el caudal de entrada hasta llegar al valor deseado ya que la caída de presión es una magnitud derivada de la solución, notese que de no haber flujos cruzados es posible hasta desacoplarla completamente la solución de los caudales y entalpías de la de presiones. Lo anterior conduce inevitablemente a un esquema iterativo en el cual se comienza con una primera estimación del caudal, se calcula la solución y la caída de presión y en base a la desviación de esta con respecto al valor deseado y a alguna ecuación, se corrige el caudal de entrada, repitiéndose el proceso hasta que el error sea menor que cierta cota.

2. La ecuación de corrección

Tal como se enunciara en la previa sección, es necesario derivar alguna ecuación que relacione el error en la caída de presión con la corrección que se le debe aplicar al caudal.

Esta ecuación se basa en la suposición de que la caída de presión total es la suma de dos terminos:

$$DP_{total} = DP_{gravitatorio} + DP_{dinámico} \quad (1)$$

y de que :

$$DP_{din} \approx C m^2 \quad m \approx \text{caudal de entrada} \quad (2)$$

Entonces debido a que DP_{grav} es constante:

$$m^{t+1} - m^t = \frac{dm}{d(DP_{din})} * (DP_{spec}^t - DP_{din}^t) \quad (3)$$

Donde los supraíndices indican el número de iteración y DP_{spec} es la caída de presión deseada.

$$\text{de (2)} \quad \frac{dm}{d(DP_{din})} = \frac{1}{2 C m} \quad (4)$$

y suponiendo que "C" varía poco entre dos iteraciones sucesivas

$$C \approx \frac{DP_{din}^{t+1}}{(m^{t+1})^2} \approx \frac{DP_{din}^t}{(m^t)^2} \quad (5)$$

Entonces de (4) y (5) :

$$\frac{dm}{d(DP_{din})} \approx \frac{m^t}{2 DP_{din}^t} \quad (6)$$

Substituyendo (6) y (1) en (3) se obtiene :

$$m^{t+1} = m^t * \left(1 + 0.5 \frac{DP_{spec}^t - DP_{tot}^t}{DP_{tot}^t - DP_{grav}} \right) \quad (7)$$

y se puede aproximar la caída de presión hidrostática como:

$$DP_{grav} = B * Z * \cos(\theta) * (\rho_{in} + \rho_{out}) * 0.5 \quad (8)$$

donde:

- Z = longitud del canal
- θ = ángulo con la vertical
- ρ_{in} = densidad media de entrada
- ρ_{out} = densidad media de salida

El factor B se utiliza para evitar que la solución se comporte oscilatoriamente, ya que se toma un valor menor que la unidad (usualmente 0.8) lo que reduce el valor de la corrección a realizarse, no pudiendo ser muy pequeño ya que retrasaría mucho la convergencia.

3.El método iterativo

El método que se describe a continuación es el que utiliza la subrutina SCHEME . Consiste en realizar un barrido por todas las particiones axiales en la dirección de movimiento del fluido, resolviendo en cada nivel axial los flujos cruzados, entalpías y flujos axiales.

La caída de presión se obtiene integrando el gradiente de presión a lo largo del canal. Cuando se llega a la salida se dice que ha finalizado una iteración exterior. Se llama iteraciones internas a las necesarias para resolver en cada nivel axial los sistemas de ecuaciones de entalpías y flujos cruzados.

Con el valor de caída de presión correspondiente a esta iteración se calcula la corrección al caudal de entrada por el método explicado anteriormente y se comienza una nueva iteración exterior.

El proceso se detiene cuando la variación relativa de todos los caudales entre dos iteraciones sucesivas es menor que cierta cota.

4.Problemas hallados

El proceso anteriormente descrito converge correctamente para aquellos casos de convergencia rápida cuando no se utiliza la opción DPS.

Esto es lógico ya que las correcciones al caudal de entrada se realizan desde la primera iteración y si ya esta arroja un valor de caída de presión cercano al de la solución convergida para ese caudal inicial, la corrección es aproximadamente la necesaria.

Uno de estos casos como por ejemplo el llamado FUEL THERMAL MODEL TEST , que es uno de los casos de prueba que acompañan al código converge en 5 iteraciones con el caudal fijado y en 14 iteraciones con la caída de presión fijada.

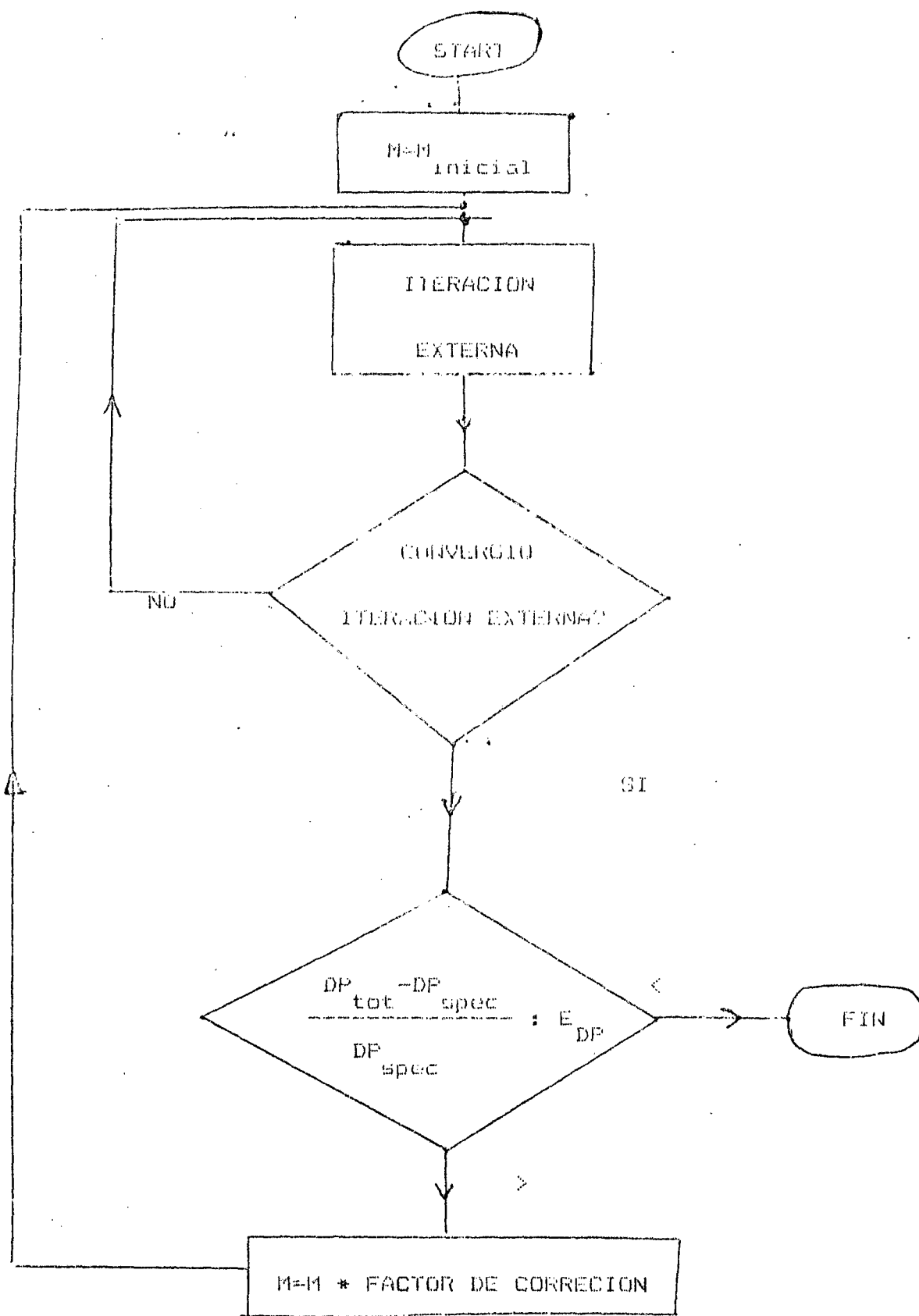
En el caso de la referencia 1 la convergencia es mucho mas lenta (16 iteraciones para caudal fijo) y 250 iteraciones especificando la caída de presión. El problema existente esta relacionado con la lentitud de la convergencia, lo que lleva que al corregirse el flujo en la primera iteración, se lo haga con un valor de caída de presión muy lejano al valor que seria la solución para ese caudal, eso hace que el caudal de entrada varíe sensiblemente. En la siguiente iteración los valores siguen muy lejos de la solución y el proceso comienza a oscilar.

En el apéndice 1 se pueden observar los resultados de las pruebas realizadas para la opción en estudio.

A traves de ellas se llegó a la conclusión de que era necesario modificar el esquema realizando un ciclo iterativo que es externo al de las iteraciones llamadas externas.

El nuevo esquema de iteraciones es algo mas lento que el original para los casos de buena convergencia pero ha demostrado su efectividad al resolver el caso de la ref. 1.

El diagrama de flujo que se observa a continuación ayuda a comprender facilmente la solución adoptada. En ella se comienza a calcular la solución como si se tratara de un caso de caudal de entrada especificado utilizando como caudal de entrada un valor que se supone arrojará una caída de presión cercana a la deseada una vez obtenida la convergencia se calcula el error en la caída de presión con respecto al valor especificado y si ese error es mayor que cierta cota se calcula un nuevo caudal inicial con las ecuaciones (7) y (8) recomenzandose el ciclo.



El problema de los autovalores

En la referencia 2 se hace mención a cálculos realizados con un número grande de subcanales que daban como resultado soluciones menos confiables a medida que se aumenta el número de subcanales.

1.El método de solución

En el esquema implícito surge la necesidad de resolver dos sistemas de ecuaciones lineales por cada nivel axial que se calcula. Estos sistemas tienen como incógnitas a las entalpías del fluido y temperaturas de pared uno, y a los caudales transversales de mezclado otro.

El método de solución es el de Gauss-Seidel y por ser un método iterativo su convergencia está relacionada con los autovalores de la matriz de iteraciones. Cuanto menor sea el máximo autovalor, más rápida será la convergencia (Ver Apéndice 1).

2.Cálculos realizados

Utilizando la geometría llamada CHAF-8 subcanales, de la referencia 1, se ha estudiado el sistema de ecuaciones de caudales de mezclado ya que el sistema de entalpías demostró una rápida convergencia a una solución con un error final muy bajo ($<10^{-6}$).

Para el sistema estudiado se han calculado los autovalores y se puede observar en los gráficos A.1 y A.2 el periodo de la matriz de iteraciones (que es el número de iteraciones necesario para reducir el error en una década) versus el parámetro S/L y versus el número de intervalos axiales.

Gráfico A.1.: Periodo de la matriz de iteraciones vs. el parámetro S/L.

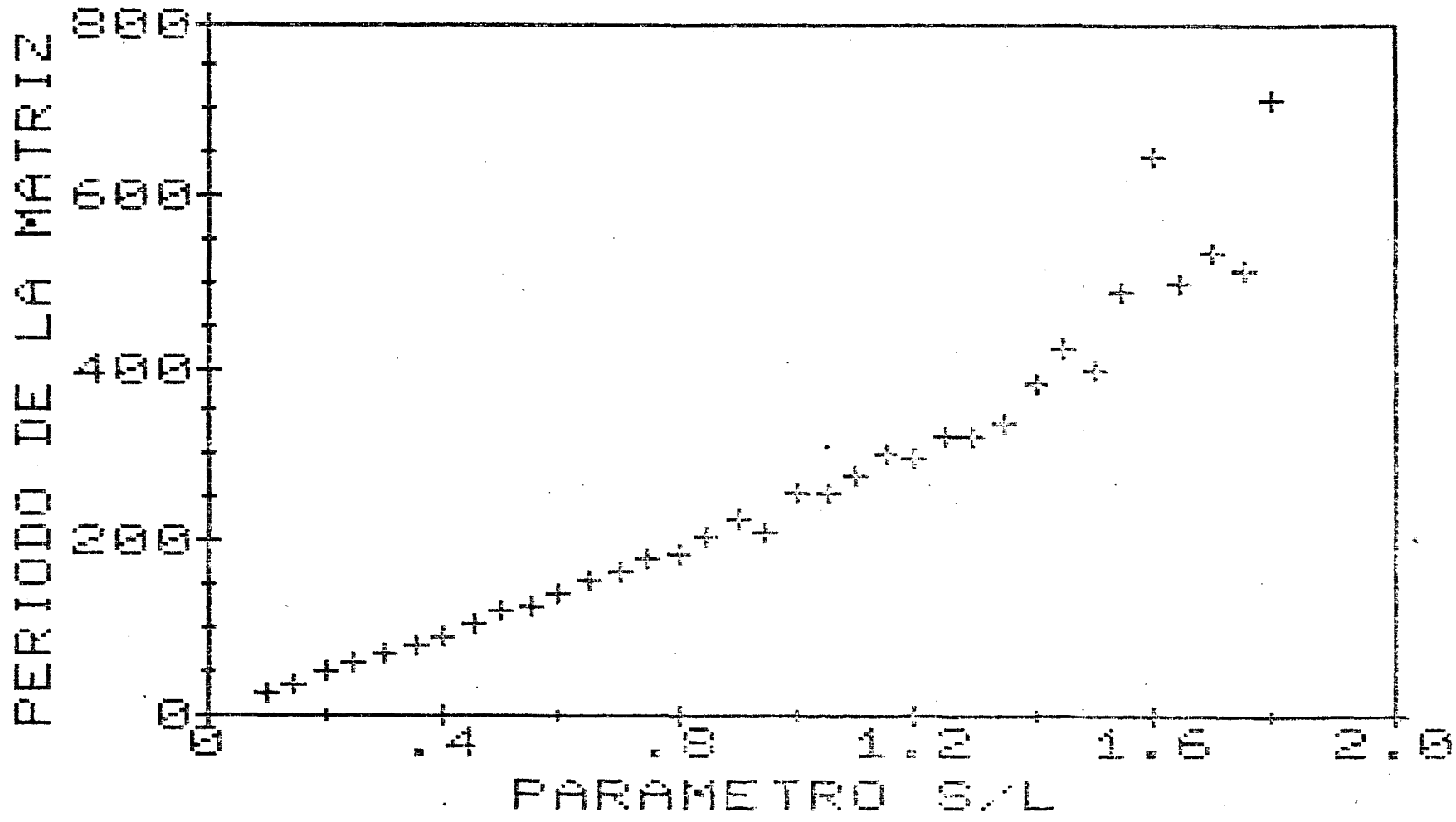
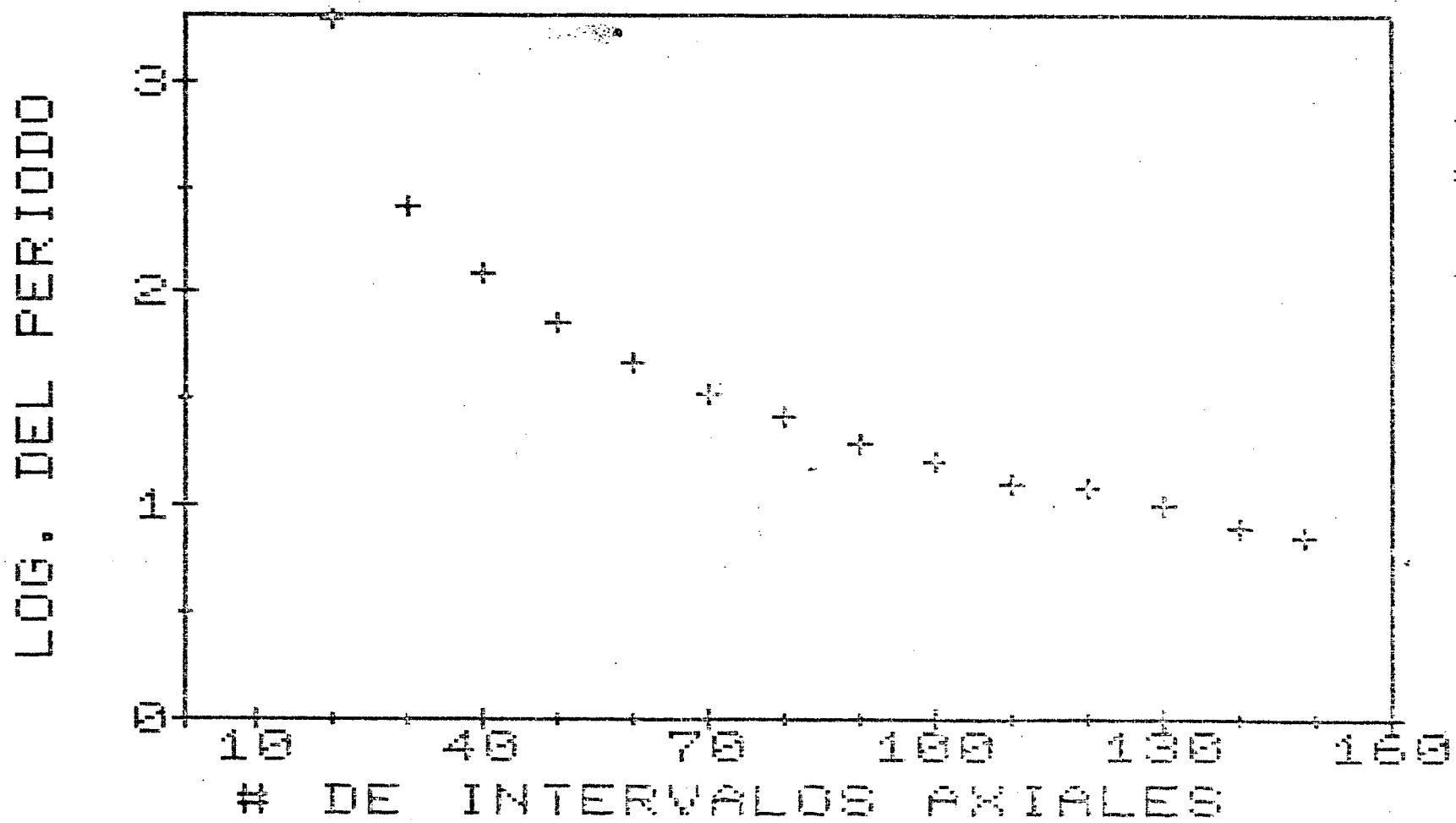


Gráfico A.2 : Período de la matriz de iteraciones vs. el número
 de particiones axiales.



3. Conclusiones

En el capítulo III se confirma la hipótesis dada por los autores de que el código de compilación de la computadora IBSI es un código estable para la obtención de autovalores.

En el capítulo IV se muestra, como era de esperar, que el período de tiempo necesario para calcular los autovalores obtenidos con el código de compilación de la computadora IBSI es proporcional al número de elementos de la matriz que se acompaña al código de compilación. El período de tiempo necesario para la obtención de los autovalores es proporcional a 10^{-4} , lo que muestra evidentemente en qué parte la geometría de la matriz de la computadora es muy rápidamente convergente.

4. Situación adoptada

De lo anterior se desprende la conclusión de que es necesario reemplazar el programa de compilación por un método de eliminación de la matriz, con lo que la calidad de la solución se independizaría de los autovalores de la matriz, que son determinados por la geometría utilizada.

La técnica de eliminación gaussiana no presenta problemas numéricos utilizando potencias de 2 bytes hasta sistemas de computación de orden 100 que es precisamente el número máximo que se podría presentar en computación de matrices tipo IBM (EI) elemento completo de la matriz de orden máximo de orden 100.

La técnica de inversión de la matriz ya es utilizada en el código COMB-III-C versión anterior del actual. Fue modificada ya que la matriz de coeficientes es de tipo real y puede ser almacenada en forma compacta lo que conduce a un significativo ahorro de memoria.

Se modificó entonces la subrutina DIVER para que cuando la variable IGELG es igual a 1, se procede a comprimir la matriz de los coeficientes y se resuelve el sistema de ecuaciones utilizando la subrutina GRS del paquete de subrutinas científicas de IBSI.

Asimismo se implemento una opción en el programa REDIM (ver ref. 3) que permite que la matriz de los coeficientes (STOREA) se sobrescriba en el vector SAVEAL lo que hace que la memoria requerida no aumente a expensas de un mayor costo en tiempo de cálculo ya que para cada nivel axial se debe grabar y recuperar la porción sobrescrita del vector SAVEAL .

Necesidad de redimensionar

La necesidad de redimensionar el código es decir de cambiar el número máximo de subcanales, barras, particiones axiales, etc., surge de que el código tal como fue recibido venía con un juego de dimensiones a las que los autores llaman "standard" y que corresponden a un problema tipo por ellos definido.

Debido a la necesidad de calcular elementos combustibles tipo CLUSTER, en los cuales no se puede asegurar una simetría desde el punto de vista de la fluidodinámica, se requiere poder definir las dimensiones de los arreglos de tal manera que el problema quepa dentro de estas y al mismo tiempo hacer un uso óptimo de la memoria disponible.

Sumado a este motivo se encuentra uno de los criterios de convergencia que establece cotas para los valores que puede adoptar la relación $(A_j/\Delta x^2)$ $j=1, N_{\text{subcanales}}$. Esto obliga a realizar un número adecuado de particiones axiales una vez definidas las áreas de los subcanales.

La tarea de redimensionamiento sería sumamente simple si el código hiciera un uso convencional de la memoria (no sobrescribir) o si se hubiera utilizado la técnica del dimensionamiento variable muy común en los códigos de cálculo neutrónico.

1. Estructura de la memoria

La ubicación de las variables en la memoria es compleja debido a que porciones de esta se sobrescriben varias veces y también debido a una distribución especial que permite realizar cálculos con muy pocas variables residiendo en la memoria para el caso de problemas que superan la capacidad de la computadora en la que se ejecuta el código.

La compactación de la memoria se logra principalmente utilizando instrucciones EQUIVALENCE y de la grabación en disco de los valores que se sobrescriben.

Los arreglos se pueden dividir en varios bloques significativos. El primero de ellos es el vector DATIN, el cual

contiene todos los datos de entrada y una vez leído, los datos son impresos y grabados en el disco.

El segundo bloque es el vector SAVEAL y consiste en las variables que están dimensionadas en la dirección axial. Este arreglo está a su vez "equivalenciado" a los vectores SAVEH, SAVEV y SAVEAZ que corresponden a las variables de tres niveles axiales diferentes y que se utilizan para transferir estas variables entre la memoria y el disco cuando se utiliza la opción de cálculo que permite resolver problemas de gran tamaño.

Se hace uso también de las instrucciones EQUIVALENCE entre arreglos bidimensionales y unidimensionales que permiten ahorrar una gran cantidad de tiempo al evitar el cálculo de índices dobles dentro de los "DO".

2. Capacidad de "rolling" axial

Se denomina así a la capacidad que presenta el código de trabajar con la mayoría de las variables almacenadas residiendo en un periférico (disco o cinta magnética) en lugar de en la memoria. Esto es posible ya que debido al método numérico que se emplea para calcular las variables del nivel α puede no precisarse las variables de los niveles $\alpha-1$ y $\alpha+1$.

El uso de esta capacidad hace necesario que las variables se encuentren grabadas agrupadas por nivel axial, lo que se logra superponiendo los arreglos en el vector SAVEAL.

Esto se puede comprender fácilmente con un ejemplo: supongase un problema en el cual

MX	Número de niveles axiales	= 100
MB	Número de conexiones entre canales	= 10
MY	Número de barras	= 5
MC	Número de canales	= 5

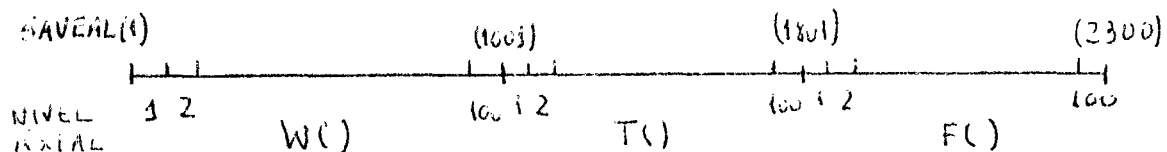
Considerese que para el cálculo son necesarios los arreglos: •

W(MG,MX)	Caudal de mezclado
T(MK,MX)	Temperatura de pared de las barras
F(MC,MX)	Caudal másico por los canales

Convencionalmente estos arreglos se podrían dimensionar ~~de 10~~ con las siguientes sentencias:

```
COMMON      /LARGE/SAVEAL(2300)
DIMENSION   W(10,100),T(8,100),F(5,100)
EQUIVALENCE (SAVEAL(1),W(1,1)),(SAVEAL(1001),T(1,1)),
+           (SAVEAL(1801),F(1,1))
```

lo que daría una disposición de la memoria de la siguiente forma:

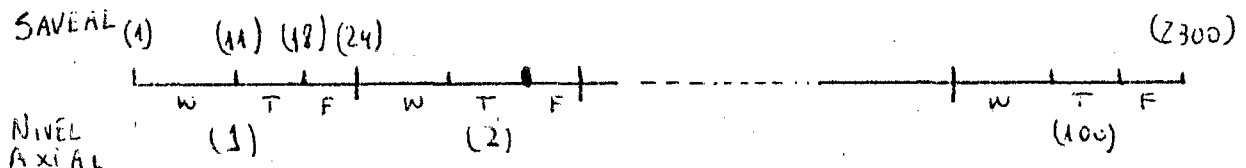


que no es el resultado deseado. El método adoptado por los autores del código y que responde al anterior requerimiento es el siguiente:

```
COMMON      /LARGE/SAVEAL(2300)
DIMENSION   W(23,100),T(23,100),F(23,100)
EQUIVALENCE (SAVEAL(1),W(1,1)),(SAVEAL(11),T(1,1)),
+           (SAVEAL(19),F(1,1))
```

(Notese que 23=10+8+5 es decir las dimensiones requeridas por los tres arreglos)

La memoria queda entonces estructurada de la siguiente forma:



3. El programa SPECSET

Debido a que la cantidad de arreglos que son almacenados de la forma descrita precedentemente es muy grande, no es una tarea fácil la de determinar las distintas dimensiones en base a los números que definen el tamaño del problema a calcularse.

A tal fin, acompañando al código vino un programa llamado SPECSET que genera las sentencias COMMON, DIMENSION y EQUIVALENCE necesarias para el redimensionamiento. Este programa no había podido ser usado hasta el momento ya que era específico de la computadora CYBER, en la cual fue desarrollado el COBRA, y hace uso de la capacidad que tiene esta de vincular superadentro al código todas las sentencias COMMON, DIMENSION y EQUIVALENCE y otras sentencias llamadas LEVL 1 que se relacionan con la distribución de las variables en memoria.

4. El programa REDIM

El programa REDIM fue escrito para funcionar con forma análoga al SPECSET, compatible con los recursos disponibles en cualquier computadora, ya que está escrito en Fortran standard y no requiere de ninguna capacidad especial del equipo en el que se lo ejecuta.

Este programa toma parte del SPECSET generando los bloques COMMON, DIMENSION y EQUIVALENCE y luego los inserta dentro del código COBRA en su versión que se ha llamado "redimensionable" en la que solo se encuentran las sentencias no dependientes de las dimensiones del caso.

Como resultado de este proceso se obtiene un programa fuente con las dimensiones requeridas que luego debe ser compilado y linkeditado normalmente.

Referencias

- 1.- R. Arrias Camps, R. Corcuera, A. Garcia, D. Parkansky.- Representación y Modelos de Cálculo Termohidráulico del Canal Caliente de la CNA-II. ENACE TN1 (1982).
- 2.- R. Arrias Camps. Optimización de los modelos de cálculo pertenecientes al COBRA IV, nuevas opciones. ENACE TN 1 (1982).
- 3.- N. Susevich. Programa RELIM, Manual del usuario. CNEA CAB en publicación.
- 4.- D. Rowe et al. COBRA-IV-1 -An interim version of COBRA for termohdraulic analysis of rod bundle nuclear fuel elements and cores. BNWL 1976.

apéndice I

Pruebas realizadas sobre la condición DPS

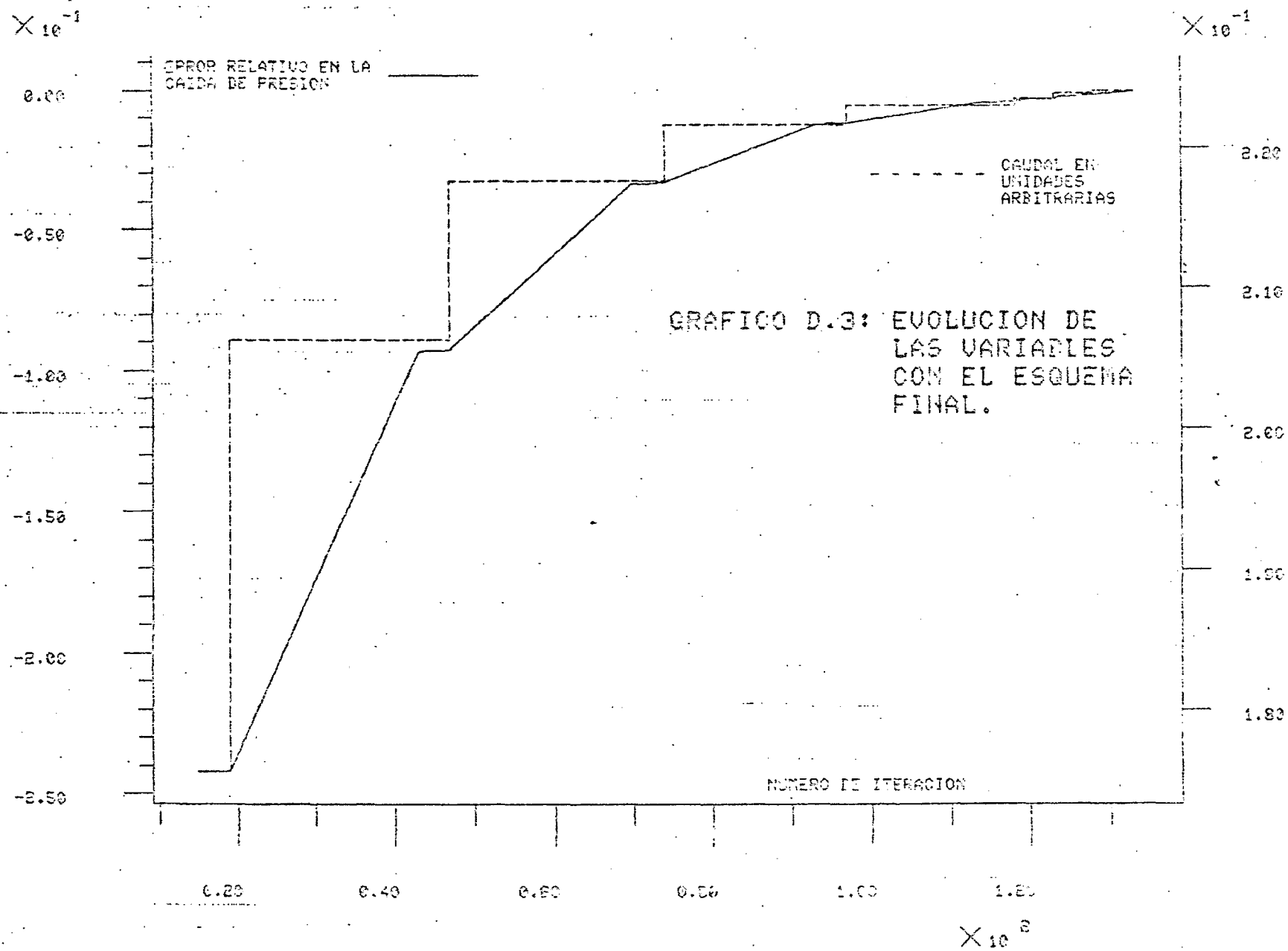
Entre las pruebas realizadas para mejorar la convergencia de la condición DPS se escogieron tres por ser las mas significativas. Para ellas se graficó la evolución de las dos variables mas importantes en la convergencia que son el error relativo de la caída de presión, magnitud que se desea llevar a cero, y el caudal de entrada que se varía hasta obtener la caída de presión buscada.

En el gráfico D.1 se puede observar la evolución de estas variables que demuestran un neto componente oscilatorio, débilmente convergente ya que para entrar en rangos de error de uno por mil se necesitan mas de 250 iteraciones.

En el gráfico D.2 se puede observar la evolución de las variables con un esquema modificado en el cual se buscaba primero una convergencia con un criterio muy débil para la solución con caudal fijo y luego se variaba este con la ecuación de corrección deducida en la parte I de este informe, ajustando el criterio de convergencia a medida que el valor de caída de presión se acercaba al esperado.

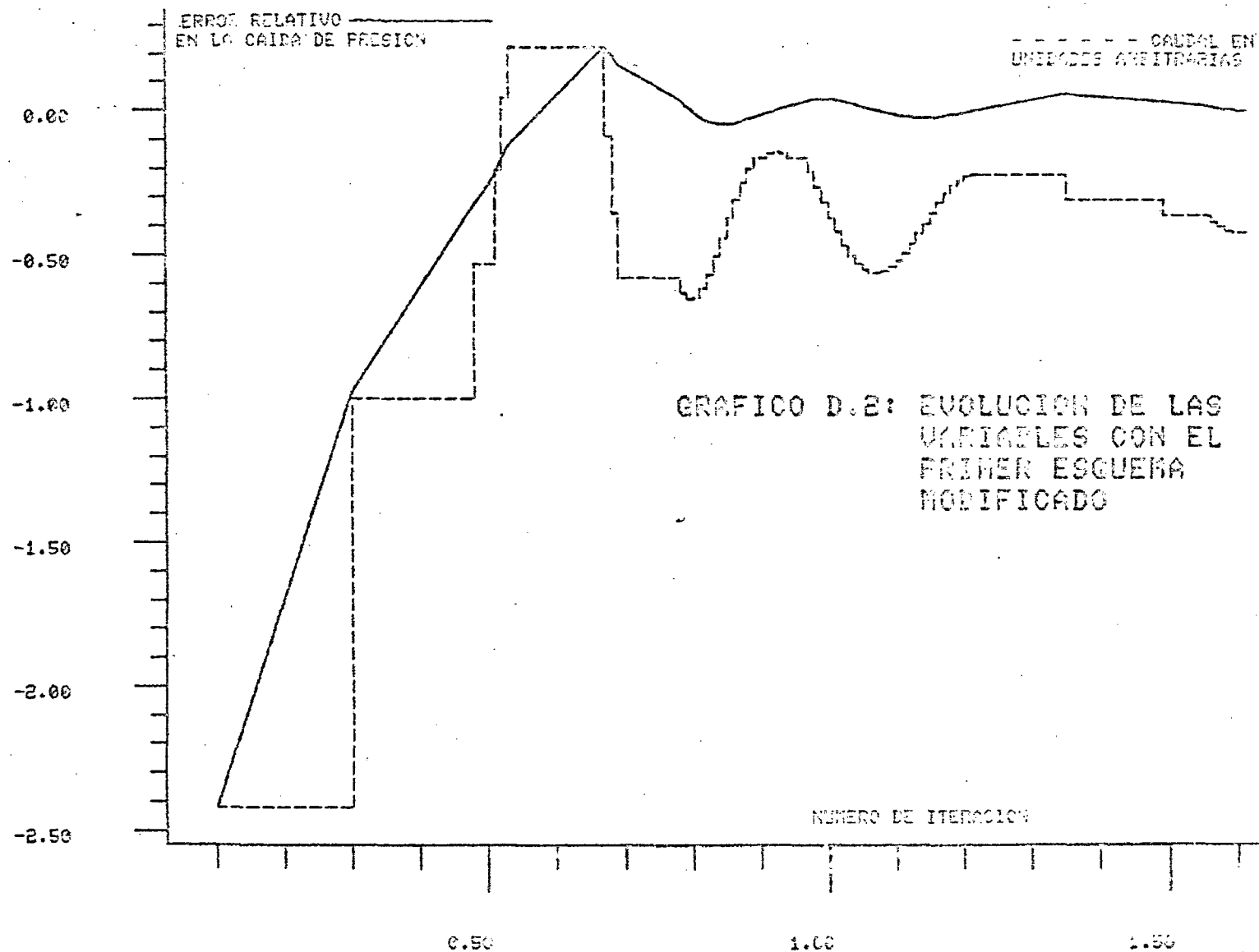
Si bien este esquema reduce notablemente el número de iteraciones necesarias para llegar a errores del uno por mil, demuestra aun un caracter oscilatorio y esto se debe a que la caída de presión es una magnitud muy sensible a la precisión de la solución y se esta corrigiendo el caudal de entrada con valores de caída de presión no demasiado exactos.

En el gráfico D.3 se puede observar la evolución de las variables con el esquema definitivo que es el descripto en la parte I de este informe y que da los resultados esperados.

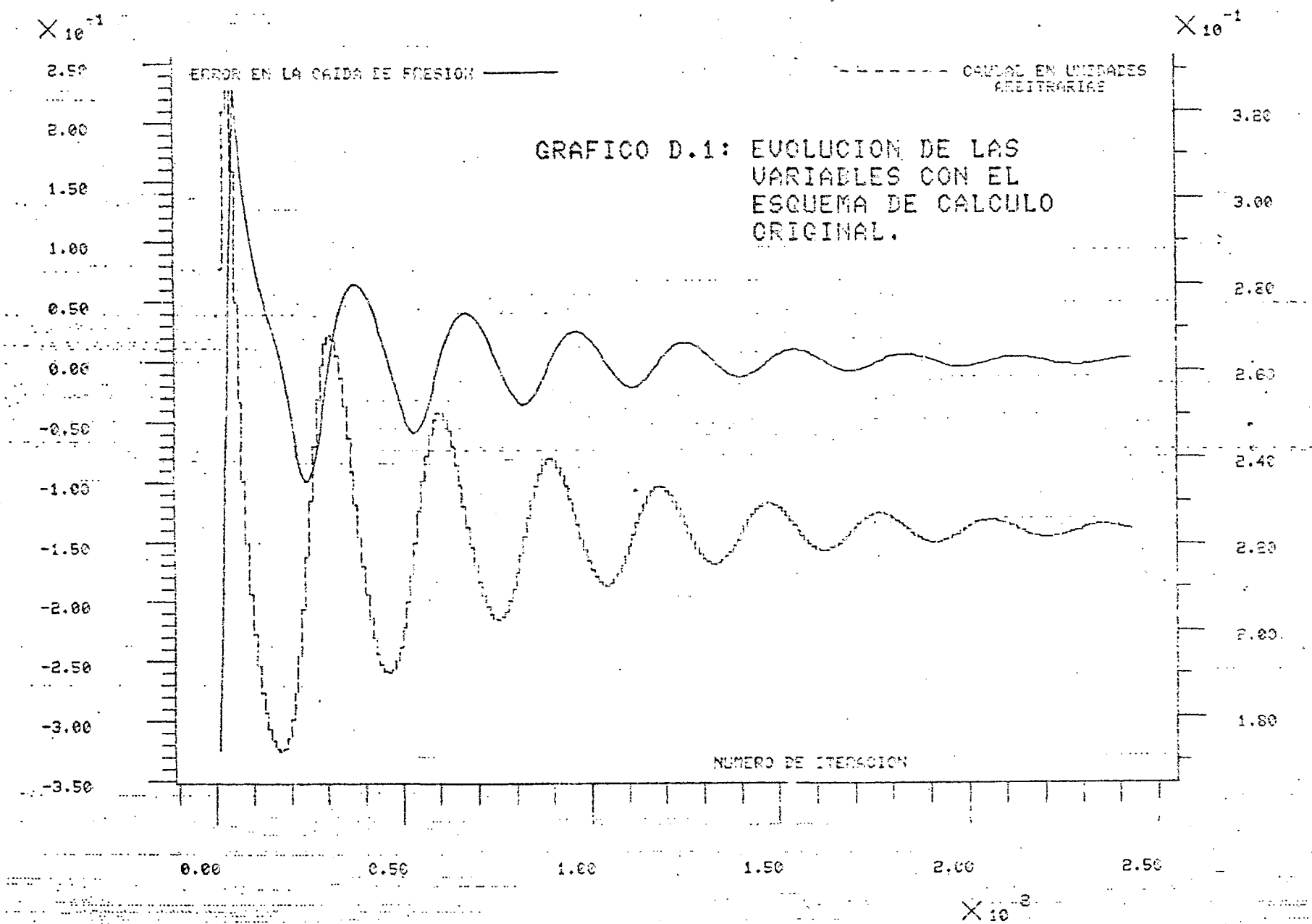


$\times 10^{-1}$

$\times 10^{-1}$



$\times 10^{-2}$



Apéndice II

Solución de un sistema de ecuaciones por el método de Gauss-Seidel

Se desea resolver el sistema

$$A\vec{w} = \vec{b} \quad (1)$$

Si se multiplica (1) por la inversa de la diagonal de A se obtiene:

$$A'\vec{w} = \vec{b}' \quad (2)$$

donde $A' = D^{-1}A$ y $\vec{b}' = D^{-1}\vec{b}$

A' puede descomponerse en $A_L + I + A_U$

donde A_L = Matriz triangular inferior.

I = Matriz identidad.

A_U = Matriz triangular superior.

y para resolver el sistema iterativamente se puede poner:

$$\vec{w}^t = -(A_L + A_U) \vec{w}^{t-1} + \vec{b}' \quad (3)$$

donde los supraíndices indican el número de iteración.

Este esquema es el método de Gauss.

La convergencia está condicionada a que los autovalores de la matriz $(A_L + A_U)$ sean menores que la unidad.

Si se utiliza el método de Gauss-Seidel que es:

$$\vec{w}^t = -A_L \vec{w}^t - A_U \vec{w}^{t-1} + \vec{b}' \quad (4)$$

Equivale a iterar con una matriz G tal que:

$$G = -(I + A_L)^{-1} A_U \quad (5)$$

y un término independiente :

$$\vec{b}^{*c} = (I' + A_L)^{-1} \vec{b}^c \quad (6)$$

quedando el sistema equivalente:

$$\vec{w}^t = G \vec{w}^{t-1} + \vec{b}^{*c} \quad (7)$$

Se demuestra que el mayor autovalor de la matriz G es menor que el mayor de la matriz $(A_U + A_L)$ por lo que se dice que el esquema de Gauss-Seidel es mas convergente que el de Gauss.

Para un número de iteraciones t suficientemente grande el vector error $\vec{e}^t = \vec{w}^t - \vec{w}$ donde $\vec{w}$ es la solución exacta del sistema, solo tiene componentes en el autovector correspondiente al mayor autovalor ya que todas las demas componentes se extinguieron por tener sus autovalores asociados un módulo menor, entonces:

$$\frac{|\vec{e}^{t+1}|}{|\vec{e}^t|} \approx |r_{\max}| \quad (8)$$

Donde $|r_{\max}|$ es el módulo del mayor autovalor y como para que el sistema sea convergente el error debe tender a cero, se debe cumplir que $|r_{\max}| < 1$.

Si se define el periodo de la matriz de iteraciones como el número de iteraciones p necesarias para que el error se reduzca en una década es decir:

$$\frac{|\vec{e}^t|}{|\vec{e}^{t+p}|} = 10. \quad (9)$$

y teniendo en cuenta que :

$$\frac{|\vec{e}^t|}{|\vec{e}^{t+p}|} \approx |r_{\max}|^{-p} \quad (10)$$

surge que :

$$p = - (\log_{10} |r_{\max}|)^{-1} \quad (11)$$

Notese que para $|r_{\max}| < 0.1$ $p < 1$ y deja de tener sentido su definición ya que se reduce el error en más de una década en cada iteración.

Si $p < 0$ $|r_{\max}| > 1$ o sea que el sistema no es convergente.