

EL PROBLEMA DE DOS FASES EN MATERIALES HETEROGÉNEOS. APLICACIONES

FERNANDO.G. BASOMBRÍO

*Centro Atómico Bariloche
Comisión Nacional de Energía Atómica
8400 SC de Bariloche, Río Negro, Argentina
Tel.: + 54-944-45107 Fax: + 54-944-45299
E-mail: basombri@cab.cnea.edu.ar*

RESUMEN

El propósito de este trabajo es extender la metodología desarrollada por Nochetto y colaboradores¹⁻⁴ para resolver el problema de Stefan al caso de materiales heterogéneos, es decir, aquellos para los cuales las propiedades físicas dependen de la ubicación espacial. Es éste un caso de particular interés práctico. Luego de la presentación de aspectos teóricos y computacionales, se describe la resolución de algunos problemas asociados al modelado de situaciones de incendio originadas por accidentes en el transporte de hexafluoruro de uranio.

THE TWO PHASE PROBLEM FOR HETEROGENEOUS MATERIALS APPLICATIONS

SUMMARY

In this paper we present an extension of the methodology developed by R.H. Nochetto *et al.*¹⁻⁴ to solve the Stefan problem, to situations for which the physical properties depend on the spatial point (thermically non-homogeneous materials). This is certainly a case of practical interest. After facing the theoretical and computational aspects, we describe the resolution of some problems associated to the modelling of fires originated by accidents in the transport of containers filled with uranium hexafluoride.

INTRODUCCIÓN

En este trabajo presentamos una herramienta computacional apta para la resolución del problema de dos fases en materiales térmicamente heterogéneos, junto con su aplicación al modelado de situaciones de incendio originadas en el transporte de hexafluoruro de uranio (UF₆). El problema es de interés general en el área nuclear y en particular para el Ente Nacional Regulador Nuclear (ENREN) y el Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA). Hemos tomado como base la metodología previamente desarrollada por R.H. Nochetto y colaboradores. La misma

Recibido: Noviembre 1996

se encuentra debidamente documentada en diversas publicaciones. Serán consideradas en especial las referencias¹⁻⁴, a las que deberá recurrirse por aspectos matemáticos deliberadamente excluidos aquí. La estrategia consiste en resolver un *problema de dos campos* (temperatura y entalpía), ligados por una ecuación constitutiva. La frontera libre (frente de fusión) se obtiene automáticamente como la isoterma correspondiente a la temperatura de fusión, sin necesidad de tratamientos (o "trucos") adicionales. La dificultad reside en que si se desea mucha precisión en la determinación del frente, debe recurrirse a técnicas de adaptabilidad de mallas. Otra apreciable ventaja del algoritmo propuesto es su carácter implícito, que permite adoptar pasos de tiempo sustancialmente mayores en comparación con los que la condición de estabilidad impone a los algoritmos explícitos.

Los resultados de las aplicaciones que describimos han sido obtenidos con el programa FASES2⁶, generalización del programa precedente FASES⁵ a efectos de poder considerar materiales heterogéneos. Dichos resultados se condensan a través de dos ejemplos, inspirados en casos escogidos en la literatura y que se refieren tanto al modelado numérico del problema como a situaciones experimentales. Los fenómenos físicos que tienen lugar a causa de un incendio que envuelve a un contenedor de hexafluoruro de uranio son bastante complejos. La física que maneja el programa FASES2 se refiere sólo a una parte limitada de los mismos: los aspectos térmicos del problema de dos fases (sólido-líquido), o problema de Stefan. No nos proponemos aquí encarar un modelado sofisticado y más realista de dicha situación de incendio.

ECUACIONES GOBERNANTES

Seguimos esencialmente la presentación hecha en^{2,4}. Designando con θ a la *temperatura*, con u a la *entalpía por unidad de volumen*, con $q = -k\nabla\theta$ al *flujo calórico* y con $k(x, \theta) > 0$ al *coeficiente de conducción térmica*, el problema básico consiste en resolver la ecuación de conservación de energía

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot q = 0 \quad (1)$$

en una región Ω del espacio euclídeo bidimensional y durante un lapso de tiempo $0 \leq t \leq T$, con condiciones de contorno del tipo Dirichlet, Neumann y/o de flujo impuesto y condición inicial $u(0) = u_0$. A efectos de las condiciones de borde, se destaca que la convención adoptada es la de *normal interior*. Debido a la física del cambio de fase, simultáneamente con (1) debe satisfacerse la *ecuación constitutiva*

$$u = \mathcal{U}(x, \theta) \equiv \int_{\theta_{fus}(x)}^{\theta} c(x, s) ds + \lambda(x)H[\theta - \theta_{fus}(x)] \quad (2)$$

donde $c(x, \theta) > 0$ es la *capacidad calórica*, $\lambda(x) \geq 0$ el *calor latente de fusión por unidad de volumen*, $\theta_{fus}(x)$ la *temperatura de fusión* y H la *función de Heaviside*.

Conviene introducir la *función de Kirchoff* $K = \mathcal{K}(x, \theta)$ definida por

$$K = \mathcal{K}(x, \theta) \equiv \int_0^{\theta} k(x, s) ds \quad (3)$$

donde por conveniencia, el límite inferior de la integral es cero. Como consecuencia de la definición (3) vale la relación

$$\begin{aligned} \nabla K &= \nabla \mathcal{K}(x, \theta) = k(x, \theta) \nabla \theta + \nabla_x \int_0^\theta k(x, s) ds = -q + F(x, \theta) \\ F(x, \theta) &\equiv \nabla_x \mathcal{K}(x, \theta) \end{aligned} \quad (4)$$

Aquí ∇ significa el *gradiente total* (regla de la cadena) respecto de las variables espaciales x y ∇_x el *gradiente parcial* respecto de x (a $\theta = cte$).

Por simplicidad, en lo que sigue se supone que los *parámetros materiales son independientes de la temperatura θ* . A continuación replanteamos la *formulación variacional de dos campos*, fundamento para la discretización por elementos finitos: *Encontrar distribuciones de entalpía u y de función de Kirchhoff K , tales que para todo $t \in [0, T]$ y todo $x \in \Omega$ cumplan la relación constitutiva $K = (\mathcal{K} \circ \beta)(u)$ y además satisfagan*

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \chi dx + \int_{\Omega} \nabla K(x, t) \cdot \nabla \chi dx = \int_{\partial\Omega'} \chi q \cdot n da + \int_{\Omega} F(x, \theta(x, t)) \cdot \nabla \chi dx \quad (5)$$

para toda función de peso $\chi(x)$ perteneciente a un espacio apropiado, la que debe anularse en la región $\partial\Omega^*$ de la frontera del dominio donde se imponen condiciones de Dirichlet. Con "o" se denota la composición de funciones. La función continua $\theta = \beta(x, u)$, expresa la dependencia de la temperatura respecto de la entalpía para el punto material x y $\partial\Omega'$ es la parte de la frontera de *normal interior* n , a lo largo de la cual se prescriben condiciones del tipo Neumann.

Discretización

Se aplica ahora la ortodoxia de discretización espacial por elementos finitos⁷. En esencia consiste en interpolar los campos u y K y en utilizar las funciones base de elementos finitos $\chi_i(x)$, $i = 1, 2, \dots, N$ (N -número de nodos de la red) como funciones de peso en lugar de las $\chi(x)$ que aparecen en (5). Por una discretización temporal implícita de Euler, se obtiene finalmente en cada paso de tiempo el siguiente sistema no lineal de $2 \times N$ ecuaciones algebraicas para los $2 \times N$ valores nodales u_i^{n+1} , K_i^{n+1}

$$\begin{aligned} M\mathbf{U}^{n+1} + \Delta t A\mathbf{K}^{n+1} &= M\mathbf{U}^n + \Delta t \boldsymbol{\phi}(\mathbf{U}^{n+1}) \equiv \mathbf{B}(\mathbf{U}^n, \mathbf{U}^{n+1}), \quad n = 0, 1, \dots \\ K_i^{n+1} &= \mathcal{K}(\beta(u_i^{n+1})), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad \mathbf{U}^0 = \mathbf{U}_0 \end{aligned} \quad (6)$$

La primera ecuación está escrita en notación matricial clásica. Con \mathbf{U}^n y \mathbf{K}^n se designa a los vectores cuyas componentes son respectivamente las entalpías nodales u_i^n y los K_i^n valores nodales de la función de Kirchhoff, al tiempo $t = n\Delta t$. M es la matriz de masas de componentes $M_{ij} = \int_{\Omega} \chi_j(x) \chi_i(x) dx$ y A , la matriz difusiva de componentes $A_{ij} = \int_{\Omega} \nabla \chi_j(x) \nabla \chi_i(x) dx$. Finalmente, $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{U}^{n+1})$ es un vector relacionado con un término fuente que puede depender de la solución, como es justamente el caso de la

última integral en el segundo miembro en la formulación variacional (5) (ver detalles en la Sección que sigue), y con las eventuales condiciones de borde no homogéneas. El tratamiento de las condiciones de contorno de Dirichlet o Neumann es estándar, y se encuentra descrito en cualquier libro sobre el método de elementos finitos. Las condiciones de flujo térmico impuesto en la frontera requieren adicionalmente de algunos desarrollos "ad hoc", que también serán considerados en la próxima Sección.

ESTRATEGIA COMPUTACIONAL

En los desarrollos originales de Nochetto y colaboradores y también aquí, se utilizan elementos triangulares lineales. Se hace además un "lumping" de la matriz de masas, convirtiéndola en una matriz diagonal de elementos no nulos $M_{ii} = \int_{\Omega} \chi_i(x) dx$. Estas dos determinaciones desempeñan un papel importante en la estrategia a seguir. Por simplicidad de exposición, provisoriamente supondremos que el segundo miembro \mathbf{B} no depende de \mathbf{U}^{n+1} . Luego veremos como ha sido tratado el otro caso. Se reescribe formalmente el sistema (6) ecuación a ecuación, usando como incógnitas sólo a los valores nodales de la función de Kirchhoff K y valiéndose de la función (discontinua!) $\gamma = (\mathcal{K} \circ \beta)^{-1}$

$$M_{ii}\gamma(K_i^{n+1}) + \Delta t A_{ii}K_i^{n+1} + \Delta t \sum_{j \neq i} A_{ij}K_j^{n+1} = B_i, \quad i, j = 1, \dots, N \quad (7)$$

Puede ahora "despejarse" de la (7) la incógnita K_i^{n+1} . Se obtiene de esta manera

$$K_i^{n+1} = R_i \left(B_i - \Delta t \sum_{j \neq i} A_{ij}K_j^{n+1} \right), \quad i, j = 1, \dots, N \quad (8)$$

donde $R_i = (M_{ii}\gamma + \Delta t A_{ii}I)^{-1}$, con I función identidad, es una función continua no decreciente.

Las N ecuaciones (8) se resuelven por el siguiente algoritmo de sobre-relajación sucesiva (SOR)^{2,4}: comenzando con $K_{i,0}^{n+1}$, solución convergida del paso de tiempo anterior n , y para $\nu = 0, 1, \dots, i = 1, \dots, N$,

$$K_{i,\nu+1}^{n+1} = K_{i,\nu}^{n+1} - \omega \left[K_{i,\nu}^{n+1} - R_i \left(B_i - \Delta t \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij}K_{j,\nu+1}^{n+1} - \Delta t \sum_{j=i+1}^N A_{ij}K_{j,\nu}^{n+1} \right) \right] \quad (9)$$

donde $1 < \omega < 2$ es un factor de relajación adecuado. Las iteraciones se cortan cuando para la tolerancia prescrita ϵ se cumple,

$$|K_{i,\nu+1}^{n+1} - K_{j,\nu}^{n+1}| \leq \epsilon \max(1, \|K_{j,\nu}^{n+1}\|), \quad i = 1, \dots, N \quad (10)$$

Los valores nodales de la entalpía se obtienen con una iteración de Gauss Seidel suplementaria

$$U_i^{n+1} = W_i \left(B_i - \Delta t \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} K_j^{n+1} - \Delta t \sum_{j=i+1}^N A_{ij} \bar{K}_j^{n+1} \right), \quad K_i^{n+1} = \{\mathcal{K} \circ \beta\}(x, U_i^{n+1}) \tag{11}$$

donde $W_i = (M_{ii}I + \Delta t A_{ii} \mathcal{K} \circ \beta)^{-1}$ y \bar{K}_i^{n+1} son los valores de K previamente calculados. La ecuación (11) proviene de la (7), pero esta vez expresando K_i^{n+1} en función de la entalpía U_i^{n+1} a través de la función β y, desde luego, sin utilizar la función γ por ser ésta discontinua. En otras palabras, las entalpías no se recuperan vía la ecuación constitutiva (6b), lo que llevaría a una indeterminación, sino mediante la ecuación (discretizada) de la conservación de la energía (6a) que elimina completamente dicha indeterminación.

Flujos térmicos impuestos en la frontera

Estas condiciones de contorno requieren de algunas consideraciones especiales. El término de frontera asociado a flujos, en la formulación variacional (5), una vez discretizado es $\int_{\partial\Omega'} \chi_i q \cdot n \, da$. Sea $\Gamma(\theta) = q \cdot n$ el *flujo exterior impuesto*, en general dependiente de la temperatura θ . Serán considerados dos casos de interés práctico, *convección lineal*

$$\Gamma(\theta_p) = \alpha(\theta_a - \theta_p) \tag{12}$$

donde α es un coeficiente de proporcionalidad, θ_a es la *temperatura ambiente* y θ_p la *temperatura de la pared, y radiación*:

$$\Gamma(\theta_p) = -\sigma(e_1\theta_p^4 - a_1\theta_m^4) \tag{13}$$

(ley de Stefan-Boltzmann, tomada de la ref.8 p. 445), con σ la constante de Boltzmann, θ_m la temperatura del medio que envuelve al cuerpo en estudio, e_1 es la emisividad del cuerpo y a_1 su capacidad de absorción. (El signo $-$ que afecta al segundo miembro es para compatibilizar con nuestra convención de normal interior.) Pero, en la subrutina que contiene dicha ley *puede programarse cualquier otra expresión (no lineal) del flujo* $\Gamma(\theta)$. En las experiencias numéricas hemos observado que el algoritmo iterativo es convergente, siempre que el paso de tiempo Δt sea lo suficientemente chico como para que durante el mismo las temperaturas no se alteren de modo desproporcionado, por el efecto del flujo calórico impuesto.

Para la discretización de esta condición de flujo, introducimos el *flujo interpolado* $\Gamma^h(x) = \sum_{j=1}^N \Gamma(\theta_j(x)) \chi_j(x)$. El término a agregar en el segundo miembro de la ecuación i de (6) o (7) resulta entonces

$$\Delta t \int_{\partial\Omega'_h} \chi_i \Gamma^h \, da = \Delta t \int_{\partial\Omega'_h} \chi_i \sum_{j=1}^N \Gamma(\theta_j) \chi_j \, da = \Delta t \sum_{j=1}^N \mathcal{M}_{ij} \Gamma(\theta_j) \tag{14}$$

Aquí $\partial\Omega'_h$ es la frontera discretizada en la que se imponen las condiciones de flujo y $\mathcal{M}_{ij} = \int_{\partial\Omega'_h} \chi_j \chi_i da$ es por definición la matriz de masas de frontera. Por simplicidad, también se utilizará un "lumping" de la misma: $\mathcal{M}_i = \sum_{j=1}^N \mathcal{M}_{ij} = \int_{\partial\Omega'_h} \chi_i da$. De esta manera, el término a incorporar al primer miembro de la ecuación i de (6) o (7), si el nodo $i \in \partial\Omega'_h$, está dado por $-\Delta t \mathcal{M}_i \Gamma(\theta_i)$.

Hecha tal operación, la estructura de la ecuación i es la misma que en (7), a condición de reemplazar,

$$R_i^{-1} \equiv M_{ii}\gamma + \Delta t A_{ii} I \rightarrow H_i^{-1} \equiv R_i^{-1} - \Delta t \mathcal{M}_i \Gamma \circ \mathcal{K}^{-1}, \quad \text{si } i \in \partial\Omega'_h \quad (15)$$

Cosa similar ocurre con la (11), donde debe reemplazarse

$$W_i^{-1} \equiv M_{ii} I + \Delta t A_{ii} \mathcal{K} \circ \beta \rightarrow Z_i^{-1} \equiv W_i^{-1} - \Delta t \mathcal{M}_i \Gamma \circ \beta, \quad \text{si } i \in \partial\Omega'_h \quad (16)$$

Conceptualmente el problema es similar al de antes, aunque desde el punto de vista práctico, si $\Gamma(\theta)$ tiene una forma relativamente complicada (por ejemplo la ley de radiación de Stefan-Boltzmann), puede resultar difícil (si no imposible) obtener las expresiones explícitas de H_i y Z_i que son necesarias para el programa de cálculo. De ser así hay que proceder de otro modo más expeditivo, por ejemplo engrosando \mathbf{B} en (6) y (7) con el término de flujo y "atrasando" la no-linealidad en cada iteración de Gauss-Seidel (2), lo que al final de cada paso de tiempo, convergidas las iteraciones, suministra un valor muy preciso del flujo de frontera.

Gradiente de propiedades materiales

Debe ahora incorporarse el aporte al término fuente originado por $F(x, \theta)$. Si k_s (resp. k_l) representa la conductividad del sólido (resp. líquido) tenemos

$$k(x, \theta) = \begin{cases} k_s(x) & \text{si } \theta \leq \theta_{fus}(x) \\ k_l(x) & \text{si } \theta_{fus}(x) \leq \theta \end{cases} \quad (17)$$

Analizamos la contribución a la ecuación correspondiente al nodo i de la red. De la misma participan sólo los elementos finitos e que contienen al nodo i . Aquí se emplean elementos triangulares con interpolantes lineales⁵. Si las temperaturas en el elemento e son menores que las de fusión ("elemento sólido"), su contribución está dada por

$$\int_e F(x, \theta) \cdot \nabla \chi_i(x) dx = \int_e \left[\nabla_x \int_0^\theta k_s(x) ds \right] \cdot \nabla \chi_i dx = (\nabla k_s) \cdot (\nabla \chi_i) \bar{\theta} \Delta \quad (18)$$

donde $\chi_i(x)$ es la función de peso asociada al nodo i , $\bar{\theta}$ es el promedio de las tres temperaturas nodales y Δ es el área de e . Por tratarse de interpolantes lineales, los gradientes ∇k_s , $\nabla \chi_i$ son ambos constantes.

Si en cambio las temperaturas del elemento e son mayores que las de fusión (“elemento líquido”), conforme a (17) la contribución de e es

$$\begin{aligned} \int_e F(x, \theta) \cdot \nabla \chi_i(x) dx &= \int_e \mathcal{K}(x, \theta) \cdot \nabla \chi_i dx = \\ &= (\nabla k_l) \cdot (\nabla \chi_i) (\bar{\theta} - \bar{\theta}_{fus}) \Delta + (\nabla \theta_{fus}) \cdot (\nabla \chi_i) (\bar{k}_s - \bar{k}_l) \Delta + (\nabla k_s) \cdot (\nabla \chi_i) \bar{\theta}_{fus} \Delta \end{aligned} \quad (19)$$

Aquí las barras significan promedios nodales.

El tercer caso a considerar es aquel para el cual hay cambio de fase neto dentro del elemento e . Para evitar errores de integración de una función discontinua conviene particionar al elemento en regiones sólida y líquida, y considerar la integral separadamente en cada región. Para ello hemos particionado a su vez los dos pedazos en subtriángulos (cuatro en total, uno y tres), aplicando en cada subtriángulo las expresiones (18) o (19) según corresponda.

De dicha tarea se encarga la rutina GRAMAT (GRADiente de MATeriales), la que luego de discriminar y analizar todos los casos que se presenten evalúa la contribución al segundo miembro. Por simplicidad, y dado que en la convergencia el error originado desaparece, las temperaturas intervinientes en la expresión $F(x, \theta)$ “se atrasan” a la iteración anterior. Esta rutina genera un costo alto en tiempo de CPU, pero es así como se tiene en cuenta el efecto de materiales heterogéneos, en forma exacta y compatible con la teoría. La misma prevé *variaciones continuas* de las constantes materiales con x . Si esto no es el caso las discontinuidades deben modelarse con zonas bruscas de transición, las que necesitan contener un número suficiente de capas de elementos, pues si no el error causado puede invalidar los resultados. En tales capas, los gradientes de las propiedades físicas son muy marcados. De no considerarse la corrección indicada en (18) y (19) por $F(x, \theta)$, se generan allí intensas fuentes térmicas ficticias, tanto más severas cuanto más agudos sean los gradientes. Aun tenida en cuenta, pequeños errores pueden descompensar el delicado equilibrio entre la fuente y su corrección, lo suficientemente como para impedir errores que alteren los resultados⁶. Por cierto que se trata de conjeturas intuitivas de alcance limitado, salvo que pueda avalárselas con una completa experimentación numérica sobre casos más simples, pero juiciosamente seleccionados. Por todo ello la rutina GRAMAT fue programada en doble precisión, hecho que acarrea una notoria mejora en prueba de lo conjeturado.

Otra cuestión a observar es que si en una pared adiabática (por ejemplo un borde de simetría geométrica) no se prescriben condiciones de Neumann, la formulación variacional impone $\nabla K|_{\partial\Omega'} \cdot n = 0$. Conforme a (4) en este caso se tiene para la componente del flujo térmico en dirección normal a la frontera, $q \cdot n|_{\partial\Omega'} = [\nabla_x \int_0^\theta k(x, s) ds] \cdot n|_{\partial\Omega'}$, y si allí no se anula el gradiente de propiedades materiales el flujo de q tampoco va a anularse como se espera, siendo necesario a tales efectos compensar el flujo correspondiente al segundo miembro de la expresión anterior, salvo que $(\nabla k) \cdot n|_{\partial\Omega'} = 0$ (situación relativamente frecuente en la práctica).

Para la implementación computacional de las expresiones (18) y (19), dentro de la rutina GRAMAT, fueron utilizadas las clásicas fórmulas de la p. 75 en la ref.⁷. Dado un elemento triangular e , o bien un subtriángulo de la partición según

sea el caso, llamamos i, j, m a sus tres nodos orientados en dirección antihoraria y $x_i, y_i, x_j, y_j, x_m, y_m$ respectivamente a sus coordenadas. Sean las cantidades

$$\begin{aligned} a_i &= x_j y_m - x_m y_j \\ b_i &= y_j - y_m \\ c_i &= x_m - y_j \end{aligned} \quad (20)$$

Si con Z_i, Z_j, Z_m se designan los valores en los nodos i, j, m de cualquiera de las cantidades materiales (conductividad y temperatura de fusión) que intervienen en las fórmulas (18) y (19), el producto escalar de los gradientes viene dado por

$$(\nabla Z) \cdot (\nabla \chi_i) = \frac{1}{4\Delta^2} [(b_i Z_i + b_j Z_j + b_m Z_m) b_i + (c_i Z_i + c_j Z_j + c_m Z_m) c_i] \quad (21)$$

donde el área del triángulo se expresa: $\Delta = \frac{1}{2}(a_i + a_j + a_m)$.

PROGRAMA DE CÁLCULO

El programa FASES2, escrito en FORTRAN77, es una generalización al caso heterogéneo del programa precedente FASES, conforme a los lineamientos antes presentados. Se basa en el paquete de subrutinas desarrolladas por S. Pissanetzky⁹ para elementos finitos, basadas en técnicas de almacenamiento de matrices ralas, así como otras rutinas complementarias generales. FASES2 permite la resolución de problemas en geometrías planas de frontera arbitraria. El tipo de elemento usado es el triángulo trinodal de Courant. El paso de tiempo Δt es aumentado (o reducido) conforme a las dificultades de convergencia que vayan apareciendo (o desapareciendo). Utiliza varias FUNCTIONS, relacionadas con la funciones $\beta(x, u)$, $\mathcal{K}(x, t)$, composiciones de las mismas y sus inversas, $R_i^{-1}(K)$, $H_i^{-1}(K)$, $W_i^{-1}(u)$, $Z_i^{-1}(u)$, etc., las que desempeñan un papel central tanto en el algoritmo como en el programa. Las condiciones de Dirichlet y de Neumann tienen su tratamiento clásico por elementos finitos. En particular, para las de flujo impuesto es necesario caracterizar en forma independiente las fronteras que corresponden a convección lineal o radiación, pudiendo éstas superponerse parcial o totalmente. FASES2 ha sido debidamente validado mediante ejemplos simples con solución conocida (analítica o numérica) y ejemplos más complejos. Otros detalles concernientes al programa se encuentran en las referencias^{5,6}.

EJEMPLOS DE APLICACIÓN

Describimos aquí dos aplicaciones realizadas con FASES2 al modelado de incendios en contenedores para el transporte de UF6. El recipiente contenedor, sea el real conforme a las especificaciones del OIEA o bien el utilizado a efectos experimentales, es de forma cilíndrica y de altura igual a unas tres o cuatro veces su diámetro. Está construido con acero. La disposición del cilindro es horizontal. Una razonable aproximación consiste en analizar la situación bidimensional que se da en el plano

medio, perpendicular al eje del cilindro. De ser necesario, tal aproximación debería estar complementada con otro análisis del efecto de los extremos del cilindro. Aquí nos referiremos exclusivamente a la situación bidimensional. La misma está esquematizada en la Figura 1, donde se indica el nivel que alcanza el UF6 (variable con el tiempo). El volumen encerrado entre dicho nivel y la parte superior de la superficie interna del cilindro contenedor se encuentra lleno por una mezcla de gases de UF6 y aire.

El problema a resolver es relevante, en la medida en que contribuye a que el transporte de UF6 pueda realizarse dentro de normas apropiadas de seguridad. Dicho material funde a los 64 C. Dado el bajo valor de esta temperatura, durante un incendio puede fácilmente sobrevenir la fusión. Debido a que en estado líquido la densidad del UF6 es aproximadamente menor en casi un 40% respecto a la del estado sólido, por efectos de la fusión se produce un notorio aumento del volumen ocupado por la parte líquida, la que tiende a invadir la zona superior llena de gases (Figura 1) comprimiéndolos, y aumentando fuertemente la presión ejercida sobre el recipiente de acero. Otro objetivo logrado a través de la resolución del problema es suministrar ejemplos suficientemente documentados, de modo tal que resulten útiles como base para contrastar y calibrar modelos más simples y expeditivos como los de parámetros concentrados, en base a un modelo de detalles.

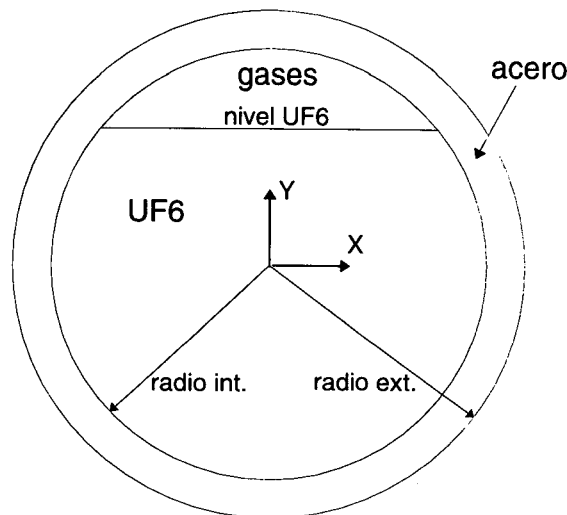


Figura 1. Esquema de la geometría plana usada. Contenedor, UF6 y zona de gases

En la superficie externa del cilindro se imponen condiciones de contorno de radiación (incendio), conforme a la ley de Stefan-Boltzmann. Ya que el problema presenta simetría respecto de un plano vertical pasante por el eje del cilindro, sólo se resuelven las ecuaciones en el semicilindro derecho, con apropiadas condiciones de simetría en tal plano. Dicha región es discretizada por elementos finitos. Como arriba se dijo, al fundirse este material se produce un aumento del volumen ocupado, lo que hace que el nivel líquido crezca a expensas del volumen de gases. Tal efecto es tenido

aproximadamente en cuenta por el código FASES2, a través de su rutina ANIVE. La misma, en base a la entalpía promedio del elemento, evalúa la variación relativa de volumen y luego la variación total. A consecuencia de esto, el nivel líquido asciende. El programa no considera el hundimiento del núcleo sólido originado por su mayor densidad. La relativa importancia del efecto y la complejidad de su modelado no parecen justificarlo. También, y dado que lo que aquí interesan son sólo valores de comportamientos globales y no precisiones respecto al frente de fusión, no se ha llevado a cabo el refinamiento adaptable de malla. Detalles de los ejemplos que describiremos, así como de otros ejemplos similares resueltos, se encuentran documentados en los informes^{10,6}.

Las unidades adoptadas en lo que sigue son: watts, metros, segundos, grados centígrados, Joules y kilogramos-masa.

Simulación de un experimento

El experimento en cuestión se encuentra descrito en la referencia¹¹, entre otras. Las medidas geométricas del recipiente cilíndrico, son radio interno 0,105 m y radio externo, 0,135 m. La zona ficticia de transición acero-gases y acero-UF6 está comprendida entre el radio interno y un radio de 0,102 m, es decir, dicha capa tiene un espesor de 0,003 m. La temperatura inicial de contenedor y contenido es de 41 °C. Los datos físicos se dan en la Tabla I.

Material	θ_f	c_s	$c_l (c_g)$	ρ_s	$\rho_l \rho_g$	k_s	$k_l (k_g)$	H
Acero	-	460,5	-	7850,0	-	43,0	-	-
UF6	64,0	500,0	545,0	4950,0	3600,0	1,2	50,0	$2,80 \times 10^8$
Gases	-	-	(400,0)	-	(16,0)	-	(3,586)	-

Tabla I. Datos físicos del primer ejemplo

Los datos fueron esencialmente extraídos de la ref¹². Aquí, θ_f es la *temperatura de fusión*, c la *capacidad calórica*, ρ la *densidad*, k la *conductividad térmica* y H el *calor específico de fusión*. Los subíndices s, l, g se refieren respectivamente a *sólido, líquido, gas*. Siguiendo a Lewis *et al.*¹², hemos afectado a la conductividad k_l del UF6 de un factor 100 para tomar gruesamente en cuenta el efecto de la convección en el líquido, no contemplado en el programa. Más adelante se analiza la sensibilidad de los resultados a la variación de este parámetro "de ajuste". Para la radiación se usaron los valores $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$ para la constante de Boltzmann y $e_1 = 0,6$, $a_1 = 0,8$, respectivamente para la emisividad y absorción del acero^{11,12,TablaII}.

La corrida se realizó con una red de 919 nodos y 1732 elementos triangulares trinodales. Para analizar la dependencia del cálculo a la variación de la red, se repitió

la corrida con otra red de 866 nodos y 1615 elementos. Pudo observarse que los valores resultantes son bastante coincidentes, salvo tal vez los del nivel líquido, hecho que atribuimos a los errores propios de este cálculo aproximado, más sensibles al tipo de red. También se ha indagado el efecto final que se origina al triplicar la conductividad térmica del UF6 líquido, observándose baja sensibilidad del modelo a tal parámetro, sobre todo en las temperaturas.

Por último, en la Figura 2 se muestra el aspecto de las isotermas al tiempo final de la corrida ($t = 7200$ s). Puede apreciarse el núcleo remanente de UF6 sólido, limitado por la isoterma de 64°C (frente de fusión). Dicha isoterma presenta el aspecto no deseado de una línea quebrada, que suele acomodarse a los bordes de los elementos de la red. Como se discute en la ref.⁵ es éste un fenómeno bien entendido, asociado al error $\mathcal{O}(h)$ estricto (h -tamaño típico de elemento) que se origina en la proyección del salto brusco de entalpías sobre el subespacio de discretización. Para corregir tal error se requiere una densificación adaptable de la malla²⁻⁴, procedimiento que aquí hemos omitido. Más arriba habíamos comentado que un detalle preciso del frente de fusión es irrelevante a nuestros propósitos. En la referencia¹⁰ se consignan otros resultados.

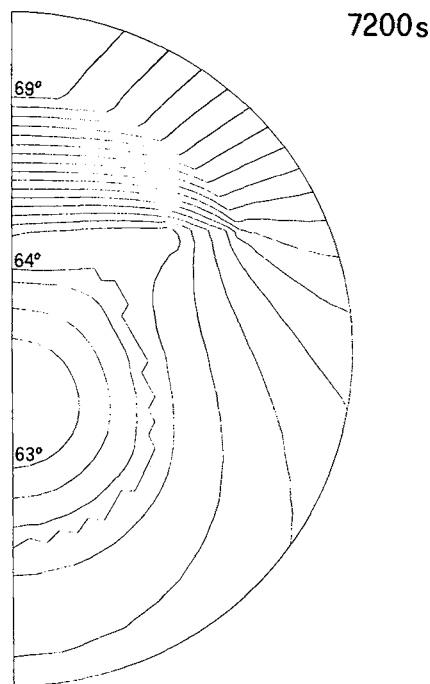


Figura 2. Primer ejemplo. Isotermas para $t = 7200$ s. Se indica la isoterma de fusión (64°C)

Comparación con un experimento modelado numéricamente

Este segundo ejemplo se inspira en una comparación de los resultados de un modelo numérico con el experimento TENERIFE 2, realizado en el Commissariat de l'Énergie Atomique (Grenoble)¹³. El recipiente contenedor es el 48Y que corresponde a las especificaciones de la OIEA, con radio interior de 0,6095 m y radio exterior de 0,6255 m. La temperatura inicial del dispositivo es de 36 °C y el nivel inicial de UF6 de 0,2 m. La temperatura exterior de incendio adoptada para el experimento aumenta linealmente con el tiempo desde 36 °C hasta 800 °C en 240 s, se mantiene constante en ese valor hasta $t = 1080$ y luego desciende linealmente (enfriamiento) retomando el valor de 36 °C a los 2220 s (Figura 3, curva B). El paso temporal inicial es de 5 s y el tiempo máximo de la corrida, 2000 s. La red utilizada consta de 1191 elementos finitos trinodales y de 642 nodos. Los datos restantes son los mismos del ejemplo anterior, a excepción de la conductividad k_s del UF6 sólido para la que se usó el valor 3,6.

En la Figura 3 se muestran las variaciones temporales de la temperatura en cinco puntos seleccionados. Los puntos *C* y *D* se encuentran ubicados sobre la cara externa del recipiente. Los puntos *E* y *G* en la masa de UF6 y el *F* en la zona de gases. Corresponden a la localización de ciertas termocuplas en el experimento TEN2¹³, Figuras^{19,21,24}. Las curvas *E* y *G* presentan planicies asociadas al paso del frente de fusión⁵. Las oscilaciones observadas en la curva *F*, pueden estar causadas por los efectos térmicos originados por el sumergimiento brusco de capas de nodos de la red en la zona de UF6 líquido, debido al aumento del nivel de este. La comparación de las temperaturas mostradas en la Figura 9 con las que se publican en la ref.¹³ no es del todo satisfactoria, cuantitativamente. Atribuimos las diferencias a que el modelo allí utilizado posee un grado de sofisticación bastante mayor que el presente, ya que incorpora muchos otros fenómenos físicos que son ajenos al problema propio de Stefan. Indicio de ello es que con el programa FASES2 la corrida requirió menos de 5 horas de CPU, mientras que en la ref.¹³ fueron necesarias 90 horas.

Las Figuras 4 y 5 se refieren respectivamente a las variaciones temporales del nivel de UF6 líquido y del volumen específico del gas. En ellas se incluyen los puntos obtenidos del modelado numérico efectuado en la ref.¹³, Figuras^{30y29}. La correspondencia es bastante aceptable. Por último, en la Figura 6 se muestra el mapa de isoterms para el final del cálculo ($t = 2000$ s). Aquí también se realizó un análisis de sensibilidad al parámetro k_l del UF6, variándolo entre 50 y 290,7. La sensibilidad fue menor que la esperada.

Hasta aquí, la descripción del problema tecnológico. En base al mismo, y al solo efecto de prueba, hemos generado un problema artificial partiendo de los datos físicos originales con excepción de las temperaturas de fusión, de modo que los tres materiales puedan fundir dentro del rango de las temperaturas involucradas⁶. Dichas temperaturas ficticias fueron de 400 *Kelvin* para el contenedor de acero, de 350 *K* para los gases y de 320 *K* para el UF6. A los 91.6 *seg.*, los tres frentes de fusión (400 *K*, 350 *K* y 320 *K*) han entrado ya en escena, aunque el UF6 en su mayor parte se encuentra en estado sólido. Dichos frentes se materializan mediante las tres correspondientes isoterms, las que son frentes de fusión sólo dentro de los respectivos materiales (acero, gases y UF6). Esta simple prueba nos ha permitido verificar como el algoritmo es capaz de modelar

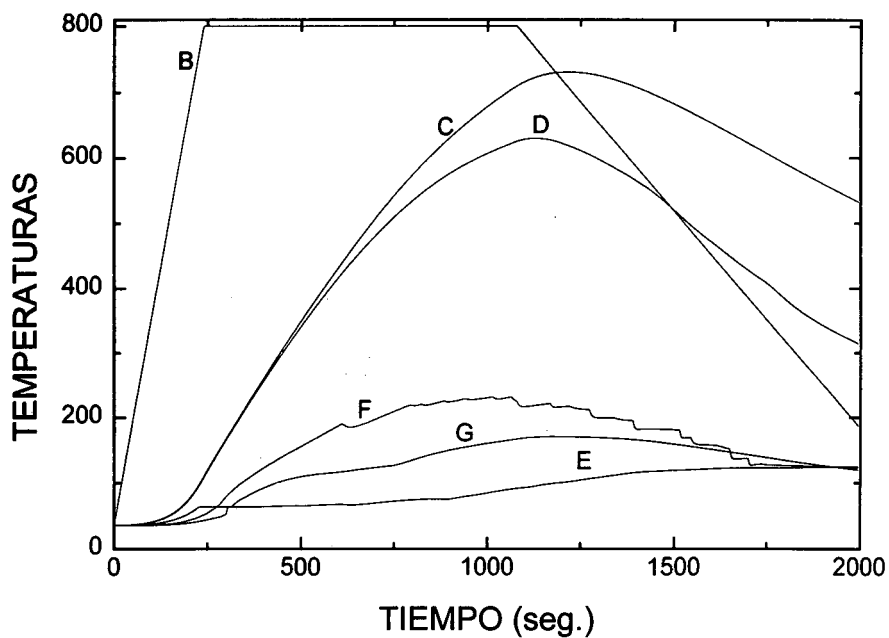


Figura 3. Segundo ejemplo. Variación temporal de las temperaturas en las "termocuplas" C, D, E, F, G. La curva B corresponde a la temperatura impuesta θ_m

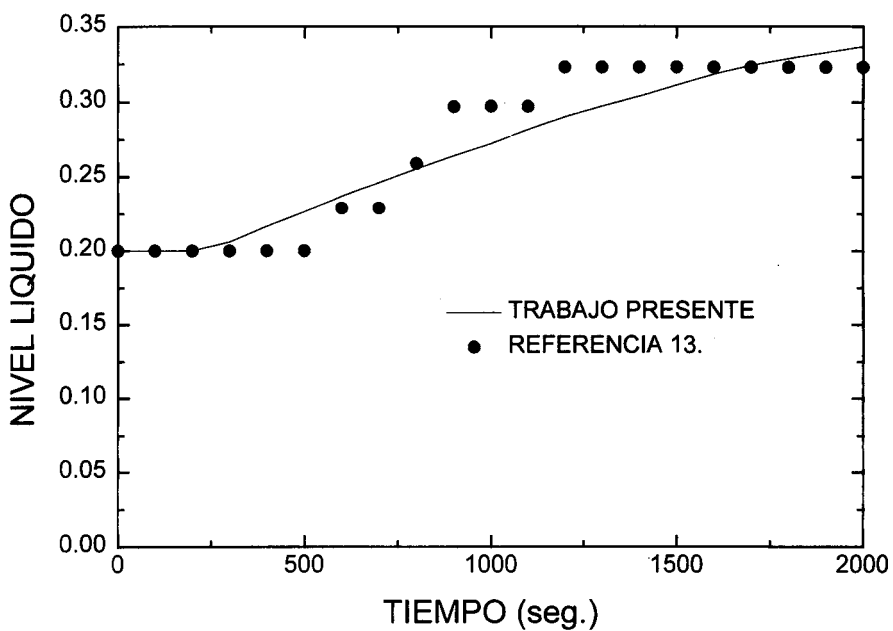


Figura 4. Segundo ejemplo. Variación temporal del nivel líquido de UF6

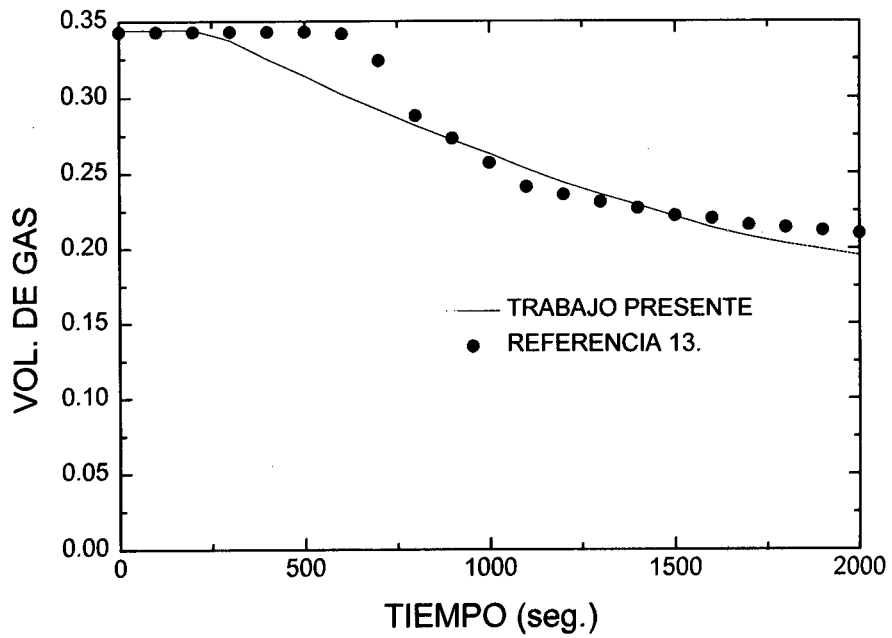


Figura 5. Segundo ejemplo. Variación temporal del volumen específico del gas

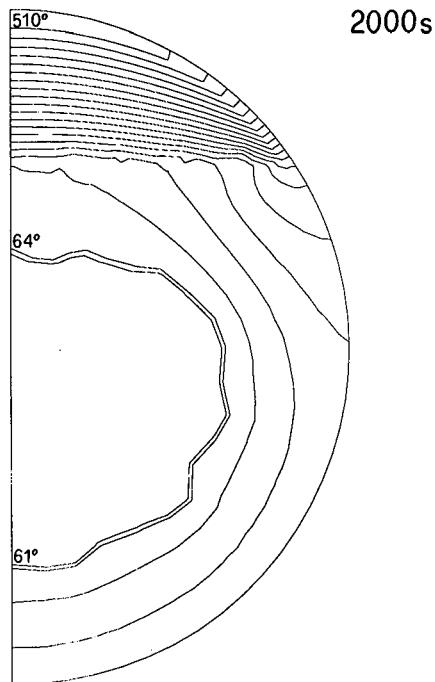


Figura 6. Segundo ejemplo. Isothermas para $t = 2000$ s. Se indica la isoterma de fusión (64°C)

correctamente la aparición de distintos frentes de fusión en materiales distintos.

COMENTARIOS Y CONCLUSIONES

Hemos presentado una generalización de la metodología desarrollada por R.H. Nochetto y colaboradores al caso de materiales heterogéneos, junto con aplicaciones parciales a un problema de interés tecnológico. Ha sido necesario particionar aquellos elementos por los cuales pasa el frente de fusión, perdiéndose así una apreciada ventaja de la propuesta original para el caso homogéneo. Las aplicaciones mencionadas han mostrado el buen comportamiento del algoritmo en esta situación extendida, el que puede contemplar la aparición espontánea de varios frentes de fusión en materiales distintos.

Sin embargo, algunos comentarios merecen hacerse. La metodología citada se basa en la asignación de propiedades materiales *por nodo* y no *por elemento*, es decir, tales variaciones deben estar dadas por funciones continuas. Es sabido que esto acarrea dificultades en la resolución de problemas tecnológicos, puesto que dichas variaciones son con gran frecuencia discontinuas (por ejemplo en nuestro caso, las interfaces acero-UF6, acero-gases y UF6-gases). No queda otro remedio que modelar las interfaces con capas delgadas ficticias de transición de materiales, con los consabidos trastornos. Por un lado, si las capas son muy gruesas puede introducirse un error por la descripción inapropiada de los materiales. Por el otro, si dichas capas se eligen demasiado delgadas, los gradientes materiales pueden llegar a ser muy fuertes. Entonces, a causa de los errores numéricos inevitables, la compensación que debe introducir el término $F(x, \theta)$ en (4) y (5) podría terminar siendo ineficiente y los efectos originados por tal deficiencia acabarían invalidando los resultados deseados. Esta es la descripción cualitativa del problema. Pero cuantitativamente, en los ejemplos presentados hemos podido determinar sin dificultad un espesor intermedio de capa de transición, equidistante de las dos situaciones extremas señaladas y que condujo a resultados absolutamente aceptables (Figuras 2 y 6).

Es de destacar que siendo el método de elementos finitos (con integración exacta) por naturaleza conservativo, el algoritmo presente es también conservativo, en tanto y en cuanto las iteraciones del sistema no lineal de ecuaciones (9), (11) se lleven hasta límites de error de cierre despreciables. Para concluir, comentamos que a pesar de las fuertes no linealidades asociadas a las condiciones de flujo en la frontera (ley de Stefan-Boltzmann), la convergencia ha sido siempre posible, sólo a costa de disminuir en algo el paso de tiempo o bien de imponer una cierta subrelajación en el algoritmo SOR.

AGRADECIMIENTOS

A Ricardo Nochetto por toda la información que me facilitó referente al problema y su muy buena disposición para ampliarme detalles complementarios del mismo. A Enzo Dari y Marcelo Vénere por generarme las mallas de elementos finitos de cada ejemplo. A Juan Carlos Ferreri por su revisión del manuscrito, por su hospitalidad y el buen recibimiento que me diera durante mis estancias en el ENREN.

REFERENCIAS

1. R.H. Nochetto y C. Verdi, "Approximation of Degenerate Parabolic Problems Using Numerical Integration", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 25, pp. 784–814 (1988).
2. R.H. Nochetto, "Finite Element Methods for Parabolic Free Boundary Problems", En *Advances in Numerical Analysis*, W. Light (Ed.), Vol. 1, pp. 34–95, Oxford University Press (1991).
3. R.H. Nochetto, M. Paolini, M. y C. Verdi, "An Adaptive Finite Element Method for Two-Phase Stefan Problems in Two-Space Dimensions. Part I: Stability and Errors Estimates", *Math. of Comput.*, Vol. 57, pp. 73–108 (1991).
4. R.H. Nochetto, M. Paolini y C. Verdi, "An Adaptive Finite Element Method for Two-Phase Stefan Problems in Two-Space Dimensions. Part II: Implementation and Numerical Experiments", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 12, pp. 1207–1244 (1991).
5. F.G. Basombrío, "FASES: Un programa para resolver el problema de Stefan, basado en elementos finitos", *Informe técnico CNEA-CAB 35/01/95*, Agosto (1995).
6. F.G. Basombrío, "Resolución numérica del problema de Stefan para materiales heterogéneos", *Informe ENREN PI-4/96* (1996).
7. O.C. Zienkiewicz, "*The Finite Element Method*", Third Edition, McGraw-Hill Book Company Limited, London, New York (1977).
8. R. B. Bird, W.E. Stewart y E.N. Lightfoot, "*Transport Phenomena*", John Wiley and Sons, Inc. N.Y. (1965).
9. S. Pissanetzky, "Paquete de subrutinas para elementos finitos, basadas en la técnica de almacenamiento ralo", Div. Mecánica Computacional-DIA. CAB-CNEA (1980).
10. F.G. Basombrío, "Modelado por elementos finitos de situaciones de incendio en contenedores para el transporte de UF6", a publicar como *Informe ENREN* (1996).
11. M. Hasegawa, T. Tanaka, M. Takahashi, Y. Yato, Y. y N. Sasao, "Thermal analysis on a 48Y package", *Report JCRP-10*, Nuclear Fuel Division, Tokai Works, Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation, Febrero (1993).
12. R.W. Lewis, Y. Zheng y D.T. Ghetin, "An Adaptive Finite Element Model for the Behaviour of Uranium Hexafluoride Filled Container in a Fire", *Nucl. Engngn. and Des.*, Vol. 140, pp. 229–250 (1993).
13. Anónimo, "Modelling of a UF6 Container in a Fire", *Report CEA/DTP/95 EP*, Commissariat de l'Énergie Atomique, Grenoble (1995).