1990

T. 265D

### DEPARTAMENTO DE INGENIERIA NUCLEAR ESCUELA TECNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES DE MADRID

## CONTRIBUCION AL ANALISIS DE TRANSITORIOS TERMICOS ACCIDENTALES EN LOS COMPONENTES DE UN REACTOR DE FUSION NUCLEAR

## **TESIS DOCTORAL**

#### ANTONIO SORIA RAMIREZ

Ingeniero Industrial por la E.T.S. de Ingenieros Industriales de Valencia

Director de la Tesis:

D. José Manuel Perlado Martín Dr. Ingeniero Industrial Profesor Titular de Universidad

1990

### TRIBUNAL ENCARGADO DE JUZGAR LA TESIS DOCTORAL

**Presidente:** 

#### D. Guillermo Velarde Pinacho

Vocales:

- D. Enrique Alarcón Alvarez D. Giampaolo Casini D. José Luis Muñoz-Cobo González

Vocal Secretario:

.

**D. Emilio Mínguez Torres** 

Calificación:

#### AGRADECIMIENTOS

El trabajo presentado en esta tesis ha sido realizado en el Centro Común de Investigación de Ispra gracias a la ayuda económica de la Comisión de las Comunidades Europeas. La generosidad y la eficacia con las cuales esta institución distribuye sus ayudas a la investigación ha hecho posible que la colaboración entre el Instituto de Fusión Nuclear de la Universidad Politécnica de Madrid y el CCI de Ispra se haya materializado en esta memoria.

Agradezco al profesor D. Guillermo Velarde el haber aceptado presidir el tribunal encargado de juzgar esta tesis, así como a los miembros del mismo por el interés que han mostrado en mi trabajo.

La disponibilidad y el consejo de mi director de tesis, profesor D. José Manuel Perlado han representado una ayuda inestimable durante el desarrollo de esta tesis. Le agradezco, además, la confianza que me otorgó aceptando dirigir esta tesis a pesar de la distancia física entre las sedes de trabajo, probando la capacidad de colaboración a escala europea entre universidad e institutos de investigación.

Agradezco a D. Jean Donéa, jefe de la División de Mecánica Aplicada del CCI, la gentileza con la cual aceptó acogerme en su grupo, poniendo a mi disposición todos los recursos de su departamento.

Quiero manifestar una expresión de agradecimiento especial a D. Vito Renda, que accedió a tomar bajo su responsabilidad la dirección de mis investigaciones en el CCI, y con el cual he tenido el placer de colaborar durante estos tres últimos años. Su generosidad y su capacidad para hacer del trabajo en equipo una experiencia fructífera serán para mí ejemplo en el futuro.

De igual modo, quiero expresar mi agradecimiento sincero a D. Pierre Pegon, sin cuya eficaz y estimulante ayuda muchos aspectos de mi trabajo hubieran resultado incompletos y a quien debo, además, algunas lecciones de metodologia científica.

Esta tesis se ha desarrollado en el marco del proyecto de Tecnologia y Seguridad de Fusión de la Comisión de las Comunidades Europeas. Agradezco a su director, D. Giampaolo Casini, la total disposición que ha mostrado para facilitar mi labor, así como el interés y la simpatía con que ha observado la evolución de este trabajo. Hago extensiva mi gratitud a todo el personal involucrado en el proyecto, tanto en Ispra como en Garching (NET-Team), por la buena voluntad y la eficacia mostrada el intercambio de información y la generosidad con las cuales me fueron sumistrados muchos datos necesarios para mi trabajo.

A la cooperación de D. Franco Fenoglio debo no sólo la mejor comprensión de ciertos aspectos tecnológicos concernientes el funcionamiento de los sistemas de refrigeración, sino también la agradable experiencia de trabajo en equipo durante más de un año, que aprecio y agradezco.

Quiero subrayar la inestimable ayuda que D. Loris Papa me ha prestado durante mi estancia en Ispra, allanando con paciencia las innumerables dificultades cotidianas con el ordenador y haciendo la labor más sencilla y llevadera, y que merece mi más sincera gratitud.

Agradezco a todo el personal de la División de Mecánica Aplicada la simpatía y el espíritu abierto que me han mostrado durante este tiempo, sin olvidar mis compañeros doctorandos de los cuales he recibido en todo momento ánimo y apoyo moral. Gracias, igualmente, a todo el personal del Instituto de Fusión Nuclear de la Universidad Politécnica de Madrid, por su buena disposición hacia mí y el interés que han mostrado por mi trabajo. Quiero además manifestar mi gratitud a mis compañeros doctorandos del Departamento de Ingeniería Nuclear de la ETSII de Madrid, que han sabido mostrarme reiteradamente su amistad y su cálido apoyo.

#### RESUMEN

En el diseño de los componentes directamente enfrentados con el plasma en un reactor de fusión por confinamiento magnético es necesaria la evaluación de las consecuencias de accidentes que involucran disfunciones en el sistema de refrigeración correspondiente a cada uno de ellos.

La permanente interacción entre el análisis de seguridad y el proyecto de definición de la planta permite la obtención de diseños intrínsecamente seguros, que conducen la instalación, tras la iniciación de un accidente, a una situación exenta de peligro mediante mecanismos pasivos de remoción del calor.

Las condiciones de trabajo de los componentes estudiados son extremadamente severas, actuando simultáneamente varios procesos de transporte de energía. De entre ellos, se analiza la eficacia de la radiación térmica y la convección natural como mecanismos de seguridad pasiva.

La descripción correcta de los fenómenos presentes requiere la puesta a punto de un modelo mixto de transmisión del calor (conducción-radiaciónconvección), mediante una aproximación de elementos finitos.

Las diferentes escalas de tiempo asociadas a cada uno de esos fenómenos producen un sistema de ecuaciones rígido en la integración temporal. Por otra parte, la no linealidad intrínseca del problema considerado introduce rigidez en la discretización espacial.

Una extensa experimentación numérica contribuye a identificar los algoritmos más eficaces para la resolución del problema. Se propone un método original de control simultáneo sobre el error en la integración temporal y sobre el tamaño del paso de tiempo, basado en la combinación de algoritmos secantes (cuasi-Newton) y un método de continuación o de longitud de arco impuesta.

El modelo se utiliza para el análisis de secuencias accidentales globales (en todo el reactor), utilizando varios diseños de referencia correspondientes al Next European Torus (NET), para aplicarse posteriormente al análisis bidimensional de la placa divertora del reactor ITER (International Tokamak Experimental Reactor), con el doble objetivo de evaluar las consecuencias de varios tipos de accidentes de pérdida de capacidad refrigerante, y de definir los materiales y la geometría óptimos para el componente.

Las conclusiones de este estudio muestran que, si se asegura la extinción de la reacción de fusión en el plasma tras la iniciación de un accidente, la radiación térmica y la convección natural son capaces de contrarrestar los efectos del calor residual y la inercia térmica de los componentes.

El parámetro crítico que determina la severidad del accidente es el tiempo de extinción del plasma, cuyos valores mínimos para diversas situaciones se han identificado.

## Indice

.

•

1	Intr	oducción.	1
	1.1	Aspectos Específicos de Seguridad en Reactores de Fusión	2
	1.2	Revisión Bibliográfica sobre Seguridad en Reactores de Fusión	5
	1.3	Objetivos de la Tesis	8
2	Disc	cretización Espacial.	15
	2.1	Residuos Ponderados Aplicados a la Ecuación de la Difusión	16
	2.2	Condiciones de Contorno No Lineales y Radiación en Cavidades	21
	2.3	Cálculo de la Matriz de Factores de Vista.	32
	2.4	Intercambio Térmico por Convección	41
3	Disc	cretización Temporal.	51
	3.1	Algoritmos de 2 niveles.	52
	3.2	Estabilidad y Convergencia.	55
	3.3	Algoritmos de 3 niveles.	58
4	Solu	ición Numérica de Sistemas Lineales.	60
	4.1	Métodos Directos	61
	4.2	Métodos Iterativos	62
	4.3	Métodos del Gradiente	66
5	Mét	odos Iterativos para Ecuaciones Vectoriales no Lineales.	71
	5.1	Método de Iteración Directa	72
	5.2	Método del Punto Fijo	73
	5.3	Método de Newton-Raphson.	75
	5.4	Método de Newton-Raphson Modificado.	77
	5.5	Métodos Quasi-Newton.	78
	5.6	Métodos Newton-Secante.	89
	5.7	Métodos Newton-SOR	91
	5.8	Suboptimización en la Dirección de Corrección.	95
	5.9	Formulación de la Matriz Jacobiana.	99
	5.10	Criterios de Convergencia.	103

6	Cor	ntrol del Error en la Integración Temporal y Selección Automátic	a
		lel Paso de Tiempo.	105
	6.1	Análisis 'a posteriori' del Error.	106
	6.2	Formulación de Equilibrio Energético con Longitud de Arco Impuesta para el Problema Parabólico.	109
	6.3	Adaptación de la Metodología Quasi-Newton al Algoritmo de Longitud de Arco	120
	6.4	Estrategias de Selección de la Longitud de Arco y Control sobre la Inte- gración Temporal.	124
7	Exp	perimentación Numérica.	129
	7.1	Problemas en Régimen Permanente.	129
	7.2	Problemas en Régimen Transitorio.	139
	7.3	Análisis del Método de Longitud de Arco.	151
8	Ana	álisis de Secuencias Accidentales Globales.	171
	8.1	Breve Descripción del Reactor NET	173
	8.2	Accidentes de Pérdida de Refrigerante en NET-DN	182
	8.3	Análisis Termohidraulico de un Circuito de Refrigeración en NET-DN.	194
	8.4	Accidentes de Pérdida de Refrigerante en NET-SB	214
9	Tra	nsitorios Térmicos Accidentales en las Placas Divertoras.	237
	9.1	Componentes Directamente Enfrentados con el Plasma en ITER	238
	9.2	Análisis de un Accidente LOCA Total en el Divertor ITER-JRC	245
	9.3	Estudio Paramétrico sobre Geometría y Materiales para el Monobloque	970
	0.4	Apólicia Tórmica del Divertor ITER en Condiciones de Punto de Nulo	270
	9.4	Magnético Oscilante.	304
10	Cor	iclusiones.	323
	BIF	SLIOGRAFIA	328

## Lista de Figuras

2.1	Intercambio radiante entre superficies elementales	24
2.2	Radiación a través de una cavidad de $N_s$ superficies	25
2.3	Subdivisión en superficies elementales.	28
2.4	Método de las cuerdas de Hottel.	33
2.5	Factores de vista en geometría cilindrica sin apantallamiento	33
2.6	Metodo de proyección de Nusselt	35
2.7	Método de Stokes.	36
2.8	Algoritmo de Mitalas y Stephenson	37
2.9	Comparación de los métodos AI, LI, y MS (1)	38
2.10	Comparación de los métodos AI, LI, y MS (2)	39
2.11	Factor de vista en geometría cilíndrica con apantallamientos	39
2.12	Superficies de apantallamiento.	40
2.13	Modelo de intercambio térmico en un conducto.	42
2.14	Funciones de interpolación y funciones de ponderación contracorriente.	45
2.15	Oscilaciones espúreas en un problema de convección-difusión	48
2.16	Elementos conductivos y convectivos intercalados	49
3.1	Error en la integración temporal (Algoritmos de paso simple)	57
11	Convergencia de varios mátodos iterativos para resolver $A = b$	66
4.1 19	Convergencia de varios metodos nerativos para resolver $At = 0$ Método del máximo descenso o del gradiente	67
4.2	Método del gradiente conjugado	70
т.0		10
5.1	Convergencia del método del punto fijo	74
5.2	Método de Newton-Raphson.	76
5.3	Método de Newton-Raphson modificado.	78
5.4	Método de la secante (QN con 1 variable)	81
5.5	Suboptimización en la dirección de descenso	98
6.1	Métodos de longitud de arco en N+1 variables (1).	115
6.2	Métodos de longitud de arco en N+1 variables (2). $\ldots$ $\ldots$	116
6.3	Relajación de la condición de arco fijo en la primera iteración.	119
6.4	Modificación de la longitud del arco en funcióndel error de integración	
	temporal	127
	•	
7.1	Problema 1. Malla de elementos finitos	130

7.2	Problema 1. Curvas de convergencia.	131
7.3	Problema 1. Solución: campo de temperaturas.	132
7.4	Problema 2. Malla de elementos finitos	133
7.5	Problema 2. Curvas de convergencia.	134
7.6	Problema 2. Campo de temperaturas en régimen permanente	135
7.7	Problema 3. Malla de elementos finitos	136
7.8	Problema 3. Campo de temperatura en régimen permanente.	138
7.9	Problema 3. Curvas de convergencia.	138
7.10	Problema 4. Malla de elementos finitos	140
7.11	Problema 4. Evolución de la temperatura en el extremo térmicamente	
	cargado	140
7.12	Problema 4. Curvas de convergencia en los pasos de tiempo 1 y 32	141
7.13	Problema 5. Malla de elementos finitos	143
7.14	Problema 5. Evolución de la temperatura en la placa fría	144
7.15	Problema 6. Carga térmica sobre el contorno superior (figura 7.4)	146
7.16	Problema 6. Evolución del campo de temperaturas.	148
7.17	Problema 7. Evolución del campo de temperaturas.	150
7.18	Problema 8. Malla de elementos finitos.	151
7.19	Problema 8 (A). Evolución de la temperatura en algunos nodos selec-	
	cionados	154
7.20	Problema 8 (A). Evolución del paso de tiempo.	154
7.21	Problema 8 (A). Error de integración temporal.	155
7.22	Problema 8 (B). Evolución de la temperatura sobre la línea GBC	157
7.23	Problema 8 (B). Evolución del paso de tiempo	157
7.24	Problema 8 (B). Error de integración temporal.	158
7.25	Problema 9. Malla de elementos finitos	159
7.26	Problema 9. Evolución temporal de 4 puntos seleccionados	160
7.27	Problema 9. Evolución del paso de tiempo	162
7.28	Problema 9. Error de integración temporal.	162
7.29	Problema 9. Número de iteraciones por paso de tiempo	163
7.30	Problema 10. Malla de elementos finitos	165
7.31	Problema 10. Evolución temporal de la línea superior	165
7.32	Problema 10. Evolución del paso de tiempo (Casos A, B, y C)	167
7.33	Problema 10. Error de integración temporal (Casos A, B, y C)	167
7.34	Problema 10. Evolución del paso de tiempo (Casos A, D, E y F)	169
7.35	Problema 10. Error de integración temporal (Casos A, D, E y F)	169
7.36	Problema 10. Número de iteraciones por paso de tiempo (Casos A, D,	
	E y F)	170
8.1	Vista general del reactor NET	174
8.2	Sección del reactor NET.	176
8.3	Vista de un sector de componentes dentro de la vasija de vacío	177
8.4	Segmentos interior y exterior.	178
8.5	NET-DN: Primera pared interna y envoltura de blindaje interna	180

8.6	NET-DN: Envoltura reproductora externa de litio-plomo	181
8.7	NET-SB: Envoltura de blindaje externa.	181
8.8	NET-DN: Discretización para el análisis térmico.	183
8.9	NET-DN: Detalle de la primera pared interna.	183
8.10	NET-DN: Detalle de la primera pared externa	184
8.11	Transitorios de calor residual.	186
8.12	Transitorios térmicos en NET-DN. 8.12.a: Pérdida de refrigerante en	
	IFW. 8.12.b: Pérdida de refrigerante en OFW/OBP.	190
8.13	Transitorios térmicos en NET-DN. 8.13.a: Pérdida de refrigerante en	
	ISB. 8.13.b: Pérdida de refrigerante en BB.	190
8.14	Transitorios térmicos en NET-DN. 8.14.a: Pérdida de refrigerante en	
	IVV/OVV. 8.14.b: Pérdida de refrigerante en todo el reactor.	191
8.15	Carga térmica sobre el componente IFW (NET-DN).	196
8.16	Disposición del circuito de refrigeración para IFW (NET-DN)	197
8.17	LOFA IFW NET-DN: Subdivisión del circuito de refrigeración para su	
	análisis con CATHARE.	200
8.18	LOFA IFW NET-DN: Flujo másico reducido.	203
8.19	LOFA IFW NET-DN: Velocidad del líquido a la salida del tubo en U	203
8.20	LOFA IFW NET-DN: Temperaturas del líquido y de saturación a la	
	salida del tubo en U	204
8.21	LOFA IFW NET-DN: Presión a la salida del tubo en U	204
8.22	LOFA IFW NET-DN: Nivel del líquido en el presurizador.	204
8.23	LOFA IFW NET-DN: Perfil de temperaturas a lo largo del tubo en U	
	para diferentes tiempos.	205
8.24	LOFA IFW NET-DN: Configuración de potencia. Detalle de la sección	
	IFW	207
8.25	LOFA IFW NET-DN: Configuración de potencia. Generador de vapor.	208
8.26	LOFA IFW NET-DN (Configuración de potencia): Temperaturas del	
	líquido y de saturación a la salida del tubo en U	210
8.27	LOFA IFW NET-DN (Configuración de potencia): Transitorio de presión	
	en el circuito.	211
8.28	LOFA IFW NET-DN (Configuración de potencia): Presión en el lado	
	secundario del generador de vapor.	211
8.29	LOFA IFW NET-DN (Configuración de potencia): Inventario de masa	
	en el secundario del generador de vapor.	211
8.30	LOFA IFW NET-DN (Configuración de potencia): Nivel del líquido en	
	el presurizador	212
8.31	LOFA IFW NET-DN (Configuración de potencia): Velocidad del refrig-	
	erante en la entrada al panel IFW-Divertor.	212
8.32	NET-SB: Modelo homogeneizado de capas concéntricas	215
8.33	NET-SB: Deposición de calor en régimen permanente (parte interna)	216
8.34	NET-SB: Deposición de calor en régimen permanente (parte externa)	216
8.35	NET-SB: Modelo de cálculo axisimétrico	218
8.36	NET-SB: Campo de temperaturas nominal con condiciones adiabáticas.	222

8.37	NET-SB: Campo de temperaturas nominal con contorno exterior a 80 C	. 223
8.38	NET-SB: IFW LOCA caso A1.	224
8.39	NET-SB: OFW LOCA caso A2.	226
8.40	NET-SB: ISB LOCA caso A3.	227
8.41	NET-SB: OSB LOCA caso A4.	229
8.42	NET-SB: LOCA total caso A5.	230
8.43	NET-SB: Decrecimiento de la velocidad del refrigerante.	231
8.44	NET-SB: IFW LOFA caso B1	232
8.45	NET-SB: OFW LOFA caso B2.	233
8.46	NET-SB: IFW LOFA caso B1	234
8.47	NET-SB: OFW LOFA caso B2.	235
8.48	NET-SB: LOFA total caso B3	235
9.1	ITER: Primera pared y envoltura de blindaje internas	240
9.2	ITER: Primera pared y envoltura de blindaje externas	241
9.3	ITER: Detalle de la primera pared	242
9.4	Divertor ITER. Diseño preliminar.	245
9.5	Divertor ITER. Sección del diseño preliminar.	246
9.6	Divertor ITER. Discretización con Elementos Finitos	247
9.7	Hipótesis de Carga Térmica	248
9.8	Campos de Temperatura en Régimen Permanente	253
9.9	Mapas de Isotermas en Régimen Permanente.	254
9.10	Nodos Seleccionados en el transitorio	255
9.11	Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga	
	1. Geometría A	257
9.12	Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga	
	1. Geometría B.	258
9.13	Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga	
	2. Geometría A	259
9.14	Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga	
	2. Geometría B	260
9.15	Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga	
	3. Geometría A	261
9.16	Evolución del campo de temperatura. Hipótesis de carga 3. Geometría	
	A. $(t = 0.2 s, 5 s, 10 s, 24 s y 84 s)$	263
9.17	Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga	
	3. Geometría B.	264
9.18	Evolución del campo de temperatura. Hipótesis de carga 3. Geometría	
	B. $(t = 0.2 s, 5 s, 10 s, 24 s y 84 s)$	265
9.19	Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga	
0.00	4. Geometria A	266
9.20	Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga	
0.04	4. Geometria B	267
9.21	ITER: Configuración de la placa divertora	271

9.22	ITER: Modelo geométrico para el análisis del divertor monobloque	272
9.23	ITER: Intercambio térmico en los tubos refrigerantes del divertor	273
9.24	Propiedades térmicas del Compuesto de Fibra de Carbono Aerolor	275
9.25	Propiedades térmicas del Compuesto de Fibra de Carbono SEP	276
9.26	Propiedades térmicas del grafito pirolítico CAPG.	277
9.27	Propiedades térmicas del cobre GlidCop.	278
9.28	Propiedades térmicas de la aleación MoRe.	279
9.29	Monobloque ITER: Serie de cálculos 1. Evolución del punto más caliente	901
9.30	Monobloque ITER: Serie de cálculos 1. Evolución del punto más caliente	201
0.01	en el tubo de cobre.	282
9.31	Monobloque ITER: Serie de cálculos 2. Evolución del punto más caliente	<b>1</b> 22
9.32	Monobloque ITER: Serie de cálculos 2. Evolución del punto más caliente	200
	en el tubo de MoRe.	284
9.33	Monobloque ITER: Serie de cálculos 3. Evolución del punto más caliente	<b>9</b> 85
0.34	Monobloque ITER: Serie de cálculos 3. Evolución del punto más caliente	200
9.04	en el tubo de cobre.	286
9.35	Monoblogue ITER: Serie de cálculos 4. Evolución del punto más caliente	200
	en el grafito.	288
9.36	Monobloque ITER: Serie de cálculos 4. Evolución del punto más caliente	
	en el tubo de MoRe.	288
9.37	Monobloque ITER: Serie de cálculos 5. Evolución del punto más caliente	000
0.00	en el grafito.	290
9.38	Monobloque ITER: Serie de calculos 5. Evolución del punto mas caliente	200
0.20	en el tubo de More	290
9.39	an al grafita CEC Aerolar	202
0.40	Monobloque ITEB: Sorie de cálcules 6. Evolución del punto más coliente	292
5.40	en el tubo de Cu	202
0.41	Monobloque ITER: Serie de cálculos 6. Evolución del nunto más caliente	232
3.41	en el grafito CAPG o CEC-SEP	203
9.49	Monobloque ITER: Serie de cálculos 6. Evolución del punto más caliente	400
5.12	en el tubo de MoRe	203
9 43	Monobloque ITEB: Temperaturas máximas alcanzadas en el grafito CFC-	200
0.10	Aerolor en régimen permanente.	294
9.44	Monobloque ITER: Temperaturas máximas alcanzadas en el grafito CFC-	
	SEP en régimen permanente.	294
9.45	Monobloque ITER: Temperaturas máximas alcanzadas en el grafito CAPG	
	en régimen permanente.	295
9.46	Monobloque ITER: Espesor máximo tolerado en la armadura para no	
	superar $T = 1273$ K	295

٠

9.47	Monobloque ITER: Temperaturas máximas alcanzadas en los casos de	
	supervivencia del componente sin extinción del plasma	297
9.48	Monobloque ITER: Temperaturas máximas alcanzadas en los casos de	
	supervivencia del componente con extinción del plasma	297
9.49	Monobloque ITER: Caso s242. Régimen permanente	299
9.50	Monobloque ITER: Caso 242. Campo de temperaturas a $t = 10 s$	300
9.51	Monobloque ITER: Caso s242. Evolución de la temperatura en los nodos	
	seleccionados (figura 9.22)	301
9.52	Monobloque ITER: Caso s242. Temperaturas sobre la línea LT (figura	
	9.22).	301
9.53	Monobloque ITER: Caso s242. Temperaturas sobre la línea LL (figura	
	9.22).	302
9.54	Monobloque ITER: Caso s242. Temperaturas sobre la línea LR (figura	
	9.22).	302
9.55	Monobloque ITER: Caso s242. Temperaturas sobre la línea TR (figura	
	9.22).	303
9.56	Monobloque ITER: Caso s242. Flujo térmico sobre la línea TR (figura	
	9.22).	303
9.57	ITER: Detalle de la región del divertor	305
9.58	ITER: Distribución normalizada a 10 MW/m2 del flujo térmico en el	
	pico mayor sobre el divertor	306
9.59	ITER: Öscilación del punto de nulo estándar.	307
9.60	ITER-Punto Nulo Oscilante. Mallas de elementos finitos utilizadas en	
	el análisis	309
9.61	ITER-Punto Nulo Oscilante. Determinación del espesor de grafito óptimo	<b>.310</b>
9.62	ITER: Campo de temperaturas en la dirección poloidal (F11).	311
9.63	ITER: Campo de temperaturas en la dirección poloidal (F12)	312
9.64	ITER: Transitorio de inicio de la oscilación del punto de nulo. Puntos	
	A y B (F11)	313
9.65	ITER: Transitorio de inicio de la oscilación del punto de nulo. Puntos	
	A y B (F12).	313
9.66	ITER: Transitorio sobre la superficie de CFC-SEP en el inicio de la	
	oscilación del punto de nulo (F11).	314
9.67	ITER: Transitorio sobre la superficie de CFC-SEP en el inicio de la	
	oscilación del punto de nulo (F12).	314
9.68	ITER: Transitorio sobre el refrigerante en el inicio de la oscilación del	
	punto de nulo (F11). $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	315
9.69	ITER: Transitorio sobre el refrigerante en el inicio de la oscilación del	
	punto de nulo (F12).	316
9.70	ITER: Flujos térmicos efectivos sobre los puntos A y B debidos a la	
-	pulsación del punto de nulo	316
9.71	ITER: LOSA 1. Sección A. Malla F11.	317
9.72	ITER: LOSA 1. Sección B. Malla F11.	318
9.73	ITER: LOSA 1. Sección A. Malla F12.	318

9.74	ITER:	LOSA	1.	Sección	Β.	Malla	F12.						•			•			•	319
9.75	ITER:	LOSA	2.	Sección	A.	Malla	F11.		•	•		•		•		•				319
9.76	ITER:	LOSA	2.	Sección	Β.	Malla	F11.													320
9.77	ITER:	LOSA	3.	Sección	Α.	Malla	F11.		•							•	•			321
9.78	ITER:	LOSA	3.	Sección	Α.	Malla	F12.													321

٨

## Lista de Tablas

1.1	Comparación entre Phenix e INTOR	14
7.1	Problema 2. Comparación de los diferentes métodos.	134
7.2	Problema 3. Iteraciones y tiempos de cálculo.	137
7.3	Problema 4. Iteraciones con $\Delta t = 0.05$	141
7.4	Problema 4. Iteraciones con $\Delta t = 0.025$	142
7.5	Problema 5. Iteraciones con $\Delta t = 0.5$	144
7.6	Problema 5. Iteraciones con $\Delta t = 0.25$	144
7.7	Problema 6. Comparación de los diferentes métodos.	146
7.8	Problema 7. Comparación de los diferentes métodos.	149
7.9	Problema 9. Comparación de los casos A y B	161
7.10	Problema 10. Comparación de los casos A, B y C.	166
7.11	Problema 10. Comparación de los casos A, D, E y F	168
8.1	NET-DN. Descripción de la discretización espacial.	185
8.2	NET-DN. Propiedades materiales utilizadas para el análisis	185
8.3	NET-DN. Hipótesis para el cálculo del calor residual	186
8.4	NET-DN. Factores de atenuación del calor residual.	187
8.5	NET-DN. Temperaturas nominales de funcionamiento.	188
8.6	Potencia nominal en el circuito IFW	198
8.7	Datos termohidraulicos del panel IFW/Divertor	201
8.8	Datos del presurizador	201
8.9	Parámetros del intercambiador de calor	202
8.10	Parámetros del sistema de bombeo	202
8.11	Datos termohidraulicos (Configuración de potencia)	206
8.12	Datos sobre el panel IFW-Divertor (Configuración de potencia)	207
8.13	Datos del generador de vapor	209
8.14	Tasa de generación volumétrica de calor $(W/m^3)$	217
8.15	NET-SB: Distribución de Potencia $(MW)$	220
8.16	NET-SB: Disposición de los circuitos de refrigeración (opción B)	220
8.17	NET-SB: Modelo de Refrigeración.	220
8.18	NET-SB: Propiedades de los materiales $(T = Kelvin)$	221
8.19	NET-SB: Salto térmico en condiciones nominales en los circuitos de re-	
	frigeración.	225
9.1	Especificaciones de operación para el divertor de ITER	244

9.2	ITER: Tasas de Densidad Volumétrica de Potencia $(W/m^3)$	249
9.3	ITER: Propiedades Térmicas.	250
9.4	Temperaturas máximas permisibles	266
9.5	Serie de cálculos 1: Casos con grafito CFC-A, tubos en Cu, LOCA en el	
	tubo izquierdo y sin extinción del plasma.	280
9.6	Serie de cálculos 2: Casos con grafito CFC-A, tubos en MoRe, LOCA	
	en el tubo izquierdo y sin extinción del plasma.	283
9.7	Serie de cálculos 3: Casos con grafito CAPG, tubos en Cu, y sin extinción	
	del plasma	285
9.8	Serie de cálculos 4: Casos con grafito CAPG, tubos en MoRe, LOCA en	
	el tubo izquierdo y sin extinción del plasma	287
9.9	Serie de cálculos 5: Casos con grafito CFC-SEP, tubos en MoRe sin	
	extinción del plasma.	289
9.10	Serie de cálculos 6: Casos con grafito CFC-Aerolor, tubos en Cu y ex-	
	tinción del plasma.	291
9.11	Serie de cálculos 6: Casos con grafito PG/SEP, tubos en MoRe y ex-	001
0.10	tincion del plasma.	291
9.12	Analisis Parametrico: Supervivencia del divertor en los casos estudiados.	298

# Capítulo 1 Introducción.

Entre las nuevas fuentes de energía que han aparecido recientemente en el panorama tecnológico mundial, la fusión nuclear se presenta como la primera candidata a una utilización exitosa, en términos de generación masiva de energía, capaz de abastecer de manera centralizada las necesidades de una sociedad cada vez más exigente en este sector, tanto en la vertiente de disponibilidad y bajo precio como en los aspectos medioambientales y de seguridad.

Con respecto a este punto, no es el momento de repetir las desafortunadas experiencias del pasado con respecto a la tecnología de reactores de fisión, donde la seguridad de la instalación reposaba en muchas ocasiones sobre coeficientes de seguridad y sobredimensionamiento de parámetros que constituían la única garantía contra mecanismos de fallo insuficientemente definidos. Con esta filosofía, parece oportuno plantear con esquemas lógicos el avance de las soluciones técnicas que tengan en cuenta los criterios de seguridad necesarios y exigibles en el diseño de un reactor de fusión, cuya realización práctica no es ciertamente inmediata, pero cuyos principios de interacción con tecnologías más convencionales pueden ser determinados con porcentajes de aproximación razonables, y por lo tanto resueltos en sus aspectos de garantía de seguridad.

Son evidentes, desde el punto de vista de la explotación económica, las ventajas de disponer de una instalación intrinsecamente segura. El método de diseño resulta así un proceso iterativo sobre toda la planta, teniendo en cuenta las interacciones mutuas entre los diferentes subsistemas. La aplicación de métodos probabilisticos (Análisis Probabilistico de Seguridad) así como métodos deterministas constituyen las herramientas de trabajo durante el proceso de diseño.

Un análisis de seguridad es necesario para estimar los riesgos que una determinada instalación conlleva. Sus objetivos detallados son:

a) Mantener la planta en condiciones de seguridad durante su operación.

b) Prevenir los accidentes posibles.

c) Limitar los efectos de un hipotético accidente.

d) Definir las medidas de emergencia.

El objetivo de las lineas de diseño de seguridad es proporcionar al proyectista un marco flexible de trabajo dentro del cual poder encontrar la mejor solución tecnológica, compatible con la seguridad de la planta, el personal de la misma, y el público en los alrededores.

## 1.1 Aspectos Específicos de Seguridad en Reactores de Fusión.

Una futura instalación comercial o de investigación que tenga como finalidad la explotación de energía de fusión deberá en primer lugar cumplir con una serie de requisitos generales, comunes a cualquier otra tecnología potencialmente peligrosa:

a) La planta debe ser proyectada, construida y operada de modo que su funcionamiento normal no cause daño alguno a ninguna persona, dentro y fuera del emplazamiento.

b) La planta debe ser proyectada, construida y operada de modo que cumpla todas las regulaciones legales requeridas por la autoridad licenciadora.

c) La exposición del público o del personal de la instalación a peligros que entrañen el riesgo de muerte, enfermedad mortal, o lesiones debe ser tan baja como sea razonablemente posible.

d) El diseño incorporará la previsión de mecanismos de parada de emergencia en la planta o en los sistemas necesarios para reconducir la instalación a un estado seguro, incluyendo mecanismos de remoción del calor.

e) Serán previstas salidas de emergencia y vías de evacuación desde todas las zonas de la planta.

f) La necesidad de proporcionar un diseño con un alto grado de seguridad pasiva debe

ser tenida en cuenta por el equipo proyectista.

Las características específicas de un reactor de fusión por confinamiento magnético aconsejan dividir los estudios de seguridad de los diferentes sistemas de acuerdo con un criterios funcionales, a diversas escalas:

a) Estudio de componentes críticos.

- Seguridad en el diseño de la primera pared, del manto reproductor, de las placas divertoras.

- Seguridad en los sistemas criogénicos.

- Seguridad en el ciclo del tritio y en su almacenamiento.

- Seguridad en el sistema de calentamiento del plasma y de inyección de combustible.

b) Estudios de seguridad global.

- Evaluación del término fuente dentro de la planta.

- Impacto ambiental del tritio y de otros materiales activados.

- Gestión y tratamiento de residuos radiactivos.

c) Evaluación de lineas de diseño óptimas.

- Definición de criterios de diseño seguros.

- Identificación de secuencias accidentales de referencia.

- Estudios de riesgo y análisis de consecuencias.

d) Estudios de seguridad a largo término.

- Estudios ambientales.

- Desmantelamiento de la instalación.

- Minimización del riesgo profesional acumulado.

Durante los últimos años, la mayor parte de los estudios se dirigieron a la cuantificación del riesgo efectivo debido a un escape de material radiactivo (tritio en la mayor parte de los análisis, pero también productos pesados de activación). Siendo el daño a la población la variable a minimizar desde este punto de vista, la solución pasa por el uso de materiales de baja activación, la obtención de sistemas de contención eficaces, y la reducción del inventario de tritio. Excepto la consideración de isótopos típicos de la fusión, la metodología se fundamenta en la experiencia adquirida en el análisis de centrales clásicas de fisión.

La degradación de la planta como consecuencia de un accidente constituye un problema menos estudiado, debido a su estrecha interconexión con un diseño bien establecido. Por otra parte, se puede prever que las condiciones bajo las cuales se producirá un accidente que acarree un escape de material radiactivo al exterior necesariamente conllevan un daño apreciable de la planta. Sin embargo, un accidente dentro de la instalación no implica en absoluto un accidente más severo de cara al público. Los presupuestos accidentales más importantes se pueden enumerar como sigue:

a) Accidentes de pérdida de refrigerante ('Loss of Coolant Accident' y 'Loss of Flow Accident', en la literatura en inglés referenciados como LOCA y LOFA). En los dos casos, la remoción de calor en los componentes directamente enfrentados con el plasma desaparece, bien por una evacuación completa del refrigerante (LOCA), bien por un fallo en las bombas del sistema de refrigeración, aunque el refrigerante se mantenga en el circuito (LOFA).

b) Accidentes de pérdida de vacío ('Loss of Vacuum Accident', LOVA). Esta hipótesis considera la pérdida de las bombas de vacío de la cámara del plasma.

c) Accidentes de pérdida de confinamiento del plasma ('Loss of Plasma Confinement Accident', LPCA). La consecuencia inmediata de este evento es una disrupción del plasma, que acarrea la deposición de toda la energía almacenada en el campo magnético en un área pequeña de la primera pared durante un tiempo muy corto.

La clasificación precedente ha sido realizada de acuerdo con el suceso iniciador de la secuencia accidental. Las consecuencias de cualquier accidente, sin embargo dependen mucho del diseño preciso del reactor, que puede ser dañado en modos diversos:

a) Daño mecánico: La fuerza electromagnética actuando sobre los conductores puede provocar su ruptura, o una deformación permanente que inutilice el componente.

b) Daño químico: La reacción entre agua o vapor y otras sustancias químicas en la primera pared o en el manto reproductor (grafito, litio-plomo, berilio, tungsteno, etc.) puede provocar explosiones o generaciones térmicas que conduzcan a otro accidente, o que provoquen la pérdida de combustible.

c) Daño térmico. La degradación de los materiales como consecuencia de una excursión de temperatura provoca secuencias accidentales que pueden destruir los componentes y acarrear escapes de material radiactivo.

En este trabajo, las secuencias accidentales consideradas serán únicamente los transitorios térmicos de pérdida de refrigerante. El trabajo se ha desarrollado en estrecha colaboración con un equipo de diseño, con el propósito de obtener un proyecto intrinsecamente seguro de los circuitos de refrigeración de los componentes considerados, al menos desde un punto de vista térmico.

El objetivo perseguido por el equipo de proyectistas esta basado en el principio del fallo a seguridad ('fail-safe principle'). De acuerdo con este criterio, los circuitos de refrigeración de la máquina deben ser diseñados en modo tal que, de producirse un accidente perteneciente al grupo de referencia, el sistema abandonado a sí mismo evolucione hacia un estado de seguridad.

El propósito de esta tesis (en su parte aplicativa) es precisamente evaluar la magnitud de las excursiones térmicas producidas por transitorios accidentales provocados por LOCAs y LOFAs en los componentes críticos de un reactor tokamak. Los diseños de referencia corresponden al futuro reactor europeo NET (Next European Torus), continuación para la fase tecnológica del proyecto JET (Joint European Torus), así como al reactor ITER (International Tokamak Experimental Reactor), promovido por la IAEA (Agencia Internacional de Energía Atómica).

## 1.2 Revisión Bibliográfica sobre Seguridad en Reactores de Fusión.

En esta sección se pasará revista a los trabajos más importantes publicados en los últimos años en relación con los aspectos presentados precedentemente, con el objeto de proporcionar las referencias clave dentro de las cuales se enmarca este trabajo. Esta revisión no pretende en absoluto ser exhaustiva, sino simplemente proporcionar al lector las referencias básicas y más recientes sobre el tema objeto de esta tesis.

Entre los estudios sobre el impacto ambiental de un reactor de fusión por confinamiento magético, destacan los trabajos de Fetter [52], Crocker and Holland [33], Holdren and Fetter [65] y Casini et. al [19]. De un modo más específico, Dewell y Edlund [38] analizan a las consecuencias radiológicas de un escape de tritio.

Los riesgos asociados a la activación de materiales de larga vida constituyen una extensa área de estudio con recientes aportaciones en la selección de los materiales estructurales más adecuados para la construcción de los componentes destinados a sufrir irradiaciones severas ('isotope tailoring'). Conn y Johnson [29] resaltan la magnitud de este problema, con particular atención al problema del acero de los componentes estructurales. Blink y Lasche [10] estudiaron analíticamente en 1985 los criterios de selección del tipo de acero útiles en el proceso de concepción del reactor. Como consecuencia la importancia ambiental de este problema, en los últimos años se ha producido una gran investigación sobre aceros de baja activación, de tipo ferrítico (Amodeo y Ghoniem [6]), martensítico (Sanz y Perlado [133]) y austenítico (Zucchetti y Zublena [179]).

En el campo de los estudios de seguridad funcional, el trabajo es enfocado de modo doble, englobando en la gran mayoría de los casos a la vez el diseño del componente y el análisis de su respuesta en condiciones accidentales. Casini y Farfaletti-Casali [20] ponen de manifiesto que la práctica totalidad de los problemas tecnológicos en la fusión por confinamiento magnético se concentran en las partes del reactor directamente enfrentadas con el plasma ('plasma facing components') y proponen una serie de criterios ingenieriles para facilitar su concepción.

Las secuencias accidentales originadas por disrupciones de plasma han sido estudiadas en sus aspectos térmicos (Hassanein et al. [61]) y termomecánicos (Bowers y Haines [11], Hashizume et al. [60], Klippel [78]). Las conclusiones preliminares de estos estudios indican que las consecuencias de estos accidentes se limitan a un daño más o menos severo para la planta, pero sinrepercusiones apreciables en el exterior. Las mismas conclusiones pueden deducirse de los análisis realizados por Jones y Rocco sobre la hipótesis de accidente de pérdida de vacío con la consiguiente entrada de aire en la cámara del plasma [76]. Las consecuencias electromecánicas de la disrupción del plasma constituyen otra importante área de investigación sobre el riesgo de un reactor de fusión. Las fuerzas electromagnéticas que en esta circunstancia pueden actuar sobre los materiales conductores próximos a la cámara del plasma pueden alcanzar magnitudes apreciables y dañar de forma permanente los mismos. Varios análisis mediante elementos finitos han sido recientemente llevados a cabo con el fin de evaluar este efecto (Crutzen et al. [34]).

Es la opinión generalizada de cuantos equipos de trabajo se dedican al diseño de máquinas de fusión que el accidente más severo de cara a la población exterior sería el provocado por una falta permanente de refrigeración en los componentes destinados a ejercer las funciones de pozo frío del plasma, es decir, la primera pared, las placas

#### divertoras y la envoltura reproductora.

Los primeros análisis de transitorios térmicos de este tipo se fundamentan sobre los prototipos de reactores STARFIRE [7], MARS [84], usando como envolturas reproductoras de referencia los diseños incluídos en el estudio de comparación de capas reproductores ('Blanket Comparison and Selection Study', BCSS [1]). Piet et al. [109] analizaron las excursiones térmicas en diferentes tipos de mantos reproductores suponiendo un accidente de tipo LOCA.

Sze y sus colaboradores [153], Massidda y Kazimi [90] y Cha et al. [22] se han ocupado en los Estados Unidos de los transitorios térmicos en primera pared y envoltura reproductora para los reactores de referencia contenidos en el informe BCSS y el proyecto TITAN [85]. Los circuitos de refrigeración en todos estos estudios preven el uso de metales líquidos como refrigerante en la envoltura reproductora.

En el ámbito europeo, el proyecto Next European Torus (NET) aúna los esfuerzos tecnológicos de la mayor parte de los países. A pesar de que el proyecto se halla todavía en fase de definición, numerosas aportaciones se han realizado ya sobre el diseño de los circuitos de refrigeración y de los componentes directamente enfrentados con el plasma. Esta tesis se ha desarrollado en estrecha colaboración con el equipo encargado del proyecto de esta máquina (The Next European Torus Team), que tiene su sede en Garching bei München (República Federal de Alemania), y está financiado directamente por la Comisión de las Comunidades Europeas hasta un cierto porcentaje, e individualmente por los países miembros para completar el costo total del proyecto. Presentar de modo exhaustivo todas las características del proyecto NET está fuera del alcance de esta tesis, pero el lector interesado dispone de un buen resumen del estado tecnológico actual del proyecto en el reciente resumen de Toschi [158].

Con referencia a los accidentes de pérdida de refrigerante, Klippel [77] ha propuesto recientemente un diseño para el circuito de refrigeración del sistema reproductor correspondiente a la opción Litio-Plomo, analizando detalladamente los transitorios termohidraulicos asociados a una pérdida de refrigerante. La elección del fluído refrigerante para todos los componentes de NET es agua presurizada, debido a la simplicidad tecnológica del diseño y para evitar la existencia de tres ciclos termodinámicos superpuestos, lo cual hace disminuir notablemente el rendimiento global de la instalación. Los inconvenientes del agua como fluído refrigerante son su elevada reactividad química con ciertos elementos de la envoltura reproductora (LiPb). Renda y Papa [122] analizaron las consecuencias mecánicas de una rotura en el circuito de refrigeración de un módulo del manto reproductor (en su versión de Litio-Plomo), teniendo en cuenta el pico de presión debido a la reacción química entre el refrigerante y el material fértil.

Gulden y Raeder [59] señalan la importancia de potenciar los mecanismos pasivos de remoción del calor después de un accidente de este tipo. Siguiendo esta línea, Raeder ha propuesto la evaluación de la la eficacia de la radiación térmica como mecanismo pasivo de remoción del calor con referencia a la máquina básica NET [117].

El equipo de trabajo dentro del cual se ha desarrollado esta tesis ha analizado paralelamente transitorios termohidraulicos asociados al circuito de refrigeración de la primera pared, en una opción que integra al divertor en este componente (ver Fenoglio et al. [51]), y estudiado transitorios a largo término dominados por la radiación térmica, para diseños del dispositivo reproductor basados en el Litio-Plomo (Renda et al. [124]) y en disoluciones acuosas de sales de Litio (Soria et al. [144]).

### 1.3 Objetivos de la Tesis.

Es evidente el continuo efecto de realimentación que se produce entre los aspectos neutrónicos, mecánicos, térmicos, etc. En un proyecto de la envergadura de NET hace necesario, una correcta interpretación del principio de seguridad pasiva hace necesario que los aspectos de seguridad se tengan en cuenta desde las más tempranas etapas de diseño. Por lo tanto, la menor modificación de diseño debe implicar la evaluación de las consecuencias térmicas bajo el presupuesto accidental de referencia para decidir si la modificación es aceptable o no. Por otra parte, un análisis térmico de seguridad debe claramente prever cuales son las fuentes de calor consideradas, los mecanismos pasivos de remoción del calor, la evaluación realista de los parámetros térmicos de los materiales empleados y el análisis final de respuesta de los componentes a la perturbación del sistema de refrigeración.

#### Fuentes de Calor

La magnitud de la excursión térmica que un determinado componente experimentará como consecuencia de una pérdida de refrigerante está en relación directa con la cantidad de calor que se deposita en éste. Las fuentes de calor consideradas en este estudio son de dos tipos:

a) Flujo de calor debido a la fusión nuclear en el seno del plasma. Este flujo de calor se deposita superficialmente sobre el componente más proximo al plasma (primera pared o en su caso, placa divertora). Su naturaleza física en la primera pared es radiación electromagnética y, en menor medida, flujo neutrónico. Por el contrario, en las placas divertoras, este flujo de calor se debe al intenso bombardeo de la superficie con partículas  $\alpha$  producidas por la reacción de fusión entre el deuterio y el tritio, así como otros iones pesados procedentes de las impurezas que desde las paredes pasan al plasma a través de diversos mecanismos, que se desvían magnéticamente hacia estos colectores de impurezas para evitar la extinción del plasma por efecto de las cenizas ('quenching effect'). La presencia de esta fuente de calor está asociada, por tanto, al proceso de quemado del plasma. Las hipótesis que contemplan el tiempo de extinción del plasma después de la detección de un accidente de pérdida de refrigerante tendrán, por lo tanto, importancia capital en los transitorios térmicos analizados.

b) Generación volumétrica de calor. Esta fuente de calor se halla dividida a su vez en dos términos. El primero de ellos, el calor asociado a los procesos nucleares inducidos por irradiación neutrónica *directa* (reacciones de reproducción de combustible en el manto, reacciones de moderación neutrónica en los componentes estructurales), concluye con la extinción del plasma. El calor debido a la desintegración radiactiva de isótopos activados durante la operación normal de la planta constituye el segundo término de generación volumétrica de calor. Si se asume que un accidente de pérdida de refrigerante está automáticamente seguido de una parada en el sistema de alimentación de combustible, es este segundo término el único a tener en cuenta cuando se realicen análisis transitorios a escalas de tiempo largas.

Además de estas fuentes *netas* de calor, debe también considerarse la energía térmica almacenada durante la operación normal de la planta en ciertos componentes de elevada capacidad térmica. Esta energía puede difundirse a otros componentes próximos bajo condiciones accidentales, afectándolos en mayor o menor medida.

Las fuentes de información básicas concernientes a estos aspectos son:

En primer lugar, y en lo referente a las condiciones *nominales* de funcionamiento del reactor, los datos necesarios para los cálculos efectuados han sido proporcionados por

el equipo de proyecto NET. A pesar de que este conjunto de datos se halla sometido a una revisión permanente, la incertidumbre en los mismos parece de menor importancia si se compara con otro tipo de decisiones de proyecto todavía no aclaradas (materiales, disposición y geometría de los componentes, etc.).

Los datos correspondientes a las generaciones térmicas debidas a la activación de materiales han sido calculados en JRC-Ispra, por Ponti [113],[114], con ayuda del código ANITA ('Analysis of Neutron-Induced Activation and Transmutations') [112].

#### Mecanismos Pasivos de Remoción del Calor

Desde un punto de vista conceptual, existen importantes diferencias entre la distribución de energía en un reactor nuclear de fisión clásico y un reactor de fusión termonuclear de tipo tokamak. La mayor parte del inventario radiactivo en un tokamak se encuentra concentrado en la primera pared y la envoltura reproductora. Los neutrones de fusión, originalmente con energía de 14 MeV, inducen muchas reacciones de transmutación nuclear que no existen en reactores de fisión, donde el espectro energético de los neutrones es menos energético. En un reactor de fusión, alrededor del 30% de la potencia total generada se deposita en la primera pared, y más del 90% de la potencia térmica total de la instalación se deposita en el conjunto primera pared-dispositivo reproductor-placas divertoras. Mientras que en un reactor de fisión una cantidad muy alta de calor residual se encuentra concentrada en un volumen relativamente pequeño, en un tokamak el calor residual es menor, y además se encuentra almacenado en un volumen activo mucho mayor, y con mucha más superficie de intercambio térmico. Una comparación cuantitativa se presenta en la tabla 1.1 entre dos reactores de similar potencia, Phenix e INTOR (International Tokamak Reactor). El volumen activo en el caso del reactor de fisión rápido reproductor francés Phenix corresponde al volumen del núcleo, mientras que en el caso del tokamak INTOR (primer estadio conceptual del reactor ITER mencionado más arriba), el volumen activo corresponde a la suma de los volúmenes de la primera pared y envoltura reproductora.

Los riesgos asociados al calor residual dependen de la facilidad de transporte de calor desde el volumen activo hasta el pozo frío. Considerando que en un reactor de fusión este volumen está compuesto por grandes superficies enfrentadas, a temperaturas relativamente elevadas y en condiciones de vacío, es lógico prever que un mecanismo importante de remoción del calor será la *radiación térmica*. El otro mecanismo de seguridad pasiva es la *convección natural* que se puede establecer en los tubos de refrigerante si estos permanecen intactos después de que ocurra el accidente (caso de pérdida del sistema de bombeo (LOFA)). Para que tal fenómeno ocurra, el sistema de refrigeración debe ser diseñado en modo óptimo para aprovechar al máximo las diferencias relativas de densidad entre las ramas fría y caliente del circuito, que debe disponer de sus focos frío y caliente con una diferencia de nivel adecuada. En función de la diferencia de densidades, de la potencia total transportada, y de la altura de la cota del pozo frío sobre el caliente, se obtienen velocidades de circulación del refrigerante en régimen de convección natural que pueden ser capaces de mitigar los efectos de un accidente de este tipo.

De acuerdo con estas consideraciones, el objetivo de la tesis es doble:

a) Desde un punto de vista numérico, se desarrolla un modelo de cálculo original mono y bidimensional que permite la consideración de todos los mecanismos de transporte de energía térmica anteriormente mencionados, de una manera rápida y fiable. El método clásico de elementos finitos se desarrolla para tener en cuenta el fenómeno radiante no sólo como condición de contorno, sino también a través de cavidades internas, que constituyen 'macroelementos radiantes'. Las características particulares de este acoplamiento y sus implicaciones numéricas son discutidas con detalle. El acoplamiento conducción-convección forzada se realiza de modo análogo, una vez conocida la ley de variación del caudal másico y la temperatura de entrada en el conducto mediante el análisis del ciclo termohidraulico con la ayuda del código de ordenador adecuado. La resolución del problema no lineal resultante de la discretización espacial propuesta es analizada con particular atención. Una extensa experimentación numérica ayuda a definir cuales son las estrategias de cálculo más adecuadas para este problema particular. Los transitorios térmicos analizados presentan típicamente constantes de tiempo muy diferentes, introduciendo notables dificultades en el proceso de selección del algoritmo de integración temporal, penalizando 'a priori' los métodos explícitos. Un método efectivo de control del error de integración ha sido desarrollado para la ecuación parabólica considerada y se aplica con éxito al integrador elegido, aunque es extrapolable a cualquier otro esquema implícito.

b) Como investigación de diseño tecnológico original, el modelo de cálculo precedente se utiliza, de acuerdo con las especificaciones demandadas por el equipo de proyecto NET, para el análisis de los accidentes de referencia sobre diferentes opciones de diseño. Se estudian modelos globales del reactor (en monodimensional), así como componentes críticos (fundamentalmente las placas divertoras) en cálculos detallados bidimensionales. Los análisis termohidraulicos necesarios para el correcto acoplamiento con el modelo han sido realizados por el equipo de trabajo en el seno del cual se ha desarrollado la tesis, así como la realización de las diversas interfases que permiten conectar los resultadoss de los análisis térmicos con programas de cálculo para determinar el comportamiento termomecánico de los componentes objeto de estudio.

El primer punto se recoge en los capítulos 2 al 7. En el capítulo 2 se presentan las ecuaciones de discretización espacial utilizadas en la simulación de los procesos de transporte de energía considerados en este trabajo (conducción, convección forzada y radiación), y se introduce el esquema original de cálculo propuesto para el acoplamiento radiación-conducción, analizándose sus implicaciones sobre la estructura de la matriz asociada al problema. En el capítulo 3 se pasa breve revista a los algoritmos de integración temporal, que determinan el sistema de ecuaciones no lineales que debe ser resuelto en cada nivel temporal. En el capítulo 4 se exponen brevemente los métodos de resolución de sistemas lineales, con el propósito de establecer la ligazón existente con el caso no lineal. La resolución de los problemas no lineales asociados a la integración de matrices dispersas y no simétricas se presenta en el capítulo 5, haciendo especial hincapié en la metodología quasi-Newton y sus diferentes modalidades de implementación para el problema que nos ocupa. El capítulo 6 se consagra a la presentación del algoritmo original para el tratamiento de la ecuación parabólica objeto de estudio, tratando el paso de tiempo como una variable independiente más, controlada por el indicador de error de integración a través de una metodología de longitud de arco impuesta. El capítulo 7 recoge una experimentación numérica original sobre las prestaciones de los diferentes algoritmos propuestos, que permite justificar la validez y adecuación de las modalidades escogidas para el tratamiento de problemas prácticos.

Los aspectos *aplicativos* de este trabajo se concentran en dos capítulos. La aportación original se efectúa en el marco de la colaboración con el NET-Team y la Agencia Internacional de la Energía Atómica para el análisis de los diseños conceptuales de los reactores NET e ITER, mencionados más arriba. En primer lugar se presentan en el capítulo 8 varios estudios de seguridad global de toda la planta, analizando la interacción entre los diferentes componentes, tanto en el caso de un accidente localizado en uno de ellos como en el caso de una disfunción generalizada de los sistemas de refrigeración. En el capítulo 9 se concentra el estudio en el diseño y el análisis de seguridad de las placas divertoras, donde la contribución original se concentra en la definición de la geometría y materiales óptimos para este componente.

	Phenix	INTOR
Potencia total (MW)	560	620
Volumen Activo $(m^3)$	1.2	150
Densidad de Potencia Máxima $(MW/m^3)$	650	20
Densidad de Potencia Media $(MW/m^3)$	450	4
Flujo Neutrónico Máximo $(n/m^2/s)$	7.2 10 <sup>19</sup>	7.0 10 <sup>18</sup>

Tabla1.1: Comparación entre Phenix e INTOR

-

•

-

# Capítulo 2 Discretización Espacial.

El método de los elementos finitos es reconocido en la actualidad como una de las herramientas analíticas más poderosas de la que disponen físicos e ingenieros para simular numéricamente gran número de fenómenos. Aunque nacido inicialmente para aplicaciones en el dominio del análisis mecánico estructural, la generalidad y versatilidad de esta técnica se expandieron rápidamente a otros campos de la ingeniería. El método fué usado por vez primera en el contexto del tema de esta tesis por Wilson y Nickell en 1966 [168], para discretizar la ecuación lineal de conducción del calor. Durante los 25 años que han seguido, el método se ha perfeccionado, desarrollando esquemas más sofisticados de integración temporal, y de discretización espacial con elementos de orden superior, haciendo uso de nuevas técnicas numéricas para abaratar los cálculos y utilizar mejor las posibilidades de cálculo que la continua y rápida evolución de los ordenadores pone a disposición del analista.

En este capítulo se presentan de modo sucinto los fundamentos del método, su aplicación al problema elíptico de conducción del calor en régimen permanente y parabólico correspondiente al régimen transitorio. Se describe además el acoplamiento entre el dominio conductivo (con forma variacional autoadjunta), el dominio radiativo (donde el campo de temperaturas no existe, y se debe aplicar un balance global de energía), y con los elementos de transporte convectivo, basados en una aproximación monodimensional de residuos ponderados (Petrov-Galerkin).

## 2.1 Residuos Ponderados Aplicados a la Ecuación de la Difusión.

Consideremos el siguiente problema definido en el dominio  $\Omega$ , de frontera  $\partial \Omega$  descompuesta en subfronteras disjuntas  $\partial \Omega_j$ :

donde  $\mathcal{L}$  y  $\mathcal{B}_j$  son operadores integro-diferenciales definidos de modo tal que el problema esté bien propuesto, siendo u la variable de campo (escalar o vectorial) a determinar. En el caso que nos ocupa se tiene:

$$\mathcal{L}(u) = C_p(u, x, t) \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla k(u, x, t) \nabla u$$
  

$$b = g_t(x, t)$$
  

$$\mathcal{B}_1(u) = -k(u, x, t) \nabla u \cdot n_v$$
  

$$h_1 = q_1(u, x, t)$$
  

$$\mathcal{B}_2(u) = u$$
  

$$h_2 = T_2(x, t)$$
  

$$u_{t=0} = u_0(x)$$
  
(2.2)

habiendo supuesto que la frontera se encuentra dividida en sólo dos partes (j = 2), la primera de las cuales con condición de contorno de Neumann, con flujo de calor impuesto  $q_1$  y la segunda con condición de contorno de Dirichlet, con temperatura impuesta  $T_1$ . La variable u representa aquí la temperatura, k(u, x, t) es el tensor simétrico de conductividad,  $C_p$  es la capacidad térmica,  $n_v$  el vector unitario normal a  $\partial\Omega_1$  y x el vector genérico de posición.

A partir de la ecuación (2.1) se puede obtener la forma integral asociada. Sea  $\mathcal{H}_{\Omega}$  el espacio vectorial de dimensión infinita de las funciones de cuadrado integrable definidas de  $\Omega$  en  $\Re^n$ , siendo n la dimensión del sistema de ecuaciones (2.1) y  $\mathcal{H}_{\partial\Omega j}$  el correspondiente espacio de las funciones de cuadrado integrable de  $\partial\Omega_j$  en  $\Re^n$ . Definiendo los productos escalares en estos espacios del modo usual:

$$\langle u, v \rangle = \int_{\Omega} u^{T} v d\Omega \quad ; \quad u, v \in \mathcal{H}_{\Omega}$$

$$\langle u, v \rangle_{\partial} = \int_{\partial \Omega_{i}} u^{T} v d\partial \Omega_{j} \quad ; \quad u, v \in \mathcal{H}_{\partial \Omega_{j}}$$

$$(2.3)$$

la ecuación integral equivalente a (2.1) es:

$$\langle v_{\Omega}, \mathcal{L}(u) - b \rangle + \sum_{j} \langle v_{\partial \Omega j}, \mathcal{B}_{j}(u) - h_{j} \rangle_{\partial} = 0$$
 (2.4)

que debe verificarse para cualquier conjunto de funciones  $v_{\Omega}$ ,  $v_{\partial\Omega j}$ .

El método se fundamenta en la aproximación de la variable u mediante la expresión:

$$u \sim \overline{u} = \sum_{i=1}^{NDOF} U_i N_i(x)$$
(2.5)

donde el orden de expansión se identifica con el número de grados de libertad de la aproximación, NDOF, las funciones  $N_i(x)$  son conocidas a priori (funciones de forma) y los coeficientes  $U_i$  son las incógnitas a determinar. Definiendo ahora las cantidades reales:

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{\Omega} &= \mathcal{L}(\overline{u}) - b \\
\mathcal{R}_{\partial\Omega_j} &= \mathcal{B}_j(\overline{u}) - h_j
\end{aligned}$$
(2.6)

y eligiendo una función de forma simple f que satisfaga:

$$f(0) = 0 (2.7)$$

la solución aproximada equivalente a (2.4) será:

$$\langle v_{\Omega}, f(\mathcal{R}_{\Omega}) \rangle + \sum_{j} \langle v_{\partial\Omega j}, f(\mathcal{R}_{\partial\Omega j}) \rangle_{\partial} = 0$$
 (2.8)

La discretización del problema se efectúa ahora exigiendo que la ecuación anterior se cumpla, si no para cualquier conjunto de funciones v (la dimensión del espacio es infinita), sí al menos para NDOF conjuntos de funciones v linealmente independientes, construyéndose así un sistema de NDOF ecuaciones lineales. A continuación se presentan las diferentes elecciones que se pueden hacer para las funciones de ponderación v y para la función f, que conducen a los diferentes esquemas de integración.

La metodología usual adopta para las funciones  $v_{\partial\Omega_j}$  la proyección de las  $v_{\Omega}$  sobre cada uno de los contornos respectivos. Por otra parte, en el caso de condiciones de contorno de Dirichlet, las funciones de forma pueden escogerse de modo que verifiquen *a priori* tales condiciones sólo sobre los nodos involucrados, lo cual se consigue seleccionando  $v_{\partial\Omega_j} = 0$  en estos contornos. Método de Colocación por Puntos

Corresponde al caso:

$$\begin{aligned}
f(\mathcal{R}) &= \mathcal{R} \\
v_i &= \delta(x_i - x)
\end{aligned}$$
(2.9)

Se exige que el residuo  $\mathcal{R}$  se anule exactamente en NDOF puntos del dominio, de modo que  $\overline{u}$  coincida con u en esos puntos. Las incógnitas a determinar son los  $U_i$  en la ecuación (2.5).

#### Método de Colocación por Subdominios

El dominio  $\Omega$  se subdivide en un número NELEM de subdominios (*elementos fini*tos) disjuntos  $\Omega_k$ , y la forma integral que aplica en cada uno de ellos:

$$\int_{\Omega k} \mathcal{R} d\Omega_k = 0 \tag{2.10}$$

Las integraciones sobre el contorno se realizan del mismo modo, en el caso en que un subdominio incluya una parte algún  $\partial \Omega_j$ . Por lo tanto, el método consiste en seleccionar:

$$f(\mathcal{R}) = \mathcal{R}$$
  

$$v_i = 1 \quad si \quad x \in \Omega_k$$
  

$$v_i = 0 \quad si \quad x \notin \Omega_k$$
(2.11)

#### Método de Galerkin

Las funciones de ponderación  $v_i$  se hacen coincidir con las funciones de forma  $N_i$ . Manteniendo la división del dominio en elementos finitos, y haciendo de nuevo  $f(\mathcal{R}) = \mathcal{R}$ , se puede escribir la forma integral del siguiente modo:

$$\int_{\Omega} N_i \mathcal{R} d\Omega = \sum_{k=1}^{NELEM} \int_{\Omega k} N_i \mathcal{R} d\Omega_k = 0$$
(2.12)

Las funciones  $N_i$  se definen localmente, de modo que sean idénticamente nulas en aquellos elementos finitos que no contienen el correspondiente nodo *i*, lo que facilita la integración elemento a elemento de la expresión anterior. Este proceso se conoce comunmente como *ensamblaje matricial*. Los valores de  $U_i$  corresponden a las  $u(x_i)$ .

Método de Mínimos Cuadrados

Si se exige la minimización del error cuadrático medio, tomando:

$$\begin{aligned}
f(\mathcal{R}) &= \mathcal{R}^2 \\
v_i &= 1
\end{aligned} (2.13)$$

la condición de mínimo se expresa:

$$\frac{\partial}{\partial U_i} \left[ \langle 1, \mathcal{R}_{\Omega}^2 \rangle + \sum_j \langle 1, \mathcal{R}_{\partial \Omega_j}^2 \rangle \right] = 0$$
(2.14)

y usando (2.5) y (2.6) se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial U_i} \left[ \int_{\Omega} \left[ \mathcal{L}(\overline{u}) - b \right]^2 d\Omega + \sum_j \left[ \int_{\Omega_j} \left[ \mathcal{B}_j - h_j \right] d\Omega_j \right] \right] = 0$$
(2.15)

Si se suponen lineales los operadores  $\mathcal{L}$  y  $\mathcal{B}_j$ , se tiene:

$$\langle \mathcal{L}(N_i), \mathcal{R}_{\Omega} \rangle + \sum_j \langle \mathcal{B}_j(N_i), \mathcal{R}_{\partial \Omega j} \rangle = 0$$
 (2.16)

Esta última ecuación, una vez integrada, da lugar a un sistema de ecuaciones a partir del cual se calculan las  $U_i$ .

Desde el punto de vista computacional, el esquema más efectivo es el método de Galerkin. La obtención de la forma débil de (2.12) se realiza integrando por partes (aplicando la fórmula de Green). Se reduce así el orden de las derivadas que aparecen en el integrando en una unidad. Como es bien sabido, tal operación limita la elección de las funciones de aproximación a aquellas que satisfagan de un modo automático las condiciones de contorno esenciales no homogéneas. Las condiciones de contorno naturales resultan de la integración sobre  $\partial \Omega$ .

En el caso del problema definido por (2.2), una forma débil se escribe:

$$\langle C_p(u,x,t)\frac{\partial u}{\partial t},v\rangle + \langle k(u,x,t)\nabla u,\nabla v\rangle - \langle g_t(x,t),v\rangle - \langle q_1(u,x,t),v\rangle_{\partial} = 0$$
(2.17)  
$$u_{t=0} = u_0(x)$$
(2.18)

$$u_{t=0} = u_0(x) \tag{2.18}$$

Seleccionando NDOF funciones linealmente independientes  $N_i$  que verifiquen las condiciones de contorno de Dirichlet, y haciendo:

$$\overline{u}(x,t) = \sum_{i=1}^{NDOF} T_i(t) N_i(x)$$
(2.19)

se obtiene la fórmula de Galerkin temporalmente continua. El problema consiste en determinar las  $T_i(t)$  que verifican:

$$\langle C_p(\overline{u}, x, t) \frac{\partial \overline{u}}{\partial t}, N_i \rangle + \langle k(\overline{u}, x, t) \nabla \overline{u}, \nabla N_i \rangle - \langle g_t(x, t), N_i \rangle - \langle q_1(\overline{u}, x, t), N_i \rangle_{\partial} = 0 \quad (2.20)$$

y la condición inicial convenientemente proyectada sobe el subespacio de trabajo:

$$\overline{u}(x,0) = \overline{u}_0 \tag{2.21}$$

Las funciones de ponderación elegidas corresponden a los elementos más simples: segmentos de 2 nodos y triángulos de 3 nodos, de continuidad  $C^0$ , para los casos mono y bidimensional, respectivamente.

Si se sustituye en la expresión anterior  $\overline{u}$  y  $\dot{\overline{u}}$  por su expansión (2.19), se obtienen las expresiones de las matrices de masa y conductividad para el elemento k:

$$C_{ij}^{k} = \int_{\Omega k} C_{p} N_{i} N_{j} d\Omega_{k}$$
(2.22)

$$K_{ij}^{k} = \int_{\Omega k} \nabla^{T} N_{i} k \nabla N_{j} d\Omega_{k}$$
(2.23)

Tras añadir las condiciones de Neumann mediante integración sobre el contorno y formar el vector de cargas elemental:

$$g_i^k = \int_{\Omega k} g_t N_i d\Omega_k \tag{2.24}$$

se obtiene, ensamblando las aportaciones elementales, el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, que sólo tiene en cuenta las nolinealidades conductivas:

$$C(T)\dot{T} + K(T)T = g(T)$$
 (2.25)

Conviene resaltar que el vector de cargas depende de T, incluso si la generación térmica por unidad de volumen es independiente de la temperatura, debido a la integración sobre  $\partial \Omega_1$  de  $q_1(\overline{u}, x, t)$ .

## 2.2 Condiciones de Contorno No Lineales y Radiación en Cavidades.

Examinemos el último término de la ecuación (2.17). La forma más simple de la función  $q_1(\overline{u}, x, t)$  es:

$$q_1(\overline{u}, x, t) = q_a(x, t) \tag{2.26}$$

que corresponde a un flujo impuesto sin dependencia de la temperatura. Se tiene entonces:

$$\langle q_1(\overline{u}, x, t), N_i \rangle_{\partial} = \sum_{k=1}^{NELEM} \int_{\partial \Omega_k} q_a(x, t) N_i d\partial \Omega_k$$
 (2.27)

cuya contribución a la matriz de conductividad es nula. Si por el contrario,  $\partial \Omega_1$  es un contorno convectivo, con coeficiente de película h(u):

$$q_1(\overline{u}, x, t) = h(\overline{u})(\overline{u} - u_\infty)$$
(2.28)

resulta que:

$$\langle q_1(\overline{u}, x, t), N_i \rangle_{\partial} = \sum_{k=1}^{NELEM} \int_{\partial \Omega_k} [N_i^T T_i - u_\infty N_j] h(T_i) d\partial \Omega_k$$
(2.29)

contribuye con su primer integrando a la matriz de conductividad, de modo no lineal a través de la dependencia de h sobre el vector de temperaturas.

El problema de la incorporación de condiciones de contorno de radiación ha sido tratado en la literatura de dos modos distintos. El primero de ellos, la *aproximación de flujo superficial* [168] consiste en tratar la superficie radiante como un contorno del tipo (2.26), evaluando el flujo neto de calor que abandona la superficie elemental, y que viene dado por:

$$q_1(\overline{u}, x, t) = \sigma \epsilon(\overline{u}^4 - u_{\infty}^4) \tag{2.30}$$

donde  $\sigma$  es la constante de Stefan-Boltzmann y  $\epsilon$  la emisividad de la superficie, que puede, eventualmente, ser función a su vez de la temperatura. Se supone que el contorno es convexo, de modo que no puede autoirradiarse, y que el pozo frío a temperatura  $u_{\infty}$  es negro. El término  $q_1(\overline{u}, x, t)$  se calcula usando una aproximación de  $\overline{u}$ ,
generalmente proveniente de un iteración anterior o del paso de tiempo precedente. La cantidad resultante se ensambla en el vector de cargas g en la ecuación (2.25) como si fuese independiente de T. Este método tiene la ventaja de ser simple y no involucrar operaciones sobre la matriz de conductividad (sin alterar por tanto sus propiedades espectrales). Para fronteras con temperatura de referencia  $u_{\infty}$  constante, el método converge casi siempre, si la aproximación de partida está lo bastante próxima a la solución. Cuando  $u_{\infty}$  es función espacial o temporal, este método diverge frecuentemente. La aproximación convectiva (Wilson et al. [169]) desarrolla la dependencia del flujo radiante mediante una linealización similar a (2.28), con un coeficiente de intercambio térmico dado por:

$$h_{rad} = \sigma \epsilon (\overline{u}^3 + \overline{u}^2 u_\infty + \overline{u} u_\infty^2 + u_\infty^3)$$
(2.31)

Este esquema no difiere del convectivo no lineal salvo en la fuerte dependencia del coeficiente  $h_{rad}$  con la temperatura. Si la integración en (2.29) se realiza con la suficiente exactitud, el procedimiento no introduce errores adicionales. La nolinealidad de la ecuación se resuelve normalmente, según se encuentra en la literatura (Nickell and Hibbitt [87]), tomando las temperaturas de la iteración precedente si se resuelve un problema en régimen transitorio o utilizando valores correspondientes al paso de tiempo anterior, si se trata de un problema transitorio. Este último procedimiento 'secante', según la terminología de Hogge [63] limita la eficiencia del proceso de convergencia, según señala recientemente Osnes [102].

Durante la elaboración de esta memoria, una extensiva experimentación numérica ha puesto de manifiesto la fragilidad de la aproximación de flujo superficial, confirmada también por Stelzer y Welzel [149].

Desde un punto de vista conceptual conviene distinguir claramente entre la radiación como condición de contorno y la radiación a través de cavidades internas. En el primer caso, el intercambio térmico se involucra sólo localmente, y por tanto, el balance energético integral se realiza sobre nodos adyacentes. En el segundo caso, el flujo de calor sobre un determinado elemento en el contorno está controlado por las temperaturas de todos los elementos que pueden físicamente irradiar el segmento de contorno. De este modo, conviene considerar una cavidad radiante como un 'macroelemento', o mejor como una sucesión de elementos de contorno, donde la transmisión del calor se produce por radiación recíproca de todos los elementos de superficie presentes. Esta distinción ha sido sistemáticamente ignorada en la literatura referente al acoplamiento conducción-radiación, fundamentalmente debido a los inconvenientes numéricos que se presumen, prefiriéndose una aproximación similar al caso de radiación como condición de contorno, bien extendiendo la aproximación de flujo superficial (Osnes [102], Wolf et al. [172]), en cuyo caso la dependencia con el vector de temperaturas se concentra en el vector de cargas, bien usando la aproximación convectiva sobre todos los elementos que componen la cavidad (Chin y Frank [25], Stelzer y Welzel [149]), obteniéndose así una matriz de conductividad que depende de forma global del vector de temperaturas *sólo* en su diagonal principal. El programa comercial de cálculo ANSYS [3] adopta el primer método.

Para cálculos que involucran geometrías complicadas, el método más comúnmente utilizado ha sido desarrollar un modelo de parámetros concentrados, que tenga presente todos los mecanismos de transporte de energía (ver Hopkirk et al. [66] para una aplicación al estudio de incendios o el trabajo de Currie y Martin [35] para un problema específico de acoplamiento conducción-radiación.

Si las ecuaciones resultantes del balance térmico se ensamblan en la matriz de conductividad, ésta pierde su carácter de matriz de bandas, convirtiéndose en una matriz densa, no simétrica, típica por otra parte del método de elementos de contorno (ver Brebbia [13] o Alarcón y Reyero [5]). Antes de abordar con detalle la metodología original propuesta para llevar a cabo esta labor, se presentan brevemente las ecuaciones de intercambio radiante que intervienen en el modelo. En las referencias clásicas (Hottel y Sarofim [67]), (Sparrow y Cess [148]) o (Siegel y Howell [140]) se puede encontrar una exposición más pormenorizada.

Consideremos dos elementos superficiales de área diferencial, orientados como se muestra en la figura 2.1, siendo  $d_{ij}$  la distancia entre sus centros y  $d\omega_{ij}$  el ángulo sólido diferencial que subtiende la superficie  $dA_j$  cuando se vé desde  $dA_i$ . Si el elemento  $dA_i$ emite radiación  $\phi_i$  en la dirección de  $r_{ij}$ , la fracción de energía que llega a  $dA_j$  viene dada por:

$$d^2 \Phi_{dA_i dA_j} = \phi_i dA_i \cos\theta_i d\omega_{ij} \tag{2.32}$$



Figura 2.1: Intercambio radiante entre superficies elementales.

como:

$$d\omega_{ij} = \frac{dA_j \cos\theta_i}{d_{ij}^2} \tag{2.33}$$

se tiene:

$$d^{2}\Phi_{dA_{i}dA_{j}} = \phi_{i} \frac{\cos\theta_{j}\cos\theta_{i}}{d_{ij}^{2}} dA_{i}dA_{j}$$

$$(2.34)$$

Si las superficies emiten un flujo térmico integral de modo perfectamente difuso,

$$\Phi_i = \int_{2\pi} \phi_i d\omega = \pi \phi_i \tag{2.35}$$

se puede definir el factor de vista puntual  $dF_{dA_i dA_j}$  que representa la fracción de energía emitida por  $dA_i$  que llega sobre  $dA_j$ :

$$dF_{dA_i dA_j} = \frac{d^2 \Phi_{dA_i dA_j}}{\Phi_i} = \frac{\cos\theta_j \cos\theta_i}{\pi d_{ij}^2} dA_j$$
(2.36)

que sólo depende de la geometría relativa de los dos elementos de superficie y de la existencia de superficies de apantallamiento entre ellas.



Figura2.2: Radiación a través de una cavidad de N<sub>s</sub> superficies.

Para calcular el intercambio energético de cada área elemental, es necesario considerar la radiación incidente que proviene de todo el espacio alrededor de la superficie. Suponemos, pues, que el elemento de área pertenece a un cierto miembro de un conjunto de  $N_s$  superficies, cada una de ellas de área  $A_i$ , que forman un sistema aislado de superficie total S (figura 2.2). El principio de conservación de la energía se escribe entonces, denotando como x la coordenada espacial genérica:

$$\sum_{i=1}^{N_s} \int_{A_i} \Phi(x) dA_i = 0$$
 (2.37)

El flujo térmico que abandona la superficie  $dA_i$  viene dado por la diferencia entre la radiación de cuerpo negro emitida y la fracción absorbida de la radiación sobre la superficie, que denotaremos  $H_i(x)$ :

$$q_i(x) = \epsilon_i \sigma u_i^4(x) - \alpha_i(x) H_i(x)$$
(2.38)

donde  $\alpha_i(x)$  es la absortividad puntual de la superficie *i*. En lo que sigue, se hacen las siguientes hipótesis relativas al intercambio térmico:

a) La radiación reflejada por cada superficie es difusa.

b) La radiación emitida por cada superficie es difusa.

c) Las propiedades radiantes de los materiales involucrados son independientes de la longitud de onda.

d) La ley de Kirchhoff ( $\alpha = \epsilon$ ) es válida.

e) Las superficies son opacas y grises, es decir, la reflectividad y la emisividad de las superficie verifican:

$$\rho_i(x) + \epsilon_i(x) = 1 \tag{2.39}$$

f) El medio presente en la cavidad es perfectamente transparente.

La consideración de un medio participante se puede llevar a cabo mediante la inclusión de uno o más nodos en el interior de la cavidad siguiendo la metodología de Larsen y Howell [81]. Las ecuaciones de balance térmico pueden entonces ensamblarse en el modelo general de transmisión del calor.

La ecuación (2.38) suele escribirse de la forma:

$$q_i(x) = B_i(x) - H_i(x)$$
(2.40)

donde  $B_i(x)$  representa la radiosidad de la superficie, que se descompone a su vez en dos términos: la radiación propia y la radiación reflejada. Por lo tanto:

$$B_i(x) = \epsilon_i(x)\sigma u_i^4(x) + (1 - \epsilon_i(x))H_i(x)$$
(2.41)

Por otra parte, la energía total incidente sobre el elemento  $dA_i$  viene dada por la integral de toda la radiación emitida y reflejada por las otras superficies:

$$H_i(x) = \sum_{j=1}^{N_s} \int_{A_j} B_j(x) \frac{\cos\theta_j \cos\theta_i}{\pi d_{ij}^2} dA_j$$
(2.42)

Las igualdades (2.40), (2.41) y (2.42) constituyen un sistema de ecuaciones integrales que debe ser resuelto, conociendo la distribución de temperaturas en ciertas superficies y los flujos de calor en las restantes. En realidad, el problema acoplado con la conducción térmica sobre las paredes de la cavidad es una ecuación de equilibrio que no corresponde ni a uno ni a otro caso. Como el problema se resuelve para las variables esenciales (es decir, la temperatura) exigiendo el equilibrio de las variables naturales (es decir, los flujos térmicos), la no linealidad del sistema aparece a través de la dependencia de la radiosidad con la potencia cuarta de la temperatura. Si se conoce el flujo térmico sobre una superficie, se obtiene la radiosidad haciendo:

$$B_{i}(x) = q_{i}(x) + \sum_{j=1}^{N_{s}} \int_{A_{j}} B_{j}(x) \frac{\cos\theta_{j}\cos\theta_{i}}{\pi d_{ij}^{2}} dA_{j}$$
(2.43)

Si por el contrario, se conoce la distribución de temperaturas, se obtiene la radiosidad como:

$$B_i(x) = \epsilon_i(x)\sigma u_i^4(x) + (1 - \epsilon_i(x))\sum_{j=1}^{N_s} \int_{A_j} B_j(x) \frac{\cos\theta_j \cos\theta_i}{\pi d_{ij}^2} dA_j$$
(2.44)

en ambos casos la solución exige la integración del operador puntual de factores de vista.

Supongamos ahora que la subdivisión de la cavidad en superficies es lo bastante fina como para considerar que las cantidades  $B_i(x)$ ,  $H_i(x)$ ,  $u_i(x)$  y  $\epsilon_i(x)$  son constantes en cada superficie  $A_i$ , lo cual equivale a utilizar funciones de interpolación planas. De la integración de las ecuaciones precedentes resulta:

$$Q_{i} = \int_{A_{i}} q_{i}(x) dA_{i} = \int_{A_{i}} [B_{i}(x) - H_{i}(x)] dA_{i}$$
  

$$B_{i} = \int_{A_{i}} B_{i}(x) dA_{i} = \int_{A_{i}} [\epsilon_{i}(x) \sigma u_{i}^{4}(x) + (1 - \epsilon_{i}(x)) H_{i}(x)] dA_{i}$$
  

$$H_{i} = \int_{A_{i}} H_{i}(x) dA_{i} = \int_{A_{i}} \sum_{j=1}^{N_{s}} \int_{A_{j}} B_{j}(x) \frac{\cos\theta_{j} \cos\theta_{i}}{\pi d_{ij}^{2}} dA_{j} dA_{i}$$

$$(2.45)$$

La cantidad:

$$F_{ij} = \frac{1}{A_i} \int_{A_j} \int_{A_j} \frac{\cos\theta_j \cos\theta_i}{\pi d_{ij}^2} dA_j dA_i$$
(2.46)

se denomina factor de vista integral entre las superficies  $A_i$  y  $A_j$ , y verifica la propiedad de reciprocidad siguiente:

$$A_i F_{ij} = A_j F_{ji} \tag{2.47}$$

La doble integración en la ecuación (2.46) debe extenderse sólo a la porción de las áreas recíprocamente visibles.



Figura2.3: Subdivisión en superficies elementales.

Es importante señalar que la adopción de funciones de aproximación constantes elemento a elemento viene impuesta del hecho de considerar factores de forma entre superficies elementales. El uso de de una cuadratura de Gauss de orden superior en (2.45) implica, para mantener la exactitud de la integración, el cálculo de los factores de forma entre las subsuperficies asociadas a los diferentes puntos de Gauss (figura 2.3). Tal procedimiento resulta penalizado, desde el punto de vista numérico, debido a lo costoso del cálculo de los  $F_{ij}$  cuando se subdividen las superficies elementales en casos prácticos con gran número de grados de libertad (ver por ejemplo [44] para una aplicación en el campo aeronáutico, donde se simplifica el cálculo de factores de forma para hacer abordable el problema).

Si se conoce la matriz de factores de forma, el sistema de ecuaciones integrales se transforma en el sistema lineal (en las radiosidades  $B_i$ ) expresado por (2.45). Supongamos ahora que las únicas superficies con flujo impuesto son adiabáticas. La energía térmica que abandona entonces cada superficie *i* puede escribirse como (Sparrow y Cess [148]):

$$Q_i = A_i \sum_{j=1}^{N_s} \Lambda_{ij} \sigma \overline{T}_j^4$$
(2.48)

donde  $\overline{T}_j$  representa la temperatura media de la superficie  $A_j$  y la matriz  $\Lambda_{ij}$  viene dada por:

$$\Lambda_{ij} = \frac{\epsilon_i}{1 - \epsilon_i} (\delta_{ij} - \Psi_{ij})$$
(2.49)

con:

$$\Psi_{ij} = (\chi_{ij})^{-1} \tag{2.50}$$

y

$$\chi_{ij} = \frac{\delta_{ij} - (1 - \epsilon_i)F_{ij}}{\epsilon_i} \tag{2.51}$$

si la superficie  $A_i$  no es adiabática, y

$$\chi_{ij} = \delta_{ij} - F_{ij} \tag{2.52}$$

si la superficie  $A_i$  es adiabática.

En las expresiones precedentes,  $\delta_{ij}$  representa el tensor de Kronecker.

La suma en (2.48) debe extenderse sólo a las superficies no adiabáticas de la cavidad. La matriz  $\Lambda_{ij}$  se calcula e invierte sólo una vez si las emisividades  $\epsilon_i$  son independientes de la temperatura. En caso contrario, la matriz debe ser 'refrescada' periódicamente, con criterios que tengan en cuenta los pros y contras de tal operación:

a) Si la dependencia de  $\epsilon_i(u)$  es fuerte o no.

b) Si el número de superficies en la cavidad hace el costo del cálculo de  $\chi_{ij}^{-1}$  asequible o no.

Este inconveniente, sin embargo, es común a todos los modelos propuestos para acoplar conducción y radiación.

Como se ha indicado más arriba, siendo la radiación un mecanismo de transmisión del calor análogo a la conducción, su efecto debe incluirse en la matriz de conductividad, que proporciona la *respuesta* del sistema cuando se le excita con una determinada generación térmica volumétrica o superficial sobre el contorno, representada en el vector de cargas. Un esquema para el cálculo de la matriz de conductividad radiante, que deja libre el término g en la ecuación (2.25) se puede escribir de forma inmediata. Si se supone que la temperatura de la superficie  $A_j$  es la media de los valores nodales, se tiene:

$$Q_i = A_i \sigma \sum_{j=1}^{N_s} \frac{\Lambda_{ij}}{N_j^4} [\sum_{k=1}^{N_j} T_k]^3 \sum_{k=1}^{N_j} T_k$$
(2.53)

donde  $N_j$  indica el número de nodos presentes en el elemento j. Denotando ahora por  $U_q$  el conjunto de los elementos donde está el nodo q, tenemos que la matriz de radiatividad elemental correspondiente al elemento i no adiabático se expresa:

$$K_{pq}^{i} = \frac{A_{i}}{N_{i}} \sigma \sum_{l \in U_{q}} \frac{\Lambda_{il}}{N_{l}^{4}} [\sum_{k=1}^{N_{l}} T_{k}]^{3} \quad si \quad p \in i$$

$$K_{pq}^{i} = 0 \qquad si \quad p \notin i$$
(2.54)

mientras que si el elemento i es adiabático, para cualquier par de nodos p, q se tiene:

$$K_{pq}^i = 0 \tag{2.55}$$

Una simple inspección en la ecuación anterior permite observar que la matriz elemental de radiatividad tiene columnas idénticas. La matriz general de conductividad que resulte después de ensamblar las aportaciones elementales será por lo tanto una matriz no simétrica que habrá perdido su estructura de bandas. En capítulos sucesivos se verá que este inconveniente no es en realidad tal, ya que la formulación precedente facilita la resolución iterativa del sistema de ecuaciones no lineales resultante de la elección de un algoritmo de integración temporal determinado.

El caso monodimensional es mucho más simple de simular numéricamente, debido a la ausencia de interconexiones múltiples en la cavidad (una superficie radiante está directamente enfrentada con otra). Definiendo:

$$k_{rad} = (T_a^3 + T_a^2 T_b + T_a T_b^2 + T_b^3)$$
(2.56)

donde los subíndices a y b se refieren a los valores nodales en ambas superficies. El flujo de calor entre las dos superficies viene dado, para el caso plano, por:

$$q_{rad} = \frac{\sigma}{\frac{1}{\epsilon_a} + \frac{1}{\epsilon_b} - 1} k_{rad} (T_a - T_b)$$
(2.57)

En el caso cilíndrico, la cantidad de calor intercambiada entre las superficies es:

$$Q_{rad} = \frac{\sigma}{\frac{1}{\epsilon_a} + [\frac{1}{\epsilon_b} - 1]\frac{A_a}{A_b}} k_{rad} A_a (T_a - T_b)$$
(2.58)

La expresiones anteriores, una vez ensambladas, proporcionan una matriz de conductividad simétrica y tridiagonal, lo cual facilita la resolución del sistema de ecuaciones no lineales asociado, mediante la factorización de Thomas [27].

Si se considera un caso bidimensional *plano*, el cálculo de los factores de vista puede abordarse en dos dimensiones. El problema se complica si se trata de un caso bidimensional *cilíndrico*, donde existan oclusiones o superficies de apantallamiento, en cuyo caso los factores de vista deben ser calculados en tres dimensiones.

### 2.3 Cálculo de la Matriz de Factores de Vista.

En esta sección se repasan brevemente algunos métodos propuestos para el cálculo de los factores de vista, señalando las dificultades que aparecen en su implementación numérica, para finalmente elegir la metodología más eficaz. Un análisis más detallado puede verse en el reciente trabajo de Checchi [24].

Es importante señalar que la relación:

$$\sum_{i=1}^{N_s} F_{A_i A_j} = 1 \tag{2.59}$$

representa una expresión del principio de conservación de la energía. Por lo tanto, la existencia de un error global en el cálculo de los factores de vista implica una violación de tal principio (sea por defecto o exceso). Si se trata de un caso en régimen permanente, el problema es menor que cuando se analiza un transitorio térmico, donde se introducen fuentes o sumideros ficticios de calor a cada paso de tiempo, lo cual puede introducir errores serios si el análisis se realiza con muchos intervalos temporales. Para evitar esta dificultad se hace necesario un cálculo preciso de los factores de vista, complementado con una corrección sobre el error global. Como por otra parte, la relación de reciprocidad (2.47) debe mantenerse, la forma más sencilla de corregir el error es acumularlo sobre la diagonal principal de la matriz  $F_{ij}$ , siempre y cuando se mantenga dentro de las tolerancias fijadas a priori de acuerdo con criterios basados en la experimentación numérica.

Si el número total de elementos superficiales en la cavidad es  $N_s$ , la relación (2.47) permite obtener la matriz  $F_{ij}$  calculando sólamente  $(N_s + 1)N_s/2$  integrales.

Si el caso corresponde a geometría plana, sin superficies de apantallamiento entre las áreas en consideración, el factor de vista se calcula de forma inmediata mediante la aplicación del *método de las cuerdas* de Hottel [67] (figura 2.4).

El factor de vista viene dado por:

$$F_{AB} = \frac{(L_5 + L_6) - (L_3 + L_4)}{2L_1} \tag{2.60}$$

En el caso de geometría cilíndrica sin superficies de apantallamiento (lo que equivale a decir que el eje de simetría atraviese la cavidad y ésta no tenga tramos cóncavos),



Figura2.4: Método de las cuerdas de Hottel.



Figura2.5: Factores de vista en geometría cilindrica sin apantallamiento.

Hottel proporciona igualmente un método que evita el cálculo de integrales para la evaluación del factor de vista, mediante álgebra de factores de vista. Consideremos las dos superficies A y B, generadas por rotación de dos segmentos, de la figura 2.5. Denotando por 1, 2, 3, y 4 los discos perpendiculares al eje z definidos por rotación de los puntos 1, 2, 3, y 4 respectivamente, se tiene:

$$F_{AB} = \frac{A_1}{A_A}(F_{14} - F_{13}) - \frac{A_2}{A_A}(F_{24} - F_{23})$$
(2.61)

donde todas las áreas se calculan de forma inmediata, y los factores de vista entre discos coaxiales se hallan aplicando la fórmula:

$$F_{ij} = \frac{Y - (Y^2 - 4E^2D^2)^{1/2}}{2}$$
(2.62)

con:

$$D = \frac{z_j - z_i}{r_i} \tag{2.63}$$

$$E = \frac{r_j}{z_j - z_i} \tag{2.64}$$

у

$$Y = 1 + (1 + E^2)D^2$$
(2.65)

Si por el contrario la geometría es cilíndrica sin que el eje de simetría atraviese la cavidad, los factores de vista deben ser calculados mediante algoritmos tridimensionales.

La figura 2.6 sirve para introducir el método de proyección de Nusselt para el cálculo de factores de vista. La relación entre el área de la proyección de la superficie  $S_j$  sobre la base del hemisferio unitario y el área total de la base que vale  $\pi$  dá el factor de vista entre el elemento de área  $dA_i$  y la superficie finita  $S_j$ . El factor de vista total entre las dos superficies finitas se calcula después haciendo:

$$F_{A_iA_j} = \int_{A_i} F_{dA_iA_j} dA_i \tag{2.66}$$

Si descomponemos la superficie  $A_i$  en una serie de R subelementos de área  $S_r$ , y para cada uno de ellos calculamos el factor de vista  $F_{S_rA_j}$  mediante el procedimiento proyec-



Figura2.6: Metodo de proyección de Nusselt.

tivo de Nusselt, se tiene:

$$F_{A,A_{j}} = \sum_{r=1}^{R} F_{S_{r}A_{j}} S_{r}$$
(2.67)

La parte más costosa desde el punto de vista numérico en el cálculo de los  $F_{S_rA_j}$ es la determinación del contorno aparente de  $A_j$  vista desde  $S_r$ . El procedimiento semianalítico de Morizumi [97] puede utilizarse cuando  $A_j$  es mucho más grande de  $S_r$ . Si no es así, debe procederse numéricamente mediante un método de trazado de rayos para determinar qué fracción de  $A_j$  proyecta área efectiva sobre el hemisferio unidad. La breve experiencia acumulada durante la elaboración de este trabajo, confirmada por la experimentación numérica de Checchi [24] (donde la integral (2.66) se efectúa mediante transformación paramétrica y ulterior cuadratura de Gauss) indica que el método de Nusselt ofrece un error numérico aceptable sólo con subdivisiones espaciales tan finas que hacen prácticamente inabordable el cálculo de una cavidad con un número relativamente grande de elementos.

El método de Stokes, propuesto por Sparrow [147], consiste en reducir la integral



Figura2.7: Método de Stokes.

doble de superficie en la ecuación (2.46) a una integral curvilínea doble, por aplicación del teorema de Stokes (ver figura 2.7):

$$F_{ij} = \frac{1}{\pi A_i} \int \int_{A_j} \int \int_{A_j} \frac{\cos\theta_i \cos\theta_j}{d_{ij}^2} dA_i dA_j = \frac{1}{2\pi A_i} \oint_{C_i} \oint_{C_j} \ln d_{ij} dl_i \cdot dl_j$$
(2.68)

La doble integración de superficie se discretiza, descomponiendo cada superficie en R elementos:

$$F_{ij} = \frac{1}{\pi A_i} \sum_{r=1}^R \sum_{s=1}^R \frac{\cos\theta_r \cos\theta_s}{d_{rs}^2} A_r A_s$$
(2.69)

Este esquema es usado en la mayor parte de los códigos de cálculo anteriores a 1980 ([46], [116], [173]).

La discretización de la ecuación sobre el contorno se escribe, una vez divididos los contornos aparentes  $C_i^*$ ,  $C_j^*$  en R segmentos rectos  $l_r$ ,  $l_s$ :

$$F_{ij} = \frac{1}{2\pi A_i} \sum_{r=1}^R \sum_{s=1}^R ln d_{rs} l_r \cdot l_s$$
(2.70)



Figura2.8: Algoritmo de Mitalas y Stephenson.

La ventaja de este segundo método es evidente si se tiene en cuenta que el número de sumandos crece con  $R^2$  en el primer caso, pero es proporcional a R en el segundo. Los resultados numéricos obtenidos en varias pruebas coinciden con los de Shapiro [137], quien además compara la eficiencia de estos dos algoritmos con el método propuesto por Mitalas y Stephenson [95], resultante de integrar analíticamente la primera de las integrales de contorno. En el caso de que las dos superficies sean cuadriláteros, se tiene, con referencia a la figura 2.8:

$$F_{ij} = \frac{1}{2\pi A_i} \sum_{p=1}^{4} \sum_{q=1}^{4} \Psi(p,q) \int_{C_p} \left[ (T \cos\phi \ln T + S \cos\Theta \ln S + U\omega - R) dv \right]_{p,q}$$
(2.71)

donde S, T, U,  $\phi,$ y $\omega$ son funciones de la coordenada v<br/> y

$$\Psi(p,q) = l_p l_q + m_p m_q + n_p n_q \tag{2.72}$$

La ecuación (2.71) se discretiza:

$$F_{ij} = \frac{1}{2\pi A_i} \sum_{p=1}^{4} \sum_{q=1}^{4} \Psi(p,q) \sum_{r=1}^{R} [(T \cos\phi \ln T + S \cos\Theta \ln S + U\omega - R) \|v_r\|]_{p,q}$$
(2.73)



Figura2.9: Comparación de los métodos AI, LI, y MS (1).

En las figuras 2.9 y 2.10 se muestran los resultados de la integración numérica, para un caso típico, como función del número de divisiones del contorno. Los métodos de integral doble de superficie, integral doble curvilínea y Mitalas y Stephenson se denotan respectivamente como AI, LI, y MS.

Si en geometría cilíndrica se detecta la presencia de superficies de apantallamiento, la forma más adecuada de calcular los factores de vista es generar por rotación sobre el eje z un cierto número  $N_{rot}$  de superficies cuadrangulares y aplicar el algoritmo tridimensional precedente a cada uno de ellos, obteniendo el factor de vista global mediante la fórmula siguiente, que hace referencia a la figura 2.11:

$$F_{IJ} = \sum_{k=1}^{N_{rot}} F_{ik}$$
(2.74)

El programa FACET (Shapiro [136]) incorpora todos los métodos descritos más arriba, además de incluir algoritmos para la consideración de las superficies de apantallamiento y autoapantallamiento. Dos superficies se ven completamente si las dos desigualdades siguientes se verifican para cada uno de sus nodos i, j:



Figura2.10: Comparación de los métodos AI, LI, y MS (2).



Figura 2.11: Factor de vista en geometría cilíndrica con apantallamientos.



Figura 2.12: Superficies de apantallamiento.

$$\begin{aligned} r_{ij} \cdot n_i &> 0 \\ r_{ji} \cdot n_j &> 0 \end{aligned}$$
 (2.75)

Las ecuaciones anteriores son las condiciones de no autoapantallamiento y representan 16 y 4 desigualdades para los casos tridimensional y bidimensional, respectivamente.

La sombra de una tercera superficie interpuesta entre los dos elementos en consideración se tiene en cuenta según ilustra la figura 2.12. La contribución al sumatorio de las subsuperficies 1 y 3 no se incluye, debido a que la línea  $r_{13}$  intersecta la superficie K.

Cuando se detecta la existencia de apantallamientos, el único método de integración posible es el de la integral doble de área. En cualquier otro caso, se emplean los algoritmos optimizados descritos anteriormente.

El modelo desarrollado adopta las subrutinas básicas de FACET para el cálculo de los factores de forma, una vez comprobado su correcto funcionamiento con tiempos de ejecución aceptables.

## 2.4 Intercambio Térmico por Convección.

En esta sección se aborda el problema del acoplamiento térmico entre la estructura sólida y su refrigerante. Una formulación general de las ecuaciones de elementos finitos para problemas mixtos de conducción-convección forzada puede derivarse de las ecuaciones diferenciales que describen el balance de energía entre el fluído y la pared en un conducto típico. La metodología seguida es la usual, descrita, en Hsu y Nickell [69], Zienkiewicz y Heinrich [176], Thornton y Wieting [157]. El tubo de la figura 2.13 tiene paredes delgadas de sección constante  $A_p$  y una sección de paso,  $A_p$ , de forma arbitraria, linealmente variable con la coordenada x. Por su interior circula un caudal másico de fluído de valor  $\dot{m}$ , en general función del tiempo. La hipótesis básica consiste en estimar la energía de todo el fluído como característica única de su temperatura en el centro del conducto  $T_f$ , sin considerar la mecánica del problema, de modo que  $T_f$ es función sólo de la coordenada espacial en la dirección del movimiento del fluído, y eventualmente, del tiempo. La velocidad del fluído v se calcula:

$$v(x) = \frac{\dot{m}}{\rho_f A_f} \tag{2.76}$$

donde  $\rho_f$  es la densidad del fluído en el elemento de tubo considerado.

Supuesto conocido el coeficiente de película h entre la pared del tubo y el fluído, el calor intercambiado en el elemento se escribe, denotando por  $T_p$  la temperatura de la pared y como  $S_t$  la superficie de intercambio térmico:

$$Q = hS_t(T_p - T_f) \tag{2.77}$$

El coeficiente h depende generalmente de las temperaturas del fluído y la pared de forma complicada, a través de la correlación empírica que relaciona el *número de Nusselt* con los números adimensionales que caracterizan el flujo, y la temperatura de pared:

$$Nu = \frac{hD_h}{k_f} = f(Re, Pr, T_p) \tag{2.78}$$

donde  $D_h = 4A_f/p_h$  es el diámetro hidráulico local del conducto, siendo  $p_h$  el perímetro mojado del tubo,  $k_f$  es la conductividad térmica del fluído y Re, Pr son respectivamente los números de Reynolds y Prandtl, definidos como es bien sabido por las expresiones:



Figura2.13: Modelo de intercambio térmico en un conducto.

$$Re = \frac{vD_h\rho_f}{\mu_f} \tag{2.79}$$

у

$$Pr = \frac{\mu_f C p_f}{k_f} \tag{2.80}$$

donde  $Cp_f$  y  $\mu_f$  representan el calor específico y la viscosidad dinámica del fluído, respectivamente. Si representamos con el subíndice p las propiedades correspondientes a la pared, el balance energético para los dos materiales en un volumen de control de espesor dx se escribe:

$$-\frac{\partial}{\partial x}(k_f A_f \frac{\partial T_f}{\partial x}) + \dot{m} C p_f \frac{\partial T_f}{\partial x} - h p_h (T_p - T_f) + \rho_f C p_f A_f \frac{\partial T_f}{\partial t} = 0$$
(2.81)

para el fluído y

$$-\frac{\partial}{\partial x}(k_p A_p \frac{\partial T_p}{\partial x}) + h p_h (T_p - T_p) + \rho_p C p_p A_p \frac{\partial T_p}{\partial t} = 0$$
(2.82)

para la pared.

El término convectivo está representado por el tercer término en la ecuación (2.81). La velocidad de transporte convectivo corresponde a  $\dot{m}$ , que en realidad es proporcional a la velocidad a través de la ecuación de continuidad. Este término convierte el sistema de ecuaciones diferenciales en localmente *hiperbólico*. Las consecuencias numéricas de tal transformación son conocidas. Si el *número local de Péclet*, definido como:

$$Pe = \frac{Cp\dot{m}L}{kA_f} \tag{2.83}$$

(donde L es la longitud del elemento) es mayor que un cierto valor, la solución numérica que se obtiene con un esquema *centrado* de residuos ponderados presenta oscilaciones irregulares que distorsionan el resultado del cálculo. La razón de este fenómeno puede entenderse intuitivamente si consideramos que el número de Péclet representa la razón entre el transporte de energía convectivo y el conductivo. A pesar de su similitud con el número de Reynolds, conviene distinguir claramente entre estos dos parámetros adimensionales, pues la longitud característica del número de Reynolds es un diámetro hidraulico asociado a un intercambio térmico, mientras que la longitud característica del número de Péclet es un tamaño de malla. Por esta razón en alguna referencia se le denomina número de Reynolds de malla.

El carácter parabólico de la ecuación (2.81) se debilita para números de Péclet grandes, convirtiéndose en puramente hiperbólica cuando la conducción resulta completamente despreciable con relación a la convección (como es nuestro caso). La primera consecuencia de esto es que las condiciones de contorno no pueden ya ser especificadas a la entrada y a la salida del conducto, sino sólamente en uno de estos dos puntos, por haber perdido una unidad el orden de la ecuación diferencial que rige el fenómeno.

Para ser más precisos, consideremos la ecuación diferencial:

$$-k\frac{d^{2}T}{dx^{2}} + V\frac{dT}{dx} = 0$$
(2.84)

en el intervalo (0,1), donde V es el campo de velocidades de convección, supuesto conocido y que asumiremos constante, con condiciones de contorno de primera especie T(0) = 0, T(1) = 1.

Si dividimos el intervalo en M elementos de longitud  $\delta = 1/M$ , y adoptamos funciones de interpolación lineales, la ecuación de equilibrio nodal que se obtiene tras aplicar el método de Galerkin con funciones de ponderación iguales a las funciones de interpolación es:

$$-\left(\frac{k}{\delta^2} - \frac{V}{2\delta}\right)T_{j+1} + 2\frac{k}{\delta^2}T_j - \left(\frac{k}{\delta^2} + \frac{V}{2\delta}\right)T_{j-1} = 0 \quad j = 2, 3, \dots M$$
(2.85)

donde es fácil reconocer los operadores de diferencias finitas centradas [125]:

$$\frac{d^2T}{dx^2} \simeq \frac{-T_{i+1} + 2T_i - T_{i-1}}{\delta^2}$$
(2.86)

у

$$\frac{dT}{dx} \simeq \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2\delta} \tag{2.87}$$

El sistema de ecuaciones (2.85), unido a las condiciones  $T_1 = 0$ ,  $T_{M+1} = 1$  proporciona un sistema de ecuaciones cuya solución general, utilizando la analogía entre ecuaciones en diferencias y ecuaciones diferenciales ordinarias [58], se escribe de la forma:

$$T_j = A_1 + B_1 \left(\frac{k\delta^{-2} + 0.5\delta^{-1}V}{k\delta^{-2} - 0.5\delta^{-1}V}\right)^j \quad j = 2, 3, \dots M$$
(2.88)

donde las constantes  $A_1$  y  $B_1$  se determinan a partir de las condiciones de contorno. Si se verifica:

$$P = \frac{V\delta}{k} > 2 \tag{2.89}$$

resulta que la cantidad que multiplica a  $B_1$  en (2.88) es positiva para nodos con j par y negativa para nodos con j impar, lo cual provoca la aparición de oscilaciones espúreas no deseadas en la solución numérica del problema.

Es importante señalar que la ecuación (2.89) es condición necesaria y suficiente para garantizar el carácter diagonalmente dominante (y por lo tanto, 'bien condicionado') de la matriz del sistema de ecuaciones resultante, como se puede comprobar por simple inspección en (2.85).

Por otra parte, el esquema centrado precedente es el más sencillo que presenta un orden de exactitud  $O(\Delta x^2)$ .

La técnica de ponderación contracorriente ('upwinding' en la terminología inglesa) se justifica conceptualmente en la consideración de que el fluído, cuando atraviesa el nodo j mantiene todavía sus propiedades correspondientes al nodo j-1. Roache [127]



Figura2.14: Funciones de interpolación y funciones de ponderación contracorriente.

y Spalding [146] introdujeron la técnica en un contexto de diferencias finitas, aproximando la primera derivada en la ecuación (2.84) mediante la expresión descentrada a contracorriente:

$$\frac{dT}{dx} \simeq \frac{T_i - T_{i-1}}{\delta} \tag{2.90}$$

Desde el punto de vista de los elementos finitos, la ponderación a contracorriente constituye un método de Petrov-Galerkin con funciones de ponderación sobredimensionadas en la dirección contraria al flujo (figura 2.14). Las funciones de ponderación utilizadas (Christie et. al. [26]) son cuadráticas a trozos y vienen dadas por:

$$v_{j}(x) = N_{j}(x) + \frac{\alpha_{j}}{\delta_{j}}W(\frac{x-x_{j-1}}{\delta_{j}}) \quad si \quad x_{j-1} \le x \le x_{j}$$

$$v_{j}(x) = N_{j}(x) + \frac{\alpha_{j}}{\delta_{j+1}}W(\frac{x_{j+1}-x}{\delta_{j+1}}) \quad si \quad x_{j} \le x \le x_{j+1}$$

$$(2.91)$$

donde  $N_j(x)$  es la función de interpolación lineal,  $\delta_j = x_j - x_{j-1}$ ,  $\alpha_j$  es el parámetro de contracorriente asociado al nodo j, y la función W se define de modo coherente con

las  $N_j$ :

$$W(t) = 3t(1-t)$$
(2.92)

El esquema en diferencias resultante, suponiendo elementos iguales de longitud  $\delta$ , y parámetro de contracorriente uniforme para todos los nodos de valor  $\alpha$ , se escribe:

$$-\left(\frac{k}{\delta^2} - \frac{V}{2\delta}(1-\alpha)\right)T_{j+1} + 2\frac{k}{\delta^2}\left(1 + \frac{\alpha V\delta}{2k}\right)T_j - \left(\frac{k}{\delta^2} + \frac{V}{2\delta}(1+\alpha)\right)T_{j-1} = 0 \quad j = 2, 3, \dots M$$
(2.93)

Con la definición de P dada en (2.89), la solución general de la ecuación en diferencias se escribe ahora:

$$T_j = A_2 + B_2 \left(\frac{1 + 0.5P(1 + \alpha)}{1 - 0.5P(1 - \alpha)}\right)^j \quad j = 2, 3, \dots M$$
(2.94)

de modo que la solución no presentará oscilaciones espúreas si se verifica una de las dos condiciones siguientes:

$$\begin{array}{rcl}
P &\leq 2 \\
\alpha &\leq 1 - \frac{2}{P}
\end{array}$$
(2.95)

Nótese la *no simetría* de las matrices asociadas a los esquemas numéricos precedentemente expuestos. La matriz global resultante del ensamblaje de estos elementos resulta por lo tanto igualmente no simétrica.

Para números de Péclet grandes puede obtenerse una solución libre de oscilaciones sin más que adoptar el esquema contracorriente completo  $\alpha = 1$ .

Puede demostrarse (Christie et al. [26]) que la solución proporcionada es exacta sobre los nodos si se verifica:

$$\alpha = \frac{\coth P}{2} - \frac{2}{P} \tag{2.96}$$

A pesar de la eliminación de las oscilaciones, el método descrito es sólo exacto de orden  $O(\Delta x)$ . Si se examina la ecuación (2.93), puede verse que coincide con la aproximación centrada correspondiente a la ecuación:

$$-k(1 + \frac{\alpha V\delta}{2k})(\frac{d^2T}{dx^2}) + V\frac{dT}{dx} = 0$$
(2.97)

por lo cual se tiene que el esquema contracorriente añade una disipación numérica de valor:

$$k^{\star} = \frac{\alpha V \delta}{2} \tag{2.98}$$

En la ecuación (2.84) considerada se ha pasado por alto la dependencia temporal. Sin embargo, el método de Petrov-Galerkin descrito influye sobre la formulación de la matriz de masa, que es ahora función del parámetro  $\alpha$ .

Si se integran elemento a elemento las ecuaciones (2.81) y (2.82) mediante este método, se obtiene la siguiente ecuación matricial (Thornton and Wieting [157]), con referencia a la numeración nodal de la figura 2.13:

$$\begin{pmatrix} C_f & 0\\ 0 & C_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{T}_f\\ \dot{T}_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} K_f + K_h + K_c & -K_h\\ -K_h & K_p + K_h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_f\\ T_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\ 0 \end{pmatrix}$$
(2.99)

donde:

$$T_f = \begin{pmatrix} T_I \\ T_J \end{pmatrix} \quad y \quad T_p = \begin{pmatrix} T_L \\ T_K \end{pmatrix}$$
(2.100)

y las matrices (2x2)  $C_f, C_p, K_f, K_p, K_h$  y  $K_c$  resultan de la forma:

$$C_{p} = \frac{\rho_{p} C p_{p} A_{p}}{6} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} + \frac{\alpha \rho_{p} C p_{p} A_{p}}{4} \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$
(2.101)

$$C_f = \frac{\rho f C p_f A_f}{6} \begin{pmatrix} 2 & 1\\ 1 & 2 \end{pmatrix} + \frac{\alpha \rho f C p_f A_f}{4} \begin{pmatrix} -1 & -1\\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$
(2.102)

$$K_{c} = \frac{\dot{m}Cp_{f}}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1\\ -1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\alpha \dot{m}Cp_{f}}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1\\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$
(2.103)

$$K_{h} = \frac{hp_{h}L}{6} \begin{pmatrix} 2 & 1\\ 1 & 2 \end{pmatrix} + \frac{\alpha hp_{h}L}{4} \begin{pmatrix} -1 & -1\\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$
(2.104)

$$K_p = \frac{k_p A_p}{L} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$
(2.105)

$$K_f = \frac{k_f A_f}{L} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$
(2.106)

En estas matrices el primer término representa la aproximación centrada, mientras que el segundo es la contribución de la función de ponderación contracorriente. Nótese que



Figura2.15: Oscilaciones espúreas en un problema de convección-difusión.

la única asimetría correspondiente a la aproximación centrada es aportada precisamente por el operador convectivo  $K_c$ .

La figura 2.15 muestra los resultados obtenidos por Thornton en un problema práctico [155]. Para tener en cuenta la transferencia de calor por conducción a través del material entre dos tubos consecutivos, un canal se descompone en dos elementos cuadrangulares de conducción-convección, asociándose a cada uno de ellos un flujo másico  $\dot{m}/2$  y superficies de intercambio térmico igualmente divididas por 2. Se añaden elementos conductivos, es decir, triángulos lineales de configuración optimizada (eligiendo la diagonal de longitud mínima para definir los dos triángulos) en el caso bidimensional, y elementos lineales de 2 nodos en el caso monodimensional, oportunamente afectados de un coeficiente de área de paso o factor de escala, igual a la razón entre las áreas de conducción y total de la sección (figura 2.16).

En el caso de geometría cilíndrica con tubos orientados en dirección horizontal, el número de tubos y su diámetro deben ser compatible con la posición radial del elemento, de modo que no se superpongan. El factor de escala anteriormente citado se calcula singularmente elemento a elemento. Llamando  $N_t$  al número de tubos por



Figura2.16: Elementos conductivos y convectivos intercalados.

unidad de longitud en la dirección perpendicular al plano de cálculo, para cada elemento se tiene un factor de escala:

$$f_e = 1 - N_t d_m (2.107)$$

para el caso plano, donde  $d_m$  es el diámetro medio del tubo en el elemento en consideración. Si  $N_t$  es el número de tubos *total* (es decir, en  $2\pi$  radianes) en el caso cilíndrico se tiene:

$$f_e = 1 - \frac{N_t d_m}{2\pi r_m}$$
(2.108)

donde  $r_m$  es la coordenada radial del centro del elemento.

La compatibilidad geométrica exige en ambos casos que el factor de escala esté comprendido entre 0 y 1.

Las propiedades físicas del refrigerante que se han implementado en el modelo corresponden a las tablas termodinámicas del agua incluídas en el programa de cálculo termohidraulico CATHARE [21], desarrollado por el *Commissariat à l'Enérgie Atom*- ique francés, mediante el cual se han desarrollado estudios termohidraulicos globales (de ciclo termodinámico cerrado) de los canales de refrigeración de las componentes enfrentados con el plasma. Aplicando la ecuación de continuidad en cada elemento, se obtiene la velocidad local del fluído, pudiéndose así obtener el número de Reynolds y, por aplicación de la correlación adecuada, calcular el coeficiente local de película h que debe usarse en la matriz  $K_h$ .

# Capítulo 3 Discretización Temporal.

En este capítulo se presenta la metodología adoptada para la resolución práctica del problema parabólico objeto de estudio.

Se ha realizado un esfuerzo para identificar los algoritmos más adecuados para la resolución del problema con precisión numérica controlada y de modo computacionalmente eficiente.

En sucesivos capítulos se demostrará que los métodos de integración temporal implícitos o semi-implícitos constituyen una herramienta muy adecuada para el tratamiento de problemas asociados a la ecuación no lineal de la difusión, incluso si el sistema de de ecuaciones resultante de la discretización mediante elementos finitos resulta mal condicionado por la presencia de constantes de tiempo diferentesentre sí en algún orden de magnitud.

Este carácter rígido del sistema de ecuaciones no lineales proviene del acoplamiento de mecanismos de transferencia del calor esencialmente diferentes, como son la conducción, la radiación y la convección forzada, y de la imposición de condiciones de contorno temporalmente discontinuas.

Las desventajas tradicionalmente asociadas a los métodos implícitos (es decir, la necesidad de invertir matrices una o más veces en cada paso de tiempo) se soslayarán mediante varios métodos iterativos que permiten reducir el tiempo de cálculo de forma significativa y son además adecuados para adaptarse a la talla del problema.

La experimentación numérica se extiende al caso elíptico de régimen permanente, aunque el potencial de la metodología se pone verdaderamente de manifiesto cuando se tratan casos transitorios, donde se obtienen resultados de convergencia notables sin necesidad de recalcular a cada paso de tiempo la matriz jacobiana (y lo que es más importante, sin refactorizarla).

Se mantiene así la gran ventaja de los métodos implícitos, es decir, su carácter incondicionalmente estable, que permite desarrollar posteriormente en el capítulo 7 un algoritmo original de control del error numérico de integración temporal y ajuste automático del paso de tiempo.

La conclusión fundamental de este estudio es que, para el tipo de ecuación tratada, el método ideal para resolver el problema no lineal es un método iterativo con precondicionamiento de la matriz iterante. Esta conclusión, sin embargo, debe ser asumida con reparos para casos tridimensionales, donde la operación de inversión de la matriz de precondicionamiento puede ser un tarea computacionalmente inabordable. Para tales problemas, donde el número de grados de libertad involucrados es muy grande, sólamente algoritmos de factorización parcial y de partición explícita-implícita (óptimos para su implementación sobre máquinas paralelas) pueden ser efectivos.

#### 3.1 Algoritmos de 2 niveles.

En esta sección repasaremos brevemente los esquemas más usuales empleados en la integración de la ecuación semidiscreta de Galerkin:

$$C(T)\dot{T} + K(T)T = g(T,t)$$
(3.1)

donde las matrices C(T), K(T) son el resultado de ensamblar los elementos conductivos (en general no lineales), los elementos de cavidad radiante y los elementos de acoplamiento conducción-convección forzada descritos en el capítulo precedente, y t representa el tiempo. De igual modo suponemos que el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden (3.1) contiene las condiciones de contorno de primera y segunda especie. Douglas y Dupont dan, en dos referencias ya clásicas, estimaciones sobre el error y la convergencia de varios algoritmos de 2 puntos para la integración de ecuaciones parabólicas constitutivamente no lineales [42], y no lineales sobre el contorno [43]. Nickell y Hibbit [87] fueron quizá los primeros en realizar un estudio comparativo entre los diferentes métodos de paso simple propuestos. Por su parte, Comini et al. [28] extendieron el estudio comparativo a algoritmos de 3 niveles temporales (ver por ejemplo Dupont et al. [45]), aplicándolos al problema de Stefan, donde la no linealidad de la ecuación (3.1) se concentra en la matriz de masa C(T). Más recientemente, Hogge [64] pasa revista a un gran número de métodos, comparándolos de modo exhaustivo, únicamente desde el punto de vista del error de integración, sin presentar resultados sobre el costo numérico relativo de cada procedimiento.

El sistema de ecuaciones (3.1), unido a la condición inicial:

$$T(0) = T_0$$
 (3.2)

puede discretizarse en el tiempo, adoptando la siguiente expresión aproximada para la derivada temporal:

$$\dot{T} \simeq \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t} \tag{3.3}$$

Los subíndices denotan el instante de cálculo (con las temperaturas coherentes) de cada magnitud. El método de la regla trapezoidal generalizada (MRTG) se escribe:

$$T_{n+1} = T_n + \Delta t [(1-\theta)(-C_n^{-1}K_nT_n + C_n^{-1}g_n) + (\theta)(-C_{n+1}^{-1}K_{n+1}T_{n+1} + C_{n+1}^{-1}g_{n+1})]$$
(3.4)  
donde  $\theta$  es el usual parámetro de integración, que verifica:

$$0 \le \theta \le 1 \tag{3.5}$$

El posible atractivo del método radica en que el sistema de ecuaciones resultante, si se almaceman las variables correspondientes al paso de tiempo precedente en un único vector, resulta no lineal en la variable  $T_{n+1}$ . Este método, sin embargo, no hereda las propiedades de estabilidad correspondientes al caso lineal, con matrices C y Ksimétricas definidas positivas e independientes de la temperatura (Hughes [70]). En la misma referencia, sin embargo, se demuestra la estabilidad del método del punto medio generalizado (MPMG):

$$T_{n+1} = T_n + \Delta t \left[ -C_{n+\theta}^{-1} K_{n+\theta} (\theta T_{n+1} + (1-\theta)T_n) + C_{n+\theta}^{-1} (\theta g_{n+1} + (1-\theta)g_n) \right]$$
(3.6)

si se verifica:

$$0.5 \le \theta \le 1 \tag{3.7}$$

Las opciones más frecuentes sobre el parámetro  $\theta$  son bien conocidas:

 $\theta = 0$  Método explícito de Euler.  $\theta = 1/2$  Método de Crank-Nicolson.  $\theta = 2/3$  Método de Galerkin.  $\theta = 1$  Método total implícito.

Los tres últimos esquemas son incondicionalmente estables con las hipótesis formuladas más arriba sobre el caracter simétrico definido positivo de las matrices K y C. El caso  $\theta = 0.5$  (Crank-Nicolson) presenta además una exactitud en la integración temporal de orden  $O(\Delta t^2)$ , exactamente como en el caso lineal.

Nótese que en el caso lineal los esquemas MPMG y MRTG son idénticos (Zienkiewicz y Parekh [175]).

El cálculo efectivo del transitorio se resuelve entonces exigiendo el equilibrio energético para  $t = t_n + \theta \Delta t$ , resolviendo la ecuación no lineal en  $T_{n+\theta}$ :

$$T_{n+\theta} = \left[ K_{n+\theta} + \frac{1}{\theta \Delta t} C_{n+\theta} \right]^{-1} \left[ \frac{1}{\theta \Delta t} C_{n+\theta} T_n + g_{n+\theta}^* \right]$$
(3.8)

y calculando después el vector de temperaturas al final del paso de tiempo:

$$T_{n+1} = \frac{T_{n+\theta} - (1-\theta)T_n}{\theta}$$
(3.9)

Las ecuaciones anteriores evidencian que la solución numérica calculada es más exacta en los tiempos  $t_{n+\theta}$  que en los tiempos  $t_n$ . Una estrategia adecuada de impresión de datos puede mejorar el aspecto de la solución obtenida, limitando las oscilaciones que aparecen debido al escaso amortiguamiento de los factores de amplificación negativos.

Conviene señalar que el vector de cargas utilizado en (3.8) no es el vector correspondiente a  $T_{n+\theta}$ , y  $t_n^* + \Delta t$ , sino más bien la media:

$$g_{n+\theta}^{\star} = \theta g_{n+1} + (1-\theta)g_n \simeq g_n + \theta$$
(3.10)

siendo la segunda aproximación en (3.10) válida sólo si la no linealidad del vector de cargas es débil, o su dependencia con el tiempo puede considerarse lineal durante el paso. Encontramos aquí por lo tanto un nuevo argumento a favor de la incorporación de los flujos radiantes en la matriz de conductividad, reservando para g cargas térmicas de contorno y volumétricas.

El método de Galerkin  $\theta = 2/3$  aparece de forma automática si se aplica una función de interpolación lineal en el tiempo entre los instantes  $t_n$  y  $t_{n+1}$  y se integra la ecuación temporalmente contínua con funciones de ponderación igualmente lineales, es decir si se aplica una técnica de elementos finitos en la variable temporal (Zienkiewicz [177]). A pesar de ser exacto  $O(\Delta t)$ , el esquema amortigua los armónicos de alta frecuencia más rápidamente que el método de Crank-Nicolson (Donéa [40]).

El método de Euler es el único que permite evitar la resolución de un sistema de ecuaciones no lineales a cada paso de tiempo, siempre y cuando el cálculo de C se realice mediante funciones de ponderación diferentes que conduzcan a una matriz de masa diagonal (matriz de masa concentrada). Sin embargo, las restricciones sobre el valor del paso de tiempo que impone este método lo hacen desaconsejable para analizar transitorios con varias constantes de tiempo superpuestas.

## 3.2 Estabilidad y Convergencia.

Las consideraciones precedentes sobre la estabilidad hacen referencia, sin embargo, sólamente a la ecuación de la difusión del calor. El acoplamiento con elementos convectivos y radiativos altera las propiedades numéricas de los esquemas propuestos.

La estabilidad de un método de integración de dos pasos viene determinada, como es bien sabido, por las características de la *matriz de amplificación* (Ritchmyer y Morton [125]):

$$G(T, \Delta t) = (C(T) + \theta \Delta t K(T))^{-1} (C(T) - (1 - \theta) \Delta t K(T))$$
(3.11)

ya que el error numérico se propaga de un paso de tiempo a otro según la expresión:

$$e_{n+1} = G(T_{n+\theta}, \Delta t)e_n \tag{3.12}$$

La estabilidad del método requiere que el error se mantenga acotado, es decir, que el radio espectral de la matriz  $G(T, \Delta t)$  verifique:

$$\rho(G(T_{n+\theta}, \Delta t)) < 1, \quad \forall n \tag{3.13}$$

lo cual equivale (Ciarlet [27], o Varga [159]) a poder encontrar, para cada paso de tiempo n, una norma matricial  $\|\cdot\|_n$  que cumpla:

$$\|(G(T_{n+\theta},\Delta t))\|_n < 1, \quad \forall n$$
(3.14)

La condición (3.13) se escribe del siguiente modo, en función de los autovalores de la matriz  $C_{n+\theta}^{-1}K_{n+\theta}$ , que denotamos como  $\lambda_i$ :

$$|\mu_i| = |\frac{1 - (1 - \theta)\lambda_i \Delta t}{1 + \theta\lambda_i \Delta t}| < 1, \quad i = 1, 2, \dots NN$$
(3.15)

donde NN es el número de grados de libertad del sistema.

Como por desgracia la matriz  $C_{n+\theta}^{-1}K_{n+\theta}$  no es simétrica definida positiva en el caso general, nada se puede afirmar sobre el signo de los  $\lambda_i$ , y el resultado general para el problema conductivo no se puede extender al problema mixto conducción-radiación. Sin embargo, la experiencia numérica acumulada demuestra que el esquema de Crank-Nicolson es estable, si la matriz de radiación se calcula a partir de una distribución de temperaturas con sentido físico. Temperaturas negativas equivalen a conductividades negativas, por ejemplo, en el caso monodimensional, lo cual invierte el sentido de los flujos de calor y provoca la divergencia inmediata del procedimiento numérico.

Varios esquemas de linealización se han propuesto para tratar la ecuación (3.8):

(a) La más sencilla de las aproximaciones es simplemente adoptar:

$$\begin{array}{rcl} K_{n+\theta} &\simeq & K_n \\ C_{n+\theta} &\simeq & C_n \end{array} \tag{3.16}$$

obviamente, esta aproximación, además de no asegurar las características de convergencia procedentes del esquema original, reduce sensiblemente la magnitud del paso de tiempo utilizable (la aproximación debe ser válida con una tolerancia establecida previamente que limita el  $\Delta t$  aplicable).

(b) Método de predicción-corrección. La resolución del sistema de ecuaciones no lineales se sustituye por la solución de *dos sistemas lineales*:



Figura 3.1: Error en la integración temporal (Algoritmos de paso simple).

$$T_{\star} = \left[ K_n + \frac{1}{\theta \Delta t} C_n \right]^{-1} \left[ \frac{1}{\theta \Delta t} C_n T_n + g_n \right]$$
(3.17)

y, denotando con  $T_m = \theta T_\star + (1 - \theta)T_n$ :

$$T_{n+1} = \left[ K_m + \frac{1}{\theta \Delta t} C_m \right]^{-1} \left[ \frac{1}{\theta \Delta t} C_m T_n + g_m \right]$$
(3.18)

El esquema conserva exactitud  $O(\Delta t^2)$  si  $\theta = 0.5$  [42], pero requiere un esfuerzo computacional considerable al implicar la factorización de dos matrices cada paso de tiempo.

(c) Extrapolación de la temperatura de cálculo de los operadores matriciales:

$$\begin{array}{rcl}
K_{n+\theta} &\simeq & K_{(1+\theta)n-\theta(n-1)} \\
C_{n+\theta} &\simeq & C_{(1+\theta)n-\theta(n-1)}
\end{array}$$
(3.19)

Este esquema también retiene las propiedades de convergencia de la ecuación general, y requiere sólo una factorización por paso de tiempo.

La figura 3.1 muestra los resultados obtenidos por Hogge [64] en la comparación de los métodos MRTG y MPMG para la resolución de la ecuación escalar (con un único
grado de libertad):

$$\dot{x}(t) + (1 + 0.03x)x(t) = 0 x(0) = x_0$$
(3.20)

Las conclusiones que se derivan de su análisis están de acuerdo con los resultados teóricos y la experiencia numérica acumulada en muchos otros estudios:

- Los métodos MPMG presentan ventaja sobre los métodos MRTG, si el resto de los parámetros de integración son iguales, para  $\theta = 0.5$ .

- El método de Crank-Nicolson minimiza el error para cada familia y cada tamaño de paso de tiempo.

Se recomienda, por lo tanto, la utilización del esquema MPMG, con elección de  $\theta = 0.5$  por defecto, aunque el método de Galerkin se debe tomar en consideración en el tratamiento de problemas de choque térmico, por sus propiedades de amortiguación del error a corto término. La razón de este fenómeno se entiende examinando la ecuación (3.15). Si el número de grados de libertad del sistema crece indefinidamente,  $|\lambda_{NN}| \rightarrow \infty$ , y por lo tanto,  $\mu_{NN} \rightarrow -1$ . En el caso del esquema de Galerkin  $\mu_{NN} \rightarrow -0.5$  y por lo tanto las frecuencias altas, correspondientes a los autovalores  $\lambda_i$  de mayor módulo, se atenúan más rápidamente.

#### 3.3 Algoritmos de 3 niveles.

Otros esquemas de integración pueden ser utilizados, usando algoritmos de 3 o más niveles temporales:

(a) Algoritmo de Lees [82]:

$$\left[K_n + \frac{3}{2\Delta t}C_n\right]T_{n+1} = \left[-K_nT_n + \frac{3}{2\Delta t}C_nT_{n-1} - K_nT_{n-1} + 3g_n\right]$$
(3.21)

(b) Algoritmo de Dupont (I) [45], siendo  $\alpha$  un parámetro de integración que verifica  $\alpha > 1/4$ :

$$\left[K_{n} + \frac{1}{2\alpha\Delta t}C_{n}\right]T_{n+1} = \left[-\frac{(1-2\alpha)}{\alpha}K_{n}T_{n} + \frac{1}{2\alpha\Delta t}C_{n}T_{n-1} - K_{n}T_{n-1} + \frac{1}{\alpha}g_{n}\right] \quad (3.22)$$

(c) Algoritmo de Dupont (II) [45], siendo  $\alpha$  un parámetro de integración que verifica  $\alpha > 1$  y denotando con el subíndice  $\star$  las matrices y vectores evaluados a  $t = 3/2t_n - 1/2t_{n-1}$ :

$$\left[K_{\star} + \frac{2}{\beta\Delta t}C_{\star}\right]T_{n+1} = \left[-\frac{(1-4\alpha)}{\beta}K_{\star}T_{n} + \frac{2}{\beta\Delta t}C_{\star}T_{n} - \frac{2\alpha}{\beta}K_{\star}T_{n-1} + \frac{2}{\beta}g_{\star}\right] \quad (3.23)$$

con:

$$\beta = 1 + 2\alpha \tag{3.24}$$

(d) Algoritmo implícito linealizado [174], denotando con el subíndice  $\star$  las matrices y vectores evaluados a  $t = 2t_n - t_{n-1}$ :

$$\left[K_{\star} + \frac{3}{2\Delta t}C_{\star}\right]T_{n+1} = \left[\frac{2}{\Delta t}C_{\star}T_{n} + \frac{1}{2\Delta t}C_{\star}T_{n-1} + g_{\star}\right]$$
(3.25)

El énfasis *linealizador* que puede apreciarse detrás de todos estos algoritmos se justifica en la suposición de que la resolución de un sistema de ecuaciones lineales es más fácil y económico, desde el punto de vista computacional, que resolver un sistema no lineal de ecuaciones. Tal aseveración depende lógicamente del método empleado en la resolución de las ecuaciones no lineales. En los próximos capítulos se analizan algunos de estos métodos y se identifican los más eficientes para la resolución práctica de las ecuaciones consideradas.

# Capítulo 4 Solución Numérica de Sistemas Lineales.

Antes de abordar el problema general de la resolución de un sistema de ecuaciones no lineales de la forma:

$$M(T)T = F(T) \tag{4.1}$$

conviene presentar, a modo de prólogo, los métodos clásicos de resolución de sistemas lineales. Esta introducción se justifica en el hecho de que los algoritmos para el problema no lineal se fundamentan, en la mayor parte de los casos, en esquemas precedentes ideados para el caso lineal. En los libros de Householder [68], Varga [159], Stoer [151] o Ciarlet [27] se puede encontrar, presentado de modo riguroso, el material que a continuación se expone.

Consideremos un sistema de ecuaciones lineal:

$$Ax = b \tag{4.2}$$

donde A es una matriz de dimensión NN no singular, y b es un vector conocido.

Los métodos clásicos para la obtención de x se dividen en métodos directos y métodos iterativos. Como veremos a continuación, los primeros se fundamentan en una descomposición producto y los segundos en una descomposición suma de la matriz A. Una tercera familia de métodos iterativos, conocida como métodos del gradiente permite conectar los problemas lineal y no lineal de una forma natural a través de la analogía entre la búsqueda de raíces de ecuaciones vectoriales en  $\Re^N$  y el problema de minimización de funcionales definidos de  $\Re^N$  en  $\Re$ .

#### 4.1 Métodos Directos.

Proposición 4.1. Sea A una matriz cuadrada de orden NN no singular. Existen entonces dos matrices L y U, respectivamente triangular inferior y triangular superior:

$$L_{ii} = 1 \quad \forall \quad 1 \le i \le NN$$
  

$$L_{ij} = 0 \quad si \quad j > i$$
  

$$U_{ij} = 0 \quad si \quad i > j$$

$$(4.3)$$

tales que:

$$A = LU \tag{4.4}$$

Además, tal descomposición es única.

Una demostración *constructiva*, a partir del método de eliminación de Gauss se halla, por ejemplo, en [151], capítulo 4.

Las ventajas de conocer la factorización LU (o factorización de Doolittle) de la matriz que se desea invertir son evidentes. Gracias a la particular estructura de L y U, la resolución de (4.2) se divide en dos etapas muy fáciles de llevar a cabo. Primeramente se resuelve, mediante sucesivas sustituciones desde i = 1 hasta i = NN:

$$Lz = b \tag{4.5}$$

Después, sustituyendo hacia atrás, desde i = NN hasta i = 1, se halla x:

$$Ux = z \tag{4.6}$$

Las ecuaciones pueden permutarse mediante una estrategia de búsqueda de máximo pivote para no deteriorar el condicionamiento de la matriz A durante el proceso de factorización.

El número de operaciones aritméticas básicas que requiere la factorización LU de una matriz es proporcional a  $NN^3$ , dependiendo del algoritmo de factorización concreto utilizado. La factorización de Crout (ver para más detalles sobre la implementación práctica Press et al. [115], pp 31 y siguientes), parece el método más eficiente para obtener la descomposición producto de una matriz no singular requiere alrededor de  $NN^3/3$  sumas y otras tantas multiplicaciones. Nótese, sin embargo, que las sustituciones (4.5) y (4.6) requieren un número de operaciones básicas proporcional a  $NN^2$ . La idea inmediata que esto sugiere es que conviene aprovechar al máximo el esfuerzo de la factorización para resolver sucesivos sistemas de ecuaciones con distintos vectores independientes b.

En realidad, el método de Crout corresponde a una factorización del tipo LDU, siendo respectivamente L y U las matrices triangulares con I sobre la diagonal principal inferior y superior y D una matriz diagonal. La etapa de sustitución se realiza entonces por este orden:

1) Sustitución hacia adelante  $L^{-1}$ .

- 2) Homotecia  $D^{-1}$ .
- 3) Sustitución hacia atrás  $U^{-1}$ .

En el caso de *matrices simétricas definidas positivas*, la factorización de Doolittle puede simplificarse a la forma:

$$A = L^T L \tag{4.7}$$

que recibe el nombre de *factorización de Choleski*. Este método permite ahorrar una cantidad considerable de esfuerzo computacional si se tratan matrices no dispersas y simétricas que facilitan el almacenamiento y el procesado numérico de sus elementos.

#### 4.2 Métodos Iterativos.

La resolución iterativa de un sistema de ecuaciones lineal está intimamente relacionada con el proceso de resolución de un sistema no lineal, que intrinsecamente requiere la adopción de metodologías iterativas. En esta sección se ponen de manifiesto, además, los puntos conceptualmente comunes entre integración temporal y procedimiento iterativo para la resolución de sistemas de ecuaciones.

El método más comunmente utilizado para la resolución iterativa del sistema lineal (4.2) es el de sobrerrelajación sucesiva (conocido como SOR 'succesive overrelaxation' en la nomenclatura inglesa). Adoptando la siguiente notación:

$$D_{ij} = A_{ij}\delta_{ij}$$

$$L_{ij} = A_{ij} \quad si \quad i > j$$

$$L_{ij} = 0 \quad si \quad i \le j$$

$$U_{ij} = 0 \quad si \quad i > j$$

$$U_{ij} = A_{ij} \quad si \quad i \le j$$

$$(4.8)$$

El método consiste en dividir la matriz A en dos partes:

$$A = B - C \tag{4.9}$$

con:

$$B = \left(\frac{D}{\omega} + L\right)$$

$$C = \left(\frac{1-\omega}{\omega}D - U\right)$$
(4.10)

donde  $\omega$  es el parámetro de relajación, que debe pertenecer al intervalo abierto (0, 2). Si  $\omega = 1$ , el método se reduce al *algoritmo de Gauss-Seidel*. Como *B* es una matriz triangular, es fácil de invertir. El método consiste en obtener una solución mejorada  $x_{k+1}$  a partir de la precedente  $x_k$  haciendo:

$$x_{k+1} = B^{-1}Cx_k + B^{-1}b (4.11)$$

El siguiente resultado pone de manifiesto la relación entre la teoría de algoritmos de integración temporal y los métodos iterativos.

Proposición 4.2. Sea  $M = B^{-1}C$  la matriz cuadrada asociada a un cierto método iterativo de la forma (4.11). Las tres proposiciones siguientes son equivalentes:

- (1) El método iterativo converge a partir de cualquier  $x_0$ .
- (2) El radio espectral de M verifica:  $\rho(M) < 1$ .
- (3) Existe al menos una norma matricial tal que ||M|| < 1.

Demostración: ver en Ciarlet [27] cap. 5 o Isaacson y Keller [71].

El método se materializa en la práctica utilizando la siguiente fórmula de recurrencia (los subíndices indican la componente y los superíndices numeran la iteración):

La ventaja de este procedimiento radica en que no es necesario almacenar la matriz A en la memoria central del ordenador, lo cual permite tratar sistemas de ecuaciones muy grandes.

Proposición 4.3. La convergencia del método de relajación está asegurada para matrices simétricas definidas positivas en el rango de  $0 < \omega < 2$  (Teorema de Ostrowski-Reich). El parámetro de relajación  $\omega$  óptimo es el que minimiza el radio espectral de la matriz M y viene dado por:

$$\omega_0 = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(J)}} \tag{4.13}$$

donde  $\rho(J)$  es el radio espectral de la matriz iterante correspondiente al método de Jacobi:

$$J = -D^{-1}(U+L) = -(I-D^{-1}A)$$
(4.14)

con las definiciones dadas en (4.8). El radio espectral mínimo es entonces:

$$\rho_{min} = \omega_0 - 1 \tag{4.15}$$

y los radios espectrales de las matrices asociadas a los métodos de Jacobi y Gauss-Seidel verifican una y sólo una de las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned}
\rho(J) &= \rho(M_{GS}) = 0 \\
0 &< \rho(M_{GS}) < \rho(J) < 1 \\
1 &= \rho(M_{GS}) = \rho(J) \\
1 &< \rho(M_{GS}) < \rho(J)
\end{aligned}$$
(4.16)

de modo que los métodos de Jacobi y Gauss-Seidel convergen o divergen de forma simultánea (Teorema de Stein-Rosenberg).

Demostración: Varga [159], cap. 3 o Ciarlet [27], cap. 5.

Otro resultado similar asegura la convergencia del método para matrices diagonalmente dominantes: Proposición 4.4. El método de Gauss-Seidel ( $\omega = 1$ ) converge a partir de cualquier vector inicial  $x_0$  para todas las matrices A que sean estrictamente diagonalmente dominantes, es decir, que verifiquen una de las dos desigualdades siguientes:

$$|A_{ii}| > \sum_{k \neq i} |A_{ik}| \qquad i = 1, 2, ...NN$$

$$|A_{kk}| > \sum_{i \neq k} |A_{ik}| \qquad k = 1, 2, ...NN$$
(4.17)

Si además A es irreducible y:

$$|A_{ii}| \ge \sum_{k \ne i} |A_{ik}| \quad i = 1, 2, \dots NN$$
(4.18)

existiendo algún índice j que verifica:

$$|A_{jj}| > \sum_{k \neq j} |A_{jk}| \tag{4.19}$$

entonces el método de Gauss-Seidel es convergente para cualquier vector inicial x<sub>0</sub>.

Demostración: Stoer [151] cap. 8.

El costo numérico de la resolución de un sistema lineal de ecuaciones mediante el metodo de relajación es más difícil de evaluar que en el caso de un método directo, pues depende del número de iteraciones requerido para alcanzar la tolerancia en el error deseada, y también del vector inicial a partir del cual se inicie el proceso iterativo. El número de operaciones básicas asociadas a una iteración son  $NN^2$  multiplicaciones,  $NN^2$  sumas y NN divisiones. Nótese que en la exposición precedente se denomina a un método convergente si converge a partir de cualquier vector inicial. Sin embargo, si la suposición inicial está lo suficientemente próxima a la solución, la convergencia se obtiene de un modo más fácil. Este punto resulta crucial cuando no se puede asegurar que la matriz sea diagonalmente dominante, como es el caso de matrices llenas o con pocos ceros.

El punto fundamental en la utilización del método de relajación es la estimación del parámetro  $\omega$  óptimo. En efecto, el número global de iteraciones depende fuertemente de una correcta elección de  $\omega$  lo más próxima posible a  $\omega_0$  dado. La figura 4.1 muestra los resultados obtenidos por Fletcher en la resolución del sistema de ecuaciones asociado a un problema elíptico con 11 × 11 grados de libertad [54]. En ordenadas



Figura 4.1: Convergencia de varios métodos iterativos para resolver Ax = b.

se representa la norma del vector  $x_{k+1} - x_k$ , para los métodos de Jacobi, relajación con  $\omega = 1$  (Gauss-Seidel) y  $\omega = \omega_0$ . Utilizando la relación (4.13) se obtiene el valor óptimo. Desgraciadamente, calcular el radio espectral de la matriz correspondiente al método de Jacobi puede ser una operación extremadamente costosa desde el punto de vista computacional, por lo que se hace necesario encontrar buenas estimaciones de su valor. En general,  $\rho_J \rightarrow 1$  si  $NN \rightarrow \infty$ , de modo que los problemas grandes requieren un número mayor de iteraciones.

#### 4.3 Métodos del Gradiente.

En esta sección se presenta una familia de métodos iterativos que tiene un interés particular en la medida que permite una extrapolación clara y conceptualmente coherente a los sistemas de ecuaciones *no lineales* que se abordarán en el siguiente capítulo. Dado el sistema lineal de ecuaciones (4.2), el método se fundamenta en la minimización de la función escalar y positiva  $f(x) = |Ax - b|^2$  definida en  $\Re^N$ . La matriz hessiana



Figura4.2: Método del máximo descenso o del gradiente.

 $\partial^2 f/\partial x_i \partial x_j$  de esta función es entonces la matriz A, que igualmente coincide con la matriz jacobiana de la aplicación vectorial v(x) = Ax - b. El caso no lineal implica A = A(x), pero la equivalencia entre la matriz jacobiana de la aplicación vectorial y el hessiano de la función f se mantiene.

A continuación presentamos la versión más sencilla de esta familia de métodos, conocido como método del máximo descenso o del gradiente.

Consideremos la función  $f : \Re^N \to \Re$ , de la cual se pretende hallar el mínimo  $x_*$ que verifica  $\nabla f(x_*) = 0$ . Si el punto de partida del proceso iterativo es la k-ésima iteración  $x_k$ , la dirección de máximo descenso viene dada por el vector  $\nabla f(x_k)$  (figura 4.2).

La longitud óptima del paso en la dirección de  $\nabla f(x_k)$  puede aproximarse realizando un desarrollo de Taylor de la función f alrededor de  $x_k$ . Escribiendo el proceso iterativo mediante la fórmula:

$$x_{k+1} = x_k - \lambda_k \nabla f(x_k) \tag{4.20}$$

donde el signo negativo indica que la búsqueda del extremo se dirige hacia un mínimo, e imponiendo la condición local de minimización en la dirección de descenso:

$$\frac{\partial f(x_k - \lambda_k \nabla f(x_k))}{\partial \lambda_k} = 0 \tag{4.21}$$

sobre el desarrollo en serie de Taylor:

$$f(x_k - \lambda_k \nabla f(x_k)) \simeq f(x_k) - \lambda_k [\nabla f(x_k)]^T \nabla f(x_k) + \frac{1}{2} \lambda_k^2 [\nabla f(x_k)]^T \underline{H}(x_k) \nabla f(x_k) - \dots$$
(4.22)

donde  $\underline{H}$  es la matriz hessiana, definida por:

$$\underline{H}(x)_{mn} = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_m \partial x_n} \tag{4.23}$$

se obtiene la siguiente expresión para  $\lambda_k$ :

$$\lambda_k = \frac{\|\nabla f(x_k)\|^2}{[\nabla f(x_k)]^T \underline{H}(x_k) \nabla f(x_k)}$$
(4.24)

que, como hemos señalado anteriormente, es *exacta* si el funcional f es cuadrático, es decir si la matriz <u>H</u> es constante (y por lo tanto el desarrollo de Taylor anteriormente utilizado coincide exactamente con la función f en todo su dominio de definición).

El método del gradiente conjugado presenta mejores características pues existe un resultado que asegura para el caso de funcional cuadrático (equivalente, bajo el punto de vista de búsqueda de raíces a la solución iterativa de un sistema de ecuaciones lineal, es decir con jacobiano constante) la convergencia en un número de iteraciones inferior al número de grados de libertad involucrados. Para una demostración formal de este resultado, ver en (Hestenes y Stiefel [62]). Desgraciadamente, si se tratan sistemas de ecuaciones muy grandes, esta propiedad no garantiza gran cosa. La idea aportada por este método es producir una sucesión de correcciones  $s_i$  mutuamente  $\underline{H}$  -conjugadas en el caso cuadrático o simplemente asegurar que la corrección  $s_k$  es  $\underline{H_{k-1}}$  -conjugada con la precedente dirección  $s_{k-1}$ . El método se resume del siguiente modo: Teniendo presente la fórmula de actualización:

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k s_k \tag{4.25}$$

se toma:

$$s_0 = -\nabla f(x_0) \tag{4.26}$$

y se calcula:

$$s_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k s_k \tag{4.27}$$

donde  $\beta_k$  se elige de modo tal que  $s_k$  y  $s_{k+1}$  verifiquen, tal y como se ha señalado anteriormente:

$$s_{k+1}^T \underline{H}_k s_k = 0 \tag{4.28}$$

obteniéndose así la siguiente expresión para  $\beta_k$ :

$$\beta_{k} = \frac{[\nabla f(x_{k+1})]^{T} \underline{H}_{k} s_{k}}{s_{k+1}^{T} \underline{H}_{k} s_{k}}$$
(4.29)

calculándose de este modo la nueva dirección de descenso  $s_{k+1}$ . La longitud óptima del paso en la dirección de descenso se obtiene de manera análoga a la dada en el método del gradiente, mediante la fórmula:

$$\lambda_{k+1} = \frac{[\nabla f(x_{k+1})]^T s_{k+1}}{s_{k+1}^T H_{k+1} s_{k+1}}$$
(4.30)

La mejor eficacia del método del gradiente conjugado con respecto al método del máximo descenso se ilustra en la figura 4.3, para el caso de un funcional cuadrático, donde se aprecia además que el método converge en 2 iteraciones (f está definida en  $\Re^2$ ).

Siempre en el caso de funcional cuadrático, puede probarse que los sucesivos gradientes  $\nabla f(x_k)$  obtenidos son todos ortogonales entre sí, y además el coeficiente  $\beta_k$ dado por la expresión (4.29) es puede calcularse asimismo mediante la expresión:

$$\beta_k = \frac{\|\nabla f(x_{k+1})\|^2}{\|\nabla f(x_k)\|^2}$$
(4.31)

(Fórmula de *Fletcher-Reeves* [56]), o, utilizando la ortogonalidad entre los gradientes sucesivos, mediante la expresión alternativa:



Figura 4.3: Método del gradiente conjugado.

$$\beta_{k} = \frac{[\nabla f(x_{k+1})]^{T} [\nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_{k})]}{\|\nabla f(x_{k})\|^{2}}$$
(4.32)

(Fórmula de *Polak-Ribière* [110]). Para la demostración de la equivalencia entre las tres formulaciones se remite al lector al texto de Polak (cap. 2) [111]. El método del gradiente conjugado implementado en sus versiones de Fletcher-Reeves o Polak-Ribière requiere sólo el cálculo de 2 productos escalares adicionales por iteración si se le compara con el método del gradiente.

En el próximo capítulo se utilizan los conceptos aquí resumidos para abordar de manera sistemática el problema de la resolución de sistemas de ecuaciones no lineales a través de la dependencia de la matriz del sistema con el vector solución.

## Capítulo 5

# Métodos Iterativos para Ecuaciones Vectoriales no Lineales.

En este capítulo se expone la metodología fundamental involucrada en la resolución del sistema de ecuaciones no lineales proviniente de la discretización espacial y temporal presentada en los capítulos 2 y 3. Se pasan revista a los algoritmos más clásicos utilizados en el contexto del método de elementos finitos. Se presentan además ciertos métodos más recientes cuyas prestaciones se compararán en el marco del problema específico tratado, que reviste, como hemos visto anteriormente, características especiales (matrices sin estructura de bandas, dispersas y en general no simétricas, fuertemente dependientes de la temperatura).

La resolución de ecuaciones vectoriales del tipo R(T) = 0 constituye un problema importante en el análisis numérico. Existen excelentes referencias bibliográficas sobre el tema, entre los que podemos señalar el texto de Ortega y Rheinboldt [101]. Sin embargo, en el contexto de los elementos finitos, la *particular estructura* de la ecuación no lineal (ecuación (4.1) permite desarrollar métodos más específicos que permitan abordar el problema con mayor eficacia. Es claro que el conocimiento de la matriz del sistema M(T) facilitará el uso de métodos iterativos con precondicionamiento, más caros desde el punto de vista computacional, pero sin duda también más eficientes. Esta ventaja no es tan clara cuando se trata de resolver una ecuación completamente general de la forma R(T) = 0, donde la determinación de un buen precondicionador no es tarea fácil.

La resolución de un sistema *no lineal* de la forma (4.1) requiere un proceso iterativo, a partir de una estimación inicial de la solución. Para fijar ideas, la estructura de la matriz M(T) en el caso elíptico de régimen permanente que nos ocupa es simplemente:

$$\begin{array}{rcl}
M(T) &=& K(T) \\
F(T) &=& g
\end{array}$$
(5.1)

En el caso general de régimen transitorio, adoptando un esquema de Crank-Nicolson, se tiene:

$$M(T) = K(T) + \frac{2}{\Delta t}C(T)$$
  

$$F(T) = \frac{2}{\Delta t}C(T)T^{n} + g^{n+0.5}$$
(5.2)

donde T denota el vector de temperaturas calculado a la mitad del intervalo temporal  $T^{n+0.5}$ .

### 5.1 Método de Iteración Directa.

Quizá el método más inmediato sea el conocido como algoritmo de iteración directa. La (i + 1) -ésima estimación de T se obtiene a partir de  $T_i$  mediante la expresión:

$$T_{i+1} = (M(T_i))^{-1} F(T_i)$$
(5.3)

El método se implementa fácilmente, pero adolece de dos graves inconvenientes:

(a) Exige una resolución exacta de un sistema de ecuaciones lineales (con factorización y sustitución) a cada iteración. Si se trata un problema en régimen permanente esto representa un inconveniente menor, pero en el caso transitorio, el coste numérico del procedimiento resulta prácticamente inabordable.

(b) La tasa de convergencia del método dista bastante de ser óptima.

A continuación veremos como (5.3) constituye un caso particular de la familia más general de algoritmos, conocidos como *métodos secuenciales* definidos por la fórmula general:

$$T_{i+1} = T_i + (A_i))^{-1} R_i$$
(5.4)

definiendo el vector de residuos como:

$$R_i = F(T_i) - M(T_i)T_i \tag{5.5}$$

y siendo  $A_i$  una matriz invertible.

#### 5.2 Método del Punto Fijo.

Dada una función no lineal g definida en  $\Re^{NN}$  que toma valores sobre  $\Re^{NN}$ , se denomina punto fijo de g a cualquier vector x que verifica:

$$g(x) = x \tag{5.6}$$

El problema de hallar la raíz de la ecuación:

$$R_i(T) = 0 \tag{5.7}$$

se reduce a encontar un punto fijo de la función  $g = T + R_i(T)$ . Definiendo la sucesión:

$$T_{i+1} = T_i + R_i(T)$$
(5.8)

que corresponde al esquema general (5.5) con  $A_i = I \forall i$ . Este método, a pesar de su fácil y económica implementación (nótese que no es necesario invertir ninguna matriz), presenta graves deficiencias en sus características de convergencia. El siguiente resultado dá una condición suficiente para obtener convergencia.

Proposición 5.1. Si existe un número 0 < r < 1 y algún entorno abierto de radio  $\varrho$ :

$$S: \|T - T_\star\|_{\infty} < \varrho \tag{5.9}$$

tal que la función g(T), con un punto fijo en  $T_{\star}$  verifica:

$$\|g(T') - g(T'')\|_{\infty} < r\|T' - T''\|_{\infty} \quad \forall T', \, T'' \in S$$
(5.10)

entonces, la sucesión:

$$T_{i+1} = g(T_i) \tag{5.11}$$

converge hacia el punto fijo  $T_{\star}$ , que es único en el entorno considerado. (Teorema de proyección contractiva).



Figura 5.1: Convergencia del método del punto fijo.

Demostración: Householder [68] cap. 3.

Nótese que no existe, en general, un radio de atracción hacia la solución. Entendemos por radio de atracción un entorno abierto  $S : |T - T_*| < \epsilon_S$  en  $\Re^{NN}$  alrededor de la solución  $T_*$  tal que si  $T_0$  pertenece a S, entonces la sucesión de las  $T_i$  obtenidas mediante el método citado tiende hacia  $T_*$ . En la figura 5.1 puede verse (para un caso con un sólo grado de libertad) que si la estimación inicial  $T_0 < T_*$ , el proceso diverge.

La limitación (5.10) afecta, en la práctica general, al valor de la pendiente de g en las cercanías de la solución. En efecto, en el caso monodimensional puede apreciarse que la convergencia depende de que la pendiente de g verifique en los alrededores de  $T_*$ :

$$|g'(x)| < 1 \tag{5.12}$$

El criterio se extrapola con facilidad al caso multidimensional  $g(T) : \Re^{NN} \to \Re^{NN}$ , transformándose la condición precedente en:

$$\frac{\partial g_k}{\partial T_j} | < 1 \quad j, k = 1, 2, \dots NN \tag{5.13}$$

### 5.3 Método de Newton-Raphson.

Este método es el más eficaz (y desgraciadamente también el más costoso) de cuantos resuelven el sistema no lineal de acuerdo con el esquema general (5.4). Definiendo la matriz jacobiana como:

$$J_i = \frac{\partial}{\partial T_i} [M(T_i)T_i - F(T_i)]$$
(5.14)

El elemento (m, n) de la matriz jacobiana es por lo tanto la derivada parcial de la fila m en (4.1) con respecto a la temperatura nodal  $T_n$ , evaluadas en la iteración i. La i+1-ésima corrección se halla, de acuerdo con el esquema general (5.3) calculando:

$$T_{i+1} = T_i + [J_i]^{-1} R_i (5.15)$$

Proposición 5.2. Si la función R(T), definida de  $\Re^{NN}$  en  $\Re^{NN}$  tiene derivada continua en un cierto entorno abierto convexo S alrededor de la raíz  $T_*$ , donde la matriz jacobiana es no singular, la sucesión definida por (5.15) permanece en el mencionado entorno y converge hacia  $T_*$ . Además, existe una sucesión de números reales positivos  $\alpha_i \rightarrow 0$  tales que:

$$\|T_{i+1} - T_{\star}\| \le \alpha_i \|T_i - T_{\star}\| \tag{5.16}$$

(Convergencia superlineal). Si además de las hipótesis anteriores, la matriz jacobiana J(T) es localmente lipschitziana, es decir, existe un número M > 0 tal que:

$$\|J(T) - J(T_*)\| < M \|T - T_*\| \quad \forall T \in S$$
(5.17)

entonces existe una constante positiva r tal que:

$$||T_{i+1} - T_{\star}|| < r||T_i - T_{\star}||^2$$
(5.18)

(Convergencia cuadrática).

Demostración: Ortega y Rheinboldt [101] p. 312.



Figura 5.2: Método de Newton-Raphson.

El resultado precedente pone de manifiesto la potencia del método. Además de garantizar la existencia de un radio de atracción hacia la solución, asegura, con hipótesis bastante generales, una convergencia cuadrática. El método, sin embargo, no promete milagros, y pueden aparecer divergencias e incluso ciclos iterativos patológicos, como se muestra en la figura 5.2.

Si se contempla el método en el caso particular puramente lineal M(T) = M y F(T) = F en (4.1), resulta evidente que la matriz jacobiana coincide con la matriz de coeficientes M y el método de Newton-Raphson (NR) converge en una iteración (y con una única factorización LU de la matriz jacobiana). En el caso transitorio lineal, la misma factorización sirve para calcular todos los pasos de tiempo siempre y cuando el paso de tiempo  $\Delta t$  se mantenga constante. Si se desea utilizar pasos de tiempo variables en problemas lineales o débilmente no lineales, resulta aconsejable proceder mediante series de intervalos temporales con paso de tiempo constante en cada una de ellas a fin de aprovechar al máximo las factorizaciones realizadas.

El principal inconveniente del método radica en la necesidad de evaluar a cada iteración dentro de cada paso de tiempo la matriz jacobiana  $J_i$ , el vector de residuos  $R_i$ , y finalmente el cálculo de  $J_i^{-1}R_i$ , bien por métodos directos o por métodos iterativos. Más adelante se verá que el cálculo de la matriz jacobiana no reviste mayores complicaciones y que se puede realizar económicamente. El cálculo de  $R_i$  representa una operación numérica equivalente a hallar NN funciones escalares en el caso general, y, debido a la forma particular de la expresión del residuo en elementos finitos, involucrando productos de matrices por vectores, es del orden  $O(NN^2)$ . La inversión del jacobiano, sin embargo, representa un precio excesivamente alto si el número de pasos de tiempo es grande o el problema es muy no lineal. Veamos a continuación algunas de las variantes del método de Newton-Raphson propuestas para soslayar esta dificultad.

#### 5.4 Método de Newton-Raphson Modificado.

Esta aproximación consiste en mantener constante la matriz  $J_i^{-1}$  durante un número fijo de iteraciones, o incluso durante un número fijo de pasos de tiempo. Cuando se detectan dificultades de convergencia, se calcula una nueva matriz jacobiana y se factoriza. Nótese que esta aproximación es compatible sólamente con una resolución directa (mediante factorización LU) del sistema de ecuaciones planteado en cada iteración. La figura 5.3 muestra como, en general, la tasa de convergencia del método de Newton-Raphson modificado (NRM) disminuye en comparación con la del método completo de Newton-Raphson, aunque en algunos casos se pueda evitar la divergencia a expensas de obtener una convergencia más lenta.

Actuando de este modo, la elección de la primera estimación de la solución  $T_0$  resulta mucho más crítica que en el esquema de Newton-Raphson completo, pues el radio de atracción hacia la solución disminuye en general. Estudiando un problema en régimen transitorio siempre se tiene una solución aproximada lo suficientemente próxima si se toma como primera estimación el valor de la configuración en equilibrio al final del paso de tiempo precedente. Cuando se resuelve el problema de régimen permanente, las dificultades que se encuentran debido a una primera estimación defectuosa son mayores, como se pondrá de manifiesto más adelante mediante algunas pruebas numéricas.

Señalemos igualmente que el método de iteración directa puede verse como un método secuencial de tipo Newton donde el jacobiano de la ecuación (4.1) se aproxima



Figura 5.3: Método de Newton-Raphson modificado.

mediante la expresión:

$$Ji \simeq M(T_i) \tag{5.19}$$

En efecto, teniendo en cuenta la definición del residuo  $R_i$ , puede escribirse:

$$T_{i+1} = T_i + (M(T_i))^{-1} (F(T_i) - M(T_i)T_i)$$
(5.20)

a partir de donde se recupera inmediatamente la ecuación (5.3).

Las razones que justifican la aproximación (5.19) serán discutidas más adelante cuando se analice la metodología adecuada para la evaluación de la matriz jacobiana.

### 5.5 Métodos Quasi-Newton.

Los métodos quasi-Newton (QN) constituyen un importante subconjunto de los métodos secuenciales definidos por la expresión (5.4). En diversas referencias aparecen denominados como métodos de métrica variable, secantes, de actualización, o con otra nomenclatura. Su origen se remonta la década de los años 60, donde los fundamentos del método fueron asentados por Davidon [36], Fletcher y Powell [55], en un contexto de problemas de minimización y Broyden [14] por primera vez aplicado a la resolución de sistemas no lineales de ecuaciones. La conexión entre ambos problemas es manifiesta, si se considera por ejemplo que encontrar el cero de la función f en un entorno S de la raíz en  $\Re^N$  equivale a la minimización de la función  $|f|^2$  en el mismo entorno. La matriz jacobiana es entonces sustituida por la matriz hessiana, que debe ser invertida igualmente en cada iteración y las aproximaciones sucesivas a la matriz hessiana son extrapolables a la matriz jacobiana.

El método fué introducido en el dominio de los elementos finitos por Matthies y Strang [93] y por Bathe y Cimento [8], haciendo hincapié en aplicaciones de mecánica estructural. Engelman et al. [47] analizaron por vez primera la eficacia del método en el estudio de la mecánica de fluídos. Durante los últimos 10 años, diversas experimentaciones numéricas con respecto al tema se recogen en la literatura, siempre más abundantes en el dominio de la mecánica estructural. Liu et al. [83] utilizan un método QN para resolver problemas de difusión del calor en régimen transitorio. En España, Winter [171] realiza una comparación entre las características de dos métodos QN en la resolución de problemas no lineales conductivos y con radiación como condición de contorno, en el caso del problema elíptico de régimen permanente. Crivelli e Idelsohn [32] y Storti et al. [152] tratan mediante un método QN la no linealidad asociada a varios problemas de Stefan, analizando la eficacia del método con ecuaciones donde la mayor dificultad se presenta en la matriz de masa C(T), que depende fuertemente de la temperatura cuando se estudian cambios de fase.

A continuación se presentan las principales características generales de los métodos QN y dos de sus versiones más comunmente utilizadas, siguiendo las notas de Roux [131] [132] y el resumen de Dennis y Moré [37], a donde se remite al lector para la demostración de algunos resultados.

La estrategia quasi-Newton para resolver (4.1) es utilizar una fórmula secuencial de tipo (5.4), sustituyendo, a cada iteración, la matriz  $A_i$  por una aproximación  $B_i$  de la verdadera matriz jacobiana obtenida mediante una fórmula recursiva, en función de los valores obtenidos en iteraciones precedentes:

$$J_i \simeq B_i = f(B_{i-1}, B_{i-2}, \dots, R_{i-1}, R_{i-2}...)$$
(5.21)

Resulta más conveniente desde el punto de vista computacional aproximar la *inversa* de la matriz jacobiana, evitando de esta manera la factorización de la matriz  $B_i$  en cada iteración:

$$J_i^{-1} \simeq H_i = f(H_{i-1}, H_{i-2}, \dots, R_{i-1}, R_{i-2}...)$$
(5.22)

Se distingue así claramente entre métodos QN directos y métodos QN inversos. La condición secante que deben cumplir cualquiera de estas dos aproximaciones es la siguiente:

$$\begin{array}{rcl} T_i - T_{i-1} &=& H_i(R_{i-1} - R_i) \\ R_{i-1} - R_i &=& B_i(T_i - T_{i-1}) \end{array} \tag{5.23}$$

conocida con el nombre de ecuación quasi-Newton.

La ecuación (5.23) determina completamente  $H_i$  (y  $B_i$ ) en función de  $H_{i-1}$  en el caso de un único grado de libertad, coincidiendo con el método clásico de la secante (figura 5.4).

En el caso general de varios grados de libertad, la determinación de  $H_i$  en función de  $H_{i-1}$  requiere la adopción de hipótesis adicionales.

#### Método de Broyden.

En el método de Broyden [14] se supone que  $B_i$  y  $B_{i-1}$  no difieren sino en el subespacio vectorial de dimensión unitaria engendrado por el vector de la i-1-ésima corrección:

$$s_{i-1} = T_i - T_{i-1} \tag{5.24}$$

Por lo tanto, se exige que la matriz  $B_i$  verifique:

$$B_{i}z = B_{i-1}z \quad si \quad z^{T}s_{i-1} = 0 \tag{5.25}$$

Definiendo:

$$y_i = R_i - R_{i+1} \tag{5.26}$$



Figura5.4: Método de la secante (QN con 1 variable).

la expresión de  $B_i$  que satisface ambas condiciones es:

$$B_{i} = B_{i-1} + \frac{y_{i-1} - B_{i-1}s_{i-1}}{s_{i-1}^{T}s_{i-1}}s_{i-1}^{T}$$
(5.27)

En efecto, la condición (5.25) se satisface automáticamente, y si se aplica la fórmula anterior al vector  $s_{i-1}$  se recupera ecuación secante o quasi-Newton (segunda ecuación en 5.23):

$$B_{i}s_{i-1} = B_{i-1}s_{i-1} + \frac{y_{i-1} - B_{i-1}s_{i-1}}{s_{i-1}^{T}s_{i-1}}s_{i-1}^{T}s_{i-1} = y_{i-1}$$
(5.28)

Además, se verifica la siguiente:

Proposición 5.3. La matriz  $B_i$  definida según (5.27) es la más próxima a  $B_{i-1}$  de cuantas verifican la condición secante (5.23), medida mediante la norma matricial de Frobenius:

$$||A||_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} |a_{ij}|^2}$$
(5.29)

Demostración: Dennis y Moré [37].

La relación (5.25) pone de manifiesto que el rango de la matriz  $B_i - B_{i-1}$  es 1. El método de Broyden enunciado recibe también, por lo tanto, el nombre de método quasi-Newton de rango 1.

Como se ha mencionado precedentemente, la expresión anterior para  $B_i$  no será de mucha utilidad si se utiliza en su forma *directa*, debido a la necesidad de hallar  $B_i^{-1}$ en cada iteración. Una expresión análoga a (5.27) puede hallarse para  $H_i$  con la ayuda del siguiente resultado:

Proposición 5.4. Sean u, v dos vectores de  $\Re^N$  y B una matriz  $N \times N$  invertible. Entonces la matriz  $B + uv^T$  es también invertible si y sólo si se verifica:

$$\sigma = 1 + v^T B^{-1} u \neq 0 \tag{5.30}$$

En tal caso, se tiene:

$$(B + uv^{T})^{-1} = B^{-1} - \frac{1}{\sigma} B^{-1} uv^{T} B^{-1}$$
(5.31)

Además, si B = I, se tiene:

$$det(I + uv^{T}) = 1 + v^{T}u$$
(5.32)

Demostración: Sherman y Morrison [139]. Probando primero (5.32) y usando el resultado para mostrar (5.31).

De la proposición anterior se deduce que la fórmula de recurrencia para  $H_i = B_i^{-1}$ a partir de  $H_{i-1} = B_{i-1}^{-1}$  es:

$$H_{i} = H_{i-1} + \frac{s_{i-1} - H_{i-1}y_{i-1}}{s_{i-1}^{T}H_{i-1}y_{i-1}}s_{i-1}^{T}H_{i-1}$$
(5.33)

En efecto, desarrollando la expresión (5.31) con:

$$u = \frac{y_{i-1} - B_{i-1}s_{i-1}}{s_{i-1}^T s_{i-1}}$$

$$v = s_{i-1}$$
(5.34)

se tiene:

$$H_{i} = H_{i-1} + \frac{s_{i-1} - H_{i-1}y_{i-1}}{\sigma s_{i-1}^{T} s_{i-1}} s_{i-1}^{T} H_{i-1}$$
(5.35)

y como:

$$\sigma = 1 + s_{i-1}^T H_{i-1} \frac{y_{i-1} - B_{i-1} s_{i-1}}{s_{i-1}^T s_{i-1}} = \frac{s_{i-1}^T H_{i-1} y_{i-1}}{s_{i-1}^T s_{i-1}}$$
(5.36)

se obtiene (5.33).

Es necesaria una correcta implementación del método para rentabilizar la factorización LU de la matriz jacobiana obtenida como primera aproximación  $H_1$ . Notemos que el método, en su forma (5.33) requiere en una iteración dos productos de matriz por vector  $(H_{i-1}y_{i-1} ext{ y } H_iR_i)$ , cada uno de los cuales requiere en general  $O(N^2)$  operaciones, además del almacenamiento en memoria central de dos matrices simultaneamente, debido a que ha expresado la actualización de la matriz jacobiana invertida en su forma suma. Resulta más fácil escribir un esquema de actualización en su forma producto, que como veremos simplifica notablemente el proceso de cálculo. La expresión:

$$H_{i} = \prod_{k=i-1}^{1} \left( I + \frac{(s_{k} - H_{k}y_{k})}{s_{k}^{T}H_{k}y_{k}} s_{k}^{T} \right) H_{\mathbf{q}}$$
(5.37)

es equivalente a (5.33). Para evitar dos etapas de sustitución a cada iteración, Engelman et al. [47] proponen el siguiente algoritmo, fundamentado en la interrupción del ciclo del productorio precedente en el subíndice inmediatamente anterior al correspondiente a la iteración en la cual nos encontramos. Haciendo, para cada *i*:

$$w_{i-1} = \frac{(s_{i-1} - H_{i-1}y_{i-1})}{s_{i-1}^T H_{i-1}y_{i-1}}$$
(5.38)

la corrección i -ésima se obtiene:

$$s_i = (I + w_{i-1}s_{i-1}^T)H_{i-1}R_i$$
(5.39)

con:

$$H_{i-1}R_i = \prod_{j=i-2}^{1} (I + w_j s_j^T) H_1 R_i$$
(5.40)

En cada iteración, en primer lugar se usa (5.40) para calcular  $H_{i-1}R_i$ , después se utiliza (5.38) para obtener  $w_{i-1}$ , mediante la expresión:

$$H_{i-1}y_{i-1} = H_{i-1}R_{i-1} - H_{i-1}R_i = s_{i-1} - H_{i-1}R_i$$
(5.41)

Finalmente, se calcula la corrección  $s_i$  mediante (5.39). Cada una de las etapas del productorio requiere sólamente dos productos escalares, usando la relación:

$$(I + w_{i-1}s_{i-1}^T)v_{i-1} = v_{i-1} + (s_{i-1}^T v_{i-1})w_{i-1}$$
(5.42)

Comparando este algoritmo con el método de Newton-Raphson modificado, se halla que el número de cálculos adicionales necesarios para llevar a cabo la k-ésima iteración es del orden de 2k productos escalares, y cada uno de ellos requiere O(N) operaciones elementales, por lo cual puede considerarse como un método muy ventajoso desde el punto de vista de economía de cálculo.

El siguiente resultado dá las condiciones suficientes para asegurar la convergencia del método de Broyden.

Proposición 5.5. Si la función R(T), definida de  $\Re^N$  en  $\Re^N$  tiene derivada continua en un cierto entorno abierto convexo S alrededor de la raíz  $T_*$ , donde la matriz jacobiana J(T) es localmente lipschitziana (condición 5.16), y además  $J(T_*)$  es no singular, el método de Broyden definido anteriormente converge superlinealmente hacia la solución  $T_*$  es decir, existe una sucesión de números reales positivos  $\alpha_i \to 0$  tales que:

$$||T_{i+1} - T_{\star}|| \le \alpha_i ||T_i - T_{\star}|| \tag{5.43}$$

Demostración: Dennis y Moré [37].

Nótese que las mismas hipótesis garantizan convergencia cuadrática si se utiliza el método de Newton-Raphson completo.

Método de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS).

El método BFGS es probablemente el más popular de la familia QN, debido a razones históricas y también computacionales.

Si, además de la condición secante (5.23) se pretende que la fórmula de actualización para la aproximación a la matriz jacobiana herede de una iteración a la siguiente el carácter simétrico, se obtiene una nueva familia de expresiones de actualización. Una fórmula de rango unitario puede escribirse:

$$H_{i+1} = H_i + \frac{(s_i - H_i y_i)(s_i - H_i y_i)^T}{(s_i - H_i y_i)^T y_i}$$
(5.44)

(ver Fiacco y McCormick [53]). Sin embargo, la expresión anterior no asegura la hereditariedad del carácter definido positivo de  $H_{i-1}$ , que es de gran utilidad en la práctica pues permite usar factorizaciones económicas de la matriz jacobiana (factorización  $L^T L$ de Choleski o QR de Householder). No existe una única fórmula de actualización que transmita el caracter simétrico definido positivo de la matriz.

La fórmula de Davidon-Fletcher-Powell (DFP) [36] asegura que B hereda el carácter simétrico definido positivo:

$$B_{i+1} = (I - \frac{y_i s_i^T}{s_i^T y_i}) B_i (I - \frac{s_i y_i^T}{s_i^T y_i}) + \frac{y_i y_i^T}{s_i^T y_i}$$
(5.45)

Por otra parte, la fórmula de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) garantiza que el  $H_{i+1}$  se mantiene simétrica definida positiva si  $H_i$  lo es también:

$$H_{i+1} = (I - \frac{s_i y_i^T}{s_i^T y_i}) H_i (I - \frac{y_i s_i^T}{s_i^T y_i}) + \frac{s_i s_i^T}{s_i^T y_i}$$
(5.46)

A pesar de la semejanza entre ambas expresiones, las dos actualizaciones *no* son equivalentes. En efecto, la expresión correspondiente a  $H_{i+1}$  con el método *DFP* es (Dennis y Moré [37]):

$$H_{i+1} = H_i + \frac{s_i s_i^T}{s_i^T y_i} - \frac{H_i y_i y_i^T H_i}{y_i^T H_i y_i}$$
(5.47)

Puede demostrarse que los dos métodos descritos son de rango 2.

El interés del método *BFGS* proviene fundamentalmente de su aplicación en el problema de minimización de funcionales, donde la experimentación numérica acumulada por diversos autores parece indicar que se trata del mejor algoritmo quasi-Newton. El siguiente resultado dá las condiciones de convergencia de los dos métodos presentados anteriormente para la minimización de  $f : \Re^N \to \Re$ . La convergencia superlineal se puede asegurar ahora sólo en el caso de que se lleve a cabo una *suboptimización* ('line search' en la literatura en inglés) en la dirección del vector  $s_i$ . La fórmula incremental (5.4) puede modificarse escribiendo:

$$T_{i+1} = T_i + \lambda_i (A_i)^{-1} R_i$$
(5.48)

donde  $\lambda_i$  es un escalar 'próximo' a la unidad, pero cuyo valor óptimo minimiza la distancia a la solución (sea la raiz o el mínimo) en cada iteración *i*. Más adelante se

volverá sobre este aspecto, definiendo métodos adecuados para una correcta elección del parámetro de suboptimización.

Proposición 5.6. Si la función  $f : \Re^N \to \Re$  es  $C^2$  en un cierto entorno abierto convexo S alrededor de la solución  $T_*$ , con  $\nabla f(T_*) = 0$  y el hessiano  $\nabla^2 f$  es no singular y definido positivo en  $T_*$ , siendo la matriz hessiana localmente lipschitziana en S:

$$\exists r > 0 : \|\nabla^2 f(T) - \nabla^2 f(T_\star)\| \le r \|T - T_\star\| \ \forall T \in S$$
(5.49)

(a) Los métodos DFP y BFGS definidos anteriormente con  $\lambda_i = 1 \forall i$  convergen linealmente hacia  $T_{\star}$ .

(b) Los métodos DFP y BFGS definidos anteriormente con cualquier método de selección de  $\lambda_i$  que implique que si se cumple:

$$\lim_{i \to \infty} \frac{\|B_i - \nabla^2 f(T_\star)\|}{\|s_i\|} = 0$$
(5.50)

entonces  $\lambda_i \rightarrow 1$  y si además la sucesión de  $T_i$  generada por los métodos DFP o BFGS verifica:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \|T_i - T_\star\| < \infty$$
(5.51)

entonces se tiene convergencia superlineal hacia la solución.

Demostración: Dennis y Moré [37].

A pesar de lo complicado del aspecto de las hipótesis que aseguran la convergencia superlineal, algoritmos relativamente simples de suboptimización permiten obtener tal tasa de convergencia.

La implementación práctica del método *BFGS* puede llevarse a cabo sin el almacenamiento en memoria de la matriz correspondiente a la iteración precedente en dos modos distintos. Matthies y Strang [93] presentan los dos algoritmos que se exponen a continuación.

En primer lugar veamos que se puede obtener una forma producto de la ecuación (5.46) si la matriz  $H_1$  es simétrica y definida positiva:

Proposición 5.7. Si  $H_1$  es simétrica y definida positiva, la fórmula de actualización del jacobiano (5.46) es equivalente a:

$$H_{i} = (I + w_{i-1}v_{i-1}^{T})H_{i-1}(I + v_{i-1}w_{i-1}^{T})$$
(5.52)

con:

$$w_{i-1} = \frac{s_{i-1}}{y_{i-1}^T s_{i-1}} \tag{5.53}$$

y:

$$v_{i-1} = R_i - \xi R_{i-1} \tag{5.54}$$

siendo definido el escalar  $\xi$  mediante la expresión:

$$\xi = \left(\frac{y_{i-1}^T s_{i-1}}{s_{i-1}^T R_{i-1}}\right)^{1/2} \tag{5.55}$$

Demostración: Brodlie et al. [12].

La proposición anterior (algoritmo BFGS1) permite una rápida implementación del método memorizando sólamente los vectores  $v_i$  y  $w_i$ , e involucrando sólamente productos escalares (como en el método de Broyden) y no los costosos productos matrizvector. Si la hipótesis de la proposición anterior no se cumple, se implementa el método igualmente almacenando sólamente dos vectores y un escalar por iteración. Utilizando directamente la fórmula (5.46), se procede del siguiente modo para efectuar la *i*-ésima corrección:

- 1) Se calcula el residuo  $R_i$  y se inicializa  $q_i = R_i$ .
- 2) Se calcula y memoriza  $\rho_{i-1} = s_{i-1}^T y_{i-1}$ .
- 3) Se almacena  $y_{i-1} = R_{i-1} R_i$ .
- 4) Desde j = i 1 hasta j = 1, se calcula y se memoriza

$$\alpha_j = -s_j^T q_j / \rho_{j+1}.$$

Se modifica  $q_{j-1} = q_j + \alpha_j y_j$ .

Fin del bucle 4).

5) Se sustituye para hallar  $r_1 = J_1^{-1}q_0$ .

6) Desde j = 1 hasta j = i - 1, se calcula

$$\beta_j = -y_j^T r_j / \rho_{j+1}.$$

Se modifica  $r_{j+1} = r_j + (\beta_j - \alpha_j)s_j$ .

Fin del bucle 6).

7) La corrección  $s_i$  se encuentra memorizada en  $r_i$ .

(Algoritmo BFGS2).

En cada iteración, los vectores  $y_i$  y  $s_i$  deben ser memorizados, además de la cantidad escalar  $\alpha_i$ .

En cualquier caso, el costo adicional de la k-ésima iteración BFGS sobre el método de Newton-Raphson modificado puede estimarse en alrededor de 4k productos escalares, lo cual representa un esfuerzo computacional mínimo.

Conviene señalar que en el presupuesto de que  $H_1$  no sea simétrica y definida positiva (como es nuestro caso), la equivalencia entre los algoritmos no está asegurada. Además, el signo de la cantidad bajo la raiz cuadrada en (5.55) puede ser negativo. Sin embargo, la experiencia numérica acumulada durante la elaboración de esta memoria ha mostrado que los dos algoritmos son básicamente equivalentes cuando se emplean para el tipo de problemas considerado, y que las dificultades en la convergencia se presentan de forma simultanea, debiendo atribuirse en la mayoría de los casos a una mala aproximación inicial  $H_1$ . Como regla general, y dado que el algoritmo *BFGS2* de Matthies y Strang no representa ningún costo adicional significativo, el método *BFGS* se debe programar usando esta versión, que es más segura y fiable.

Las condiciones de aplicación de los métodos QN presentados se limitan a evitar denominadores nulos (normalmente productos escalares entre vectores ortogonales) o cantidades negativas bajo una raiz cuadrada. Una exploración sistemática de tales circunstancias debe llevarse a cabo en la puesta en práctica de los algoritmos. La detección de una de estas condiciones permite predecir una corrección defectuosa y por lo tanto una posible divergencia. Si así sucede, se puede proceder de acuerdo con una de las dos siguientes estrategias:

a) Cambiar de método iterativo (pasando al método QN paralelo o de modo más simple realizando una corrección de Newton-Raphson modificada).

b) Considerar que la dificultad en la convergencia se debe a la mala calidad de la aproximación a la matriz jacobiana que se está utilizando. Se debe entonces refrescar la matriz  $H_1$ , obtener su factorización y realizar una iteración de Newton-Raphson completa.

#### 5.6 Métodos Newton-Secante.

Introducidos por Crisfield [30], los métodos Newton-Secante (SN) constituyen una variación de los métodos QN motivada, entre otras razones, por el hecho anteriormente señalado de que el costo de cada iteración k en un formato QN crece con k, de modo que las últimas iteraciones resultan comparativamente más caras que las iniciales. Para evitar esta dificultad, Crisfield propone la aplicación de la fórmula quasi-Newton correspondiente a la matriz  $H_1$  teniendo en cuenta sólamente la iteración precedente. De este modo se reduce el número de vectores en memoria necesarios para actualizar H a dos, en lugar de los 2k correspondientes al método QN completo correspondiente. Como Pegon [107] señala, es importante tener en cuenta que los algoritmos desarrollados anteriormente aprovechan en su forma producto la relación  $s_{i-1} = H_{i-1}R_{i-1}$  que ahora no se podrá utilizar ya que se limita el rango de variación en el subíndice de los productorios. Conviene por lo tanto, definir para cada iteración el vector:

$$\mathbf{s}_i^\star = H_1 R_i \tag{5.56}$$

para utilizarlo en las correspondientes expresiones de actualización. Veamos a continuación cómo se transforman las expresiones precedentes adoptando este punto de vista.

#### Método de Broyden-Secante (BS).

Si se escribe (5.33) sustituyendo  $H_{i-1}$  por  $H_1$  se tiene:

$$H_{i} = H_{1} + \frac{s_{i-1} - H_{1}y_{i-1}}{s_{i-1}^{T} H_{1}y_{i-1}} s_{i-1}^{T} H_{1}$$
(5.57)

La corrección  $s_i$  se calcula entonces, teniendo presente la definición (5.56):

$$s_{i} = s_{i}^{\star} + \frac{(s_{i-1} - s_{i-1}^{\star} + s_{i}^{\star})s_{i-1}^{T}}{s_{i-1}^{T}(s_{i-1}^{\star} - s_{i}^{\star})}s_{i}^{\star}$$
(5.58)

Desarrollando, se obtiene:

$$s_{i} = \left(1 + \frac{s_{i-1}^{T} s_{i}^{\star}}{\xi}\right) s_{i}^{\star} + \frac{s_{i-1}^{T} s_{i}^{\star}}{\xi} s_{i-1} - \frac{s_{i-1}^{T} s_{i}^{\star}}{\xi} s_{i-1}^{\star}$$
(5.59)

con:

$$\xi = s_{i-1}^T (s_{i-1}^* - s_i^*) \tag{5.60}$$

De acuerdo con este esquema, en cada iteración se precisa sólamente de las cantidades memorizadas  $s_{i-1}$  y  $s_{i-1}^{\star}$ , más la realización de dos productos escalares.

Método de BFGS-Secante (BFGSS).

Partiendo de la ecuación original (5.46), el método BFGS-Secante se escribe:

$$H_{i} = (I - \frac{s_{i-1}y_{i-1}^{T}}{s_{i-1}^{T}y_{i-1}})H_{1}(I - \frac{y_{i-1}s_{i-1}^{T}}{s_{i-1}^{T}y_{i-1}}) + \frac{s_{i-1}s_{i-1}^{T}}{s_{i-1}^{T}y_{i-1}}$$
(5.61)

Postmultiplicando por el vector  $R_i$  y utilizando la relación:

$$(I + ab^{T})c = c + (b^{T}c)a (5.62)$$

se obtiene la corrección:

$$s_i = (1+C)s_i^* - Cs_{i-1}^* + [C - (1+C)B + CA]s_{i-1}$$
(5.63)

siendo los escalares A, B, y C definidos según:

$$A = \frac{y_{i-1}^{T} s_{i-1}^{*}}{y_{i-1}^{T} s_{i-1}}$$

$$B = \frac{y_{i-1}^{T} s_{i}^{*}}{y_{i-1}^{T} s_{i-1}}$$

$$C = \frac{s_{i-1}^{T} R_{i}}{y_{i-1}^{T} s_{i-1}}$$
(5.64)

El costo de cada iteración queda fijado, por lo tanto, en la evaluación de 4 productos escalares. Los vectores memorizados simultaneamente son 2, como en el caso Broyden-Secante.

Las ecuaciones (5.63) y (5.59) dan la dirección de la corrección en función de tres vectores. Crisfield señala que para asegurar una buena calidad en la corrección  $s_i$ es necesario que la aportación preponderante sea la correspondiente a la dirección  $s_i^*$ , lo cual parece intuitivamente coherente si se considera que los otros dos vectores constituyen la corrección secante al método de Newton-Raphson modificado. Por lo tanto, dos indicadores pueden predecir una posible divergencia en el método: a) El coeficiente que multiplica a  $s_i^*$  no es próximo a la unidad.

b) Las normas de las contribuciones en las direcciones de  $s_{i-1}$  y  $s_{i-1}^*$  son parecidas o superiores a la norma correspondiente a la dirección privilegiada  $s_i^*$ .

Si una de estas dos condiciones se presenta, se puede actuar como se ha señalado más arriba, omitiendo la corrección SN y adoptando  $s_i = s_i^*$ , o apelar al cálculo y factorización de una matriz jacobiana correspondiente al campo de temperaturas actual.

Los métodos SN descritos adolecerán de un nivel de adaptatividad menor que sus homólogos QN. En particular serán más sensibles a la calidad de la matriz  $H_1$ . Queda por evaluar la pérdida de eficacia asociada a la utilización de la aproximación SN. Más adelante se verá que en la práctica la tasa de convergencia se deteriora relativamente poco por la adopción del procedimiento SN, incluso en el caso de no linealidades fuertes.

#### 5.7 Métodos Newton-SOR.

En esta apartado se describirán brevemente las características del método de Newtonsobrerrelajación sucesiva, y se discutirá sobre su conveniencia en la resolución del tipo de problemas que nos ocupan. Consideremos la resolución del sistema de ecuaciones:

$$s_i = J_i^{-1} R_i (5.65)$$

mediante un método iterativo. La resolución del problema no lineal se descompone entonces en dos niveles de iteración: las iteraciones *externas* sobre i y la iteraciones internas necesarias para resolver (5.65) que numeraremos con el subíndice m (Ortega y Rheinboldt [101]). Supongamos que la matriz jacobiana se descompone de acuerdo con la expresión (4.9):

$$J_i = B - C \tag{5.66}$$

donde B y C tiene la forma dada por la ecuación (4.10). El algoritmo iterativo se escribe entonces (ver por ejemplo White [166]), de acuerdo con la expresión (4.11):

$$T_{i+1,m+1} = T_i + (B^{-1}C)s_{i,m} + B^{-1}R_i$$
(5.67)

Desarrollando en función de las aproximaciones precedentes a  $s_i$ , tenemos:

$$T_{i+1,m+1} = T_i + (B^{-1}C)^{m+1} s_{i,0} + [(B^{-1}C)^m + (B^{-1}C)^{m-1} + \dots + (B^{-1}C) + I]B^{-1}R_i$$
(5.68)

Utilizando la relación:

$$[A^{m} + A^{m-1} + \dots + A + I] = (I - A^{m+1})(I - A)^{-1}$$
(5.69)

y empleando además la expresión (5.66) en su forma  $I - B^{-1}C = B^{-1}J_i$ , la ecuación (5.67) se transforma en:

$$T_{i+1,m+1} = T_i + (B^{-1}C)^{m+1}s_{i,0} + [I - (B^{-1}C)^{m+1}][I - (B^{-1}C)]^{-1}B^{-1}R_i$$
  
es decir  
$$T_{i+1,m+1} = T_i + (B^{-1}C)^{m+1}s_{i,0} + [I - (B^{-1}C)^{m+1}]J_i^{-1}R_i$$
(5.70)

Si ahora se supone que la primera iteración  $s_{i,0} = 0$ , el método iterativo Newton-SOR puede escribirse, definiendo la función  $G_m : \Re^N \to \Re^N$ :

$$G_m(x) = x + [I - (B^{-1}C)^m] J_i^{-1} R_i(x)$$
(5.71)

y escogiendo para cada iteración externa i un número máximo de iteraciones internas  $m_i$ , del siguiente modo:

$$T_{i+1} = G_{m_i}(T_i) \tag{5.72}$$

La idea que intuitivamente aparece ahora es que se puede escoger una serie de  $m_i$  tales que el esfuerzo computacional se reduzca ofreciendo garantías de convergencia. En efecto, para las primeras iteraciones externas, no es necesaria una gran exactitud en la determinación de  $s_i$ , ya que el vector resultante está todavía lejano de la solución R = 0. A medida que la solución se hace próxima, las iteraciones internas deben dar una estimación más exacta de  $s_i$ . El siguiente resultado da las condiciones suficientes para obtener convergencia utilizando este método.

Proposición 5.8. Si la función residuo  $R : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}_N$  es  $C^1$  en un entorno abierto convexo S de radio r alrededor de la raiz  $T_*$ , donde se verifica la condición de Lipschitz (5.49) y la matriz jacobiana  $J(T_*)$  es no singular. Si además la descomposición (5.66) de  $J_i$  verifica las siguientes condiciones:

$$\begin{array}{lll}
\rho(B^{-1}C) &< 1\\
B & es & continua\\
B(T_{\star}) & es & no singular\\
B & es & lipschiziana en S
\end{array}$$
(5.73)

Definiendo la sucesión  $m_i$ :  $2^i$  o alternativamente como  $m_i$ : i, entonces existe un entorno  $S_2$ :  $|T - T_*| < r_2 < r$ , donde el método descrito converge linealmente hacia  $T_*$ . Si se escoge  $m_i$ :  $2^i \forall i$ , entonces la convergencia es superlineal.

Demostración: Sherman [138].

La proposición anterior permite por lo tanto diseñar una estrategia en la resolución iterativa de  $s_i = B^{-1}R_i$ . Sin embargo, la obtención de convergencia superlineal resulta onerosa si el número de iteraciones requerido para alcanzar el límite de precisión deseado en el proceso iterativo externo es superior a 5 o 6. En efecto, para i = 5,  $m_i = 32$ iteraciones SOR. Recordemos que cada iteración SOR (o Gauss-Seidel) requiere alrededor de  $O(N^2)$  operaciones básicas, en lugar de las O(N) operaciones requeridas por la metodología QN. Como por otra parte es frecuente encontrar casos en la práctica que requieren 10 o 12 iteraciones QN, el método parece penalizado 'a priori' con respecto a la familia de algoritmos de Newton. Además, persiste el problema fundamental asociado al metodología SOR, es decir, la elección del parámetro de sobrerrelajación  $\omega$  óptimo. De esta manera, parece juicioso reservar la metodología Newton-SOR a problemas de magnitud tal que el almacenamiento en memoria de una matriz jacobiana sea prácticamente inabordable o su factorización requiera un tiempo de calculo verdaderamente dispendioso.

Parece lógico suponer que el método Newton-SOR se aplica sólamente con respecto al método de Newton completo. Esto es generalmente cierto, si el esfuerzo computacional mayoritario no recae sobre el cálculo de la matriz jacobiana, sino más bien sobre la inversión de la misma. Si, por el contrario, en un problema dado la obtención del jacobiano representa un costo numérico apreciable, los métodos QN pueden ser usados igualmente, cambiando las etapas de sustitución sobre la factorización LU almacenada en memoria por resoluciones iterativas SOR del sistema  $B_1q = R_i$ . Este es típicamente el caso cuando la dependencia funcional entre R(T) y T a través de la matriz M(T)y del vector F(T) en la ecuación (4.1) no está claramente establecida. Se impone entonces un cálculo de la matriz jacobiana mediante diferenciación numérica para la
obtención de cada uno de sus elementos, lo cual puede representar un costo en tiempo de cálculo notable. Si la tolerancia en las iteraciones internas es lo suficientemente precisa, los resultados de convergencia dados en los apartados anteriores mantienen su validez, ya que no presuponen el uso de ningún método en particular en las etapas de resolución. Sin embargo será en general difícil asegurar 'buenas' tasas de convergencia (al mínimo superlineales) si se limita el número de iteraciones internas de acuerdo con una estrategia similar a la expuesta para el método Newton-SOR. Por estas razones, y dada la magnitud de los problemas abordados, se ha preferido concentrar el desarrollo numérico en la confección de esta memoria en el análisis de la familia de algoritmos de Newton directos.

#### 5.8 Suboptimización en la Dirección de Corrección.

Como hemos visto anteriormente, la fórmula secuencial (5.4) puede modificarse añadiendo un parámetro escalar  $\lambda_i$  que a cada iteración minimice la distancia a la solución en la dirección del vector  $s_i = H_i R_i$ . Definiendo, para cada iteración *i*, la función escalar:

$$\Phi(\lambda) = s_i^T [R(T_i + \lambda s_i)]$$
(5.74)

el problema se reduce a hallar, para cada iteración, el valor de  $\lambda$  que anula la función  $\Phi$ . La expresión de la anulación del residuo a través de la función escalar  $\Phi$ , mediante el producto escalar con el vector  $s_i$  se justifica por el hecho de que es más fácil anular una cantidad escalar, que por otra parte tiene un significado físico claro en problemas de mecánica estructural, pues representa la energía no balanceada en una configuración de cuasi-equilibrio (en este caso  $R_i$  tiene dimensiones de fuerza y  $s_i$  dimensiones de desplazamiento).

La introducción del parámetro de suboptimización en el esquema recursivo (5.4) aparece como un concepto heredado de los *métodos de gradiente* aplicados a la minimización de funciones escalares (y por lo tanto aplicables a la búsqueda de raíces de funciones vectoriales). Para un análisis más profundo de esta metodología pueden consultarse los textos de Ortega y Rheinboldt [101], capítulo 14 u Oden [99], capítulo 17. En un reciente estudio, Brussino y Sonnad comparan las características del método del gradiente conjugado directo y con matriz de precondicionamiento [15].

Si se tiene en consideración que en los problemas de minimización la variable que debe ser anulada es el vector gradiente  $-\nabla f$ , que corresponde al residuo R en el problema de identificación de raíces para funciones de  $\Re^N$  en  $\Re^N$ , se puede reconocer en el método del gradiente presentado en el capítulo anterior una versión del método del punto fijo (ecuación 5.8) con parámetro de suboptimización escalar  $\lambda$ . No debe extrañar por lo tanto que el método del gradiente ofrezca sólamente convergencia lineal incluso realizando suboptimizaciones más cuidadosas que la dada por la expresión (4.24).

Nótese, por otra parte, que el método resulta económico por las mismas razones que el método del punto fijo, ya que no necesita inversión de matrices, aunque en general, utilizando el método del gradiente en su versión no lineal hace falta un producto matrizvector por iteración (para calcular el parámetro de longitud de paso óptima  $\lambda$ ). Este costo es aproximadamente equivalente como orden de magnitud al de una etapa de sustitución si se utiliza un método de Newton-Raphson modificado.

Con referencia al método del gradiente conjugado, en el caso general de funcional no cuadrático (es decir, de sistema de ecuaciones no lineal, la ortogonalidad de los gradientes y el carácter <u>H</u> -conjugado de las direcciones de descenso son ciertos sólo entre dos iteraciones sucesivas, y las expresiones para  $\beta$  precedentes no son equivalentes. La experiencia numérica recogida en la literatura indica que la versión Polak-Ribière es más robusta y presenta mejores características de convergencia [115].

En el caso contemplado por la familia de métodos Newton, la matriz que se utiliza para el cálculo de la dirección de descenso  $s_i$  no es la matriz unitaria (métodos del gradiente o del punto fijo), pero la minimización en la dirección de descenso puede llevarse a cabo igualmente utilizando la expresión (5.74). El proceso de búsqueda del  $\lambda_i$  óptimo para cada iteración *i* se lleva a cabo de manera iterativa, calculando una sucesión de  $\Phi_k = \Phi(\lambda_i^{(k)})$  y adoptando como primera aproximación un valor  $\lambda_i^{(0)} = 1$ . Se obtienen los valores de  $\Phi(0)$  y  $\Phi(1)$ , lo cual no require el cálculo de ninguna función adicional, simplemente mediante los productos escalares:

$$\Phi(0) = s_i^T[R(T_i)] 
\Phi(1) = s_i^T[R(T_i + s_i)]$$
(5.75)

A partir de estos dos valores, puede procederse mediante interpolación-extrapolación (Pegon [107]):

- Cálculo de  $\lambda_i^{(1)}$  mediante la expresión:

$$\lambda_i^{(k+1)} = \frac{\Phi_k}{(\Phi_k - \Phi_{k+1})} \lambda_i^{(k)}$$
(5.76)

particularizada para k = 0.

- Interpolación sistemática entre el último valor calculado y  $\Phi(0)$ , mediante la fórmula anterior con k = 0.

- Extrapolación sucesiva entre dos valores inmediatos de k si la sucesión  $(\Phi_0, \Phi_1, ... \Phi_k)$ es toda del mismo signo.

- Interpolación entre el valor negativo (positivo)  $\Phi_k$  correspondiente al menor  $\lambda_i^{(k)}$  de

los calculados anteriormente y el valor positivo (negativo) más próximo.

Los diferentes procedimientos se ilustran en la figura 5.5.

El algoritmo de selección del parámetro de suboptimización se debe acompañar de un procedimiento que limite el rango de variación de  $\lambda$  para evitar correcciones demasiado pequeñas (que limitan la eficacia del proceso de convergencia) o demasiado grandes (que pueden conducir el vector solución fuera del radio de atracción). En la práctica se toma:

$$0.2 \le \lambda_i^{(k)} \le 5 \tag{5.77}$$

como banda de variación.

Un procedimiento alternativo, con el fin de limitar el número de iteraciones necesarias para obtener el  $\lambda_i$  óptimo, puede adoptarse ajustando la función  $\Phi(\lambda)$  en el intervalo de interés mediante un polinomio de grado establecido a priori. Si la dependencia funcional de R con T es de tipo polinomial con grado conocido, parece juicioso suponer que  $\Phi$  varía con  $\lambda_i$  de acuerdo con una ley polinomial al máximo del mismo grado. En el caso general que nos ocupa, el grado en cuestión resulta ser 4 (si la variación con la temperatura de las propiedades materiales involucradas pueden representarse mediante funciones de tercer grado), y por lo tanto el cálculo de cuatro puntos en el plano  $\Phi - \lambda$  bastarían para localizar *exactamente* el valor deseado.

Se debe subrayar, sin embargo, que el proceso de suboptimización así definido implica el cálculo de 3 vectores residuo adicionales dentro de cada iteración de Newton. Si se tiene presente que esta etapa resulta la más cara desde el punto de vista computacional de todas cuantas componenen un esquema QN o NRM, resulta evidente que, a igualdad de cálculo de residuos, debe privilegiarse el cálculo de nuevas direcciones de corrección  $s_i$  frente a la obtención de suboptimizaciones cuidadosas. La experiencia numérica durante la redacción de esta memoria ha confirmado que la suboptimización combinada con el uso de métodos de Newton es en general ineficaz, debiéndose limitar a la primera iteración cuando se utiliza una matriz jacobiana no actualizada recientemente. Incluso en este caso, generalmente resulta más ventajoso realizar una nueva iteración en formato QN o NRM que continuar el proceso de anulación del residuo en la dirección inicial.

Sin cálculo adicional alguno puede obtenerse el valor de  $\lambda_i^{(1)}$  mediante (5.76) y



Figura5.5: Suboptimización en la dirección de descenso.

utilizar la condición (5.77) como predictor de una tasa de convergencia defectuosa, que activa un cambio de método QN o, si la señal se repite, desencadena el cálculo y factorización de una matriz jacobiana fresca.

Puede además argumentarse en contra del método de suboptimización resaltando el hecho de que si el método de Newton se aplica en su versión Newton-SOR, se tendrían hasta tres niveles de iteración distintos, que quizá son demasiados para conseguir una correcta y sencilla implementación práctica.

Esta conclusión en realidad no es sorprendente, ya que la suboptimización se justifica realmente sólo en métodos del gradiente (método del punto fijo, método del máximo descenso, método del gradiente conjugado) todos ellos con matriz de precondicionamiento unitaria. Si se contempla la familia de métodos Newton como un algoritmo del gradiente con precondicionamiento de la matriz iterante, la eficacia del método no recae ya sobre una minimización cuidadosa en la dirección de descenso, sino más bien en la obtención de una dirección de descenso *mejor* gracias a la premultiplicación por la matriz jacobiana.

#### 5.9 Formulación de la Matriz Jacobiana.

Esta sección se dedica a la descripción de la metodología seguida para el cálculo de la matriz jacobiana utilizada sistemáticamente en el marco de un esquema de Newton-Raphson completo, o como matriz de precondicionamiento si se utiliza la familia de métodos quasi-Newton. Por una parte se desea que el cálculo sea lo más exacto posible, ya que, siendo una matriz destinada a ser calculada e invertida *el menor número de veces posible*, conviene claramente que sea lo muy próxima al jacobiano *real* en la posición de equilibrio térmico en la cual se calcula, con el fin de poder utilizarla muchas veces antes de que las tasas de convergencia se deterioren. Storti et al. [152] insisten particularmente sobre este punto, en el contexto del análisis de un problema de cambio de fase. Por otra parte, se desea que su cálculo se lo más sencillo y no suponga un esfuerzo computacional adicional al coste de su factorización LU. De acuerdo con estos criterios, se reserva la diferenciación numérica para casos en los cuales la dependencia de las propiedades térmicas involucradas con la temperatura no sean bien conocidas.

Además, tal diferenciación numérica normalmente acarrea un tasa de convergencia peor que la que se obtiene si se calcula un jacobiano exacto. Recordemos que la ecuación que se trata tiene la forma:

$$M(T)T = F(T) \tag{5.78}$$

donde, como hemos señalado al principio del capítulo, M(T) = K(T) y F(T) = gen el problema de régimen permanente, y  $M(T) = K(T) + 2/\Delta t C(T)$  y  $F(T) = 2/\Delta t C(T)T^{(t)} + g^{t+\frac{\Delta t}{2}}$  en el caso de régimen transitorio.

Con el criterio de signos adoptado, se definió el vector residuo como:

$$R_{i} = F(T_{i}) - M(T_{i})T_{i}$$
(5.79)

y la matriz jacobiana:

$$J_i = \frac{\partial}{\partial T_i} [M(T_i)T_i - F(T_i)]$$
(5.80)

Para hallar el elemento (m, n) de la matriz jacobiana se deriva la componente m del vector residuo con respecto a la temperatura del nodo n.

El problema de formar y ensamblar simultáneamente las matrices características del sistema (M) y jacobiana (J) puede ser resuelto fácilmente mediante derivación de las propiedades térmicas a nivel elemental, tal y como describen Thornton y Wieting [156] y Stelzer y Welzel [149], [150], ensamblando posterioremente los jacobianos elementales de modo completamente análogo a como se procede con las matrices de conductividad y masa.

En el caso de régimen permanente, F(T) es simplemente el vector de cargas, independiente de T salvo en las condiciones de contorno no lineales, y se puede escribir:

$$J_i = K(T_i) + \frac{\partial K(T_i)}{\partial T_i} T_i$$
(5.81)

de modo que se puede construir el jacobiano ensamblando al mismo tiempo las dos matrices que aparecen al lado derecho de (5.81).

Un elemento conductivo con N nodos, cada uno de ellos con temperatura  $T^{(j)}$ , presenta una conductividad ponderada a la temperatura elemental:

$$T^e \simeq \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} T^{(j)}$$
 (5.82)

Diferenciando la parte conductiva elemento a elemento, se obtiene:

$$(J_{cond}^{e})_{mn} = (K_{cond}^{e})_{mn} + \frac{1}{N} \frac{dk^{e}}{dT^{e}} \sum_{l=1}^{N} \frac{1}{k^{e}} (K_{cond}^{e})_{ml} T_{l}$$
(5.83)

Nótese que la segunda matriz presenta columnas idénticas, de modo que la simetría de la matriz se destruye, incluso para casos únicamente conductivos.

Es fácil mostrar que, con la formulación del elemento de radiación térmica presentado en el capítulo 2, la matriz jacobiana correspondiente resulta simplemente ser la propia matriz de conductividad (densa y asimétrica, como corresponde al método de elementos de contorno) multiplicada por 4:

$$(J_{rad}^{e})_{mn} = (K_{rad}^{e})_{mn} + 3(K_{rad}^{e})_{mn}$$
(5.84)

En efecto, la ecuación (2.48), que dá el flujo energético neto que abandona la superficie elemental *i* dentro de una cavidad con  $N_s$  superficies elementales, puede reescribirse como:

$$Q_i = A_i \sum_{j=1}^{N_s} \Lambda_{ij} \sigma \frac{(T_{1j} + T_{2j} + \dots + T_{N_j j})^4}{N_j^4}$$
(5.85)

donde  $A_i$  es el área de la superficie elemental i,  $\Lambda_{ij}$  es función de las emisividades locales y de la matriz de factores de vista, tal y como se definió en el capítulo 2,  $\sigma$  es la constante de Stefan,  $N_j$  es el número de nodos que componen la superficie j y los subíndices denotan las diferentes temperaturas nodales.

Denominando  $U_q$  el conjunto de las superficies elementales en las cuales está presente el nodo q, la derivada del flujo de calor con respecto a la temperatura nodal  $T_q$  es:

$$\frac{\partial Q_i}{\partial T_q} = \sigma A_i \sum_{l \in U_q} \Lambda_{il} 4 \frac{(T_{1l} + T_{2l} + \dots + T_{N_l l})^3}{N_l^4}$$
(5.86)

ecuación que se obtiene aplicando la regla de diferenciación:

$$\frac{\partial}{\partial T_q} = \frac{\partial \overline{T_j}}{\partial T_q} \frac{\partial}{\partial \overline{T_j}}$$
(5.87)

donde, obviamente,  $\overline{T_j}$  representa la temperatura media de la superficie elemental j. Si distribuimos el término  $\partial Q_i / \partial T_q$  dado por (5.86) entre los  $N_i$  nodos de la superficie i, obtenemos la siguiente expresión para el jacobiano elemental de radiación:

$$J_{pq}^{i} = 4 \frac{A_{i}}{N_{i}} \sigma \sum_{l \in U_{q}} \frac{\Lambda_{il}}{N_{l}^{4}} [\sum_{k=1}^{N_{l}} T_{k}]^{3} \quad si \quad p \in i$$

$$J_{pq}^{i} = 0 \qquad si \quad p \notin i$$
(5.88)

Si la superficie i es adiabática, la correspondiente aportación a las matrices de conductividad y jacobiana son nulas para cualquier par de nodos p, q:

$$J_{pq}^{i} = 0 (5.89)$$

El hecho de que la norma matricial de la matriz jacobiana de radiación sea cuatro veces superior a la correspondiente matriz de conductividad evidencia el fuerte efecto no lineal de este fenómeno. La formulación anterior produce igualmente una matriz jacobiana no simétrica y densa. Como esta matriz ha perdido, además, su carácter de matriz de bandas, se hace necesario evitar su factorización de modo más urgente que si se tratase de una matriz 'simetrizable' y capaz de ser invertida mediante la factorización  $L^T L$  de Choleski.

En el caso transitorio, se procede de modo análogo. En este caso la matriz jacobiana es la suma del jacobiano de la matriz de conductividad más la aportación corespondiente a la matriz de masa dependiente de la temperatura:

$$J_i = K(T_i) + \frac{\partial K(T_i)}{\partial T_i} T_i + \frac{2}{\Delta t} C(T_i) + \frac{2}{\Delta t} \frac{\partial C(T_i)}{\partial T_i} (T_i - T^t)$$
(5.90)

Los dos últimos términos en la ecuación anterior se construyen y ensamblan del mismo modo que en (5.83) se obtienen los dos primeros términos.

La obtención de la aportación a la matriz jacobiana debido a las condiciones de contorno convectivas no lineales (a través de una dependencia del coeficiente de película h con la temperatura) o de las condiciones de contorno radiante se lleva a cabo de un modo completamente análogo.

En el caso de elementos internos de convección forzada, si la expresión que liga hen el interior del conducto con las temperaturas nodales es complicada, debido a que la dependencia se expresa a través de números adimensionales (Nu, Pr, Re) y propiedades del fluído cuya derivada no es conocida, se puede adoptar la aproximacíon:

$$(J^e_{conv})_{mn} = (K^e_{conv})_{mn} \tag{5.91}$$

Recordemos que si la ecuación anterior se aplica globalmente, la expresión del método de Newton-Raphson así aproximado se reduce al método de iteración directa, con el consiguiente deterioro de la eficacia en el proceso iterativo.

#### 5.10 Criterios de Convergencia.

Para concluir el capítulo, se comentan algunos aspectos que conciernen los criterios de convergencia utilizados para detener el proceso iterativo. Como señalan, por ejemplo, Bathe y Cimento [8], pueden utilizarse criterios basados sobre el vector de temperaturas T (y sus sucesivas correcciones s), sobre el vector residuo que pretende anularse R, o sobre el producto escalar  $s^T R$ . Nótese que los tres criterios son equivalentes, ya que, si i numera la iteración, se tiene simultáneamente:

$$\lim_{i \to \infty} R_i = 0$$
  

$$\lim_{i \to \infty} s_i = 0$$
  

$$\lim_{i \to \infty} s_i^T R_i = 0$$
(5.92)

Un criterio de convergencia sobre la temperatura relativo del tipo:

$$\frac{\|s_i\|_2}{\|s_0\|_2} \le \varepsilon_1 \tag{5.93}$$

puede combinarse con un criterio análogo sobre el residuo:

$$\frac{\|R_i\|_2}{\|R_0\|_2} \le \varepsilon_1 \tag{5.94}$$

donde se escoge la misma tolerancia para no privilegiar ninguno de los dos (en análisis numéricos estándar se toma  $\varepsilon_1$  en el rango de  $10^{-2}$  a  $10^{-4}$ , aunque se puede utilizar un criterio más exigente si se desea analizar con detalle el comportamiento en convergencia de un determinado algoritmo). En la misma línea de criterios *relativos* Winget y Hughes [170] proponen un criterio adicional, basado en las sucesivas correcciones sobre la norma del vector velocidad  $\dot{T}$ . En configuraciones cercanas al equilibrio, o con pasos de tiempo muy pequeños, los vectores  $s_0$  y  $R_0$  pueden ser pequeños, y la utilización de criterios como (5.93) o (5.94) puede conducir a situaciones en las cuales se obtienen soluciones demasiado exactas, habiendo realizado un esfuerzo computacional inútil. Sin embargo, el siguiente criterio:

$$\|s_i\|_{\infty} \le \varepsilon_2 \tag{5.95}$$

basado en la norma del máximo, a pesar de ser *absoluto*, tiene la ventaja de proporcionar una idea clara del número de dígitos exactos que se tienen en la solución numérica. Una versión equivalente sobre el vector R no es de utilidad, ya que el orden de magnitud de los flujos térmicos depende de las propiedades materiales y es difícil de estimar de antemano.

En la práctica, se utilizan las ecuaciones (5.93) y (5.95) como criterios de convergencia, siendo  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_2$  constantes fijadas libremente por el analista.

# Capítulo 6

# Control del Error en la Integración Temporal y Selección Automática del Paso de Tiempo.

Hemos visto en los capítulos precedentes que la solución de la ecuación de la difusión del calor en régimen transitorio puede implicar la solución de sistemas de ecuaciones rígidos debido a la superposición de diferentes constantes de tiempo.

El uso de un método eficaz de selección automática del paso de tiempo óptimo supone un aspecto importante en el análisis numérico del fenómeno cuando se tratan casos con un gran número de grados de libertad y en los cuales se encuentran presentes las dificultades mencionadas más arriba.

El propósito es integrar con la exactitud fijada 'a priori' la ecuación considerada hasta un cierto valor del tiempo, optimizando el valor de  $\Delta t$  en cada paso de tiempo, de modo que se minimize en la medida de lo posible el número total de pasos de tiempo (y por lo tanto de iteraciones) requeridas para el análisis.

Algunos métodos han sido propuestos en los últimos años para llevar a cabo esta labor, con referencia a métodos explícitos, implícitos y mixtos implícito-explícito.

En general, la metodología de ajuste automático de paso de tiempo se fundamenta en consideraciones espectrales si se trabaja con esquemas explícitos (ver para un estudio detallado en Donéa y Laval [41], Myers [98], o para algoritmos mixtos, Narasimhan et al. [86]). Si se utilizan algoritmos incondicionalmente estables, el control del paso de tiempo puede efectuarse mediante un análisis del error de integración temporal. Esto permite realizar a la vez las tareas de control sobre el paso de tiempo y sobre la integración numérica (Winget y Hughes [170]).

En este capítulo se presentan algunas de las estrategias de control sobre la integración temporal utilizadas para evaluar la precisión con la cual se obtiene la solución durante el desarrollo del transitorio. Se propone una variación sobre los algoritmos iterativos presentados anteriormente que permite, combinada con una análisis 'a posteriori' del error de integración cometido en un paso determinado, diseñar un algoritmo original de ajuste automático del paso de tiempo que proporcione una distribución *uniforme* del error sobre el nivel de precisión fijado libremente por el calculista.

### 6.1 Análisis 'a posteriori' del Error.

El error proviniente de la discretización temporal sobre los sucesivos vectores de temperatura  $T^n$  es claramente función de  $\Delta t$ . Obviamente se intenta hacer este error mínimo, pero al mismo tiempo mantener el paso de tiempo lo suficientemente grande para aprovechar al máximo el esfuerzo computacional iterativo que se debe realizar en cada intervalo temporal. Se hace necesario, por lo tanto, una medida del error en la solución discretizada en el tiempo y el hallazgo de una relación entre esta medida del error y la longitud del paso temporal.

La solución ideal a este problema sería conocer una estimación del error cometido antes del cálculo del paso de tiempo correspondiente. Esto permitiría fijar un  $\Delta t$ lo suficientemente pequeño para satisfacer la exactitud deseada (Park y Underwood [103]). Sin embargo, para el caso general no lineal, es bastante difícil establecer una estimación 'a priori' del error.

Se prefiere, por lo tanto, utilizar el método del análisis 'a posteriori' del error de integración (Narasimhan et al. [86], Winget y Hughes [170]). Se toma un valor para  $\Delta t$ y se calcula la solución  $T^{n+1}$ . A partir de esta solución, y apoyándonos en la solución para el paso precedente  $T^n$ , se estima el error cometido en el paso de tiempo. Si el error no resulta aceptable de acuerdo con los criterios de exactitud prefijados, la solución así computada se rechaza, el paso de tiempo utilizado anteriormente se reduce de acuerdo con una cierta estrategia y se procede con la integración. Se subraya que un error comparativamente muy pequeño en la integración temporal indica claramente que la solución es 'demasiado exacta' debido a la pequeña longitud del paso de tiempo. De este modo, el error se convierte en el parámetro de control que actúa sobre el algoritmo de ajuste automático de paso de tiempo.

Una medida del error útil debe en primer lugar ser fiable, es decir, debe ser proporcional de alguna manera al verdadero error. En segundo lugar, la estimación del error debe ser fácil de calcular, y su obtención no debe ser costosa desde el punto de vista computacional. Dos factores fundamentales contribuyen sobre el error: la discretización temporal y la no linealidad del fenómeno durante el cálculo de un paso de tiempo. Las *tasas de cambio* de las diferentes magnitudes involucradas pueden ser utilizadas para medir el error cometido. Si por ejemplo se considera que el esquema de integración utilizado se basa en la suposición de un valor de T constante durante el paso de tiempo, el error en la integración temporal depende directamente de la validez de esta hipótesis, cuya exactitud relativa puede medirse calculando la diferencia en porcentaje entre las velocidades en dos pasos de tiempo consecutivos:

$$e_{v1} = 2 \frac{\|\dot{T}^{n+1} - \dot{T}^n\|_2}{\|\dot{T}^{n+1} + \dot{T}^n\|_2}$$
(6.1)

donde  $\|\cdot\|_2$  representa la norma euclídea. Si se prefiere, puede normarse el vector de error mediante la norma del máximo  $\|\cdot\|_{\infty}$ :

$$\|v\|_{\infty} = \|v_1, v_2, \dots, v_N\|_{\infty} = \max_{i=1,N} |v_i|$$
(6.2)

y definir:

$$e_{v2} = 2 \frac{\|\dot{T}^{n+1} - \dot{T}^n\|_{\infty}}{\|\dot{T}^{n+1} + \dot{T}^n\|_{\infty}}$$
(6.3)

Se pueden, de modo análogo, definir errores basados sobre la tasa de variación de otras magnitudes, tales como el residuo R, la temperatura T o el producto escalar  $T^T R$ , normarlos mediante las distancias euclídea o máxima, e introducir limitadores para cada una de estas medidas de error. Este procedimiento, sin embargo, no tiene en cuenta de forma directa el efecto de la no linealidad de la solución en la estimación del error.

Para soslayar esta dificultad, se ha empleado un procedimiento de análisis 'a posteriori' del error inspirado en la metodología de Winget y Hughes [170]. Dados dos soluciones correspondientes a los instantes n y n + 1, se calcula el error sobre algunas magnitudes para  $t = t_n + \Delta t/2$ . En particular, Winget y Hughes definen los errores de paso medio sobre la velocidad  $\dot{T}$ , los flujos de calor (vector residuo) R y sobre el producto  $R^T \dot{T}$ . De acuerdo con el esquema de integración adoptado en nuestro caso, en el cual se resuelve el balance de flujos de calor precisamente en  $t = t_n + \Delta t/2$  (es decir se resuelve la ecuación  $R(t_n + \Delta t/2) = 0$ , parece más juicioso evaluar los flujos de calor no balanceados al final del paso de tiempo, y utilizar este vector, convenientemente normado, como medida del error. De modo sistemático se calcula el vector residuo al final del paso de tiempo:

$$R^{t+\Delta t} = \left[\frac{2}{\Delta t}C^{t+\Delta t}T^{t} + g^{t+\Delta t}\right] - \left[K^{t+\Delta t} + \frac{2}{\Delta t}C^{t+\Delta t}\right]T^{t+\Delta t}$$
(6.4)

Por simplicidad, se utiliza sólo el vector de flujos de calor al final del paso de tiempo para evaluar el error. Se toman entonces la norma euclídea del error normalizado, y se adopta como criterio de bondad para un determinado paso de tiempo:

$$E_{int} = \frac{\|R^{t+\Delta t}\|_2}{\|\left[K^{t+\Delta t} + \frac{2}{\Delta t}C^{t+\Delta t}\right]T^{t+\Delta t}\|_2} \le \epsilon_{int}$$
(6.5)

siendo  $\epsilon_{int}$  una constante (normalmente en torno a  $10^{-3}$  en la práctica) preestablecida con anterioridad.

De acuerdo con nuestra experiencia, la utilización de la norma euclídea proporciona variaciones más continuas del error que la norma máxima, y en condiciones normales, debe ser preferida su utilización. Sin embargo, cuando se analizan casos con variaciones bruscas en las condiciones de contorno, conviene introducir adicionalmente una versión de (6.5) con la norma  $\|\cdot\|_{\infty}$ , con un tolerancia  $\epsilon_{int2}$  acorde con (6.5), cuyo orden de magnitud debe ser  $\epsilon_{int2} \sim \epsilon_{int}/N$ , siendo N el número de grados de libertad del problema.

Nótese que la elección de la tolerancia  $\epsilon_{int}$  no es completamente libre, pues debe ser elegida de modo coherente con la tolerancia utilizada en la resolución de la ecuación sobre el residuo  $R(t_n + \Delta t/2) = 0$ . Es necesario que este último vector tras el proceso iterativo que conduce a su anulación sea muy pequeño con relación al  $R^{t+\Delta t}$  definido en la ecuación (6.4), con el fin de que el indicador de error mida única y exclusivamente el error de integración temporal, sin perturbaciones inducidas por el error en el proceso iterativo.

# 6.2 Formulación de Equilibrio Energético con Longitud de Arco Impuesta para el Problema Parabólico.

En esta sección se desarrolla un método de longitud de arco impuesta con restricción esférico-elipsoidal y se aplica a la fórmula de integración temporal de Crank-Nicolson. El sistema de ecuaciones no lineales sobre la temperatura se extiende, añadiendo como variable el propio paso de tiempo, que se determina mediante una ecuación adicional. El procedimiento de iteración se realiza, por lo tanto, también sobre el valor de  $\Delta t$ , lo cual plantea algún tipo de dificultad que se evita mediante la adopción de una técnica iterativa modificada.

El método de longitud de arco fué introducido originalmente por Riks [126] y Wempner [165] en el marco del análisis estructural de sólidos con comportamiento no lineal. Ramm [119] y Crisfield [30] desarrollaron ulteriormente el algoritmo de base para facilitar su implementación en programas de cálculo estructural ya existentes.

El fundamento del método consiste en realizar la integración de las ecuaciones cuasiestáticas de equilibrio no con pasos de carga constantes, sino imponiendo un cambio en el vector de desplazamientos de longitud prefijada. Se ha comprobado que tal procedimiento mejora las características de convergencia de las ecuaciones no lineales de equilibrio.

Esta idea se desarrolla ahora para el problema de difusión de energía en régimen transitorio. Se pretende calcular el paso de tiempo de modo tal que el arco descrito durante la evolución del sistema por el vector de temperaturas sea de longitud fijada de antemano. Esto permite evitar cambios bruscos en el campo de temperaturas, y, unido a una estrategia adecuada de selección del arco (en lugar de seleccionar el paso de tiempo), obtener de modo automático pasos de tiempo grandes cuando  $\dot{T}$  es grande, y viceversa.

Como hemos visto precedentemente, el esquema de integración de Crank-Nicolson-Galerkin proporciona el vector de temperaturas al final del paso de tiempo mediante la extrapolación:

$$T^{t+\Delta t} = 2T^{t+\frac{\Delta t}{2}} - T^t \tag{6.6}$$

donde  $T^{t+\frac{\Delta t}{2}}$  es la solución del siguiente sistema de ecuaciones no lineales, que se obtiene tras añadir las condiciones de contorno a la discretización de elementos finitos en el espacio:

$$\left[K^{t+\frac{\Delta t}{2}} + \frac{2}{\Delta t}C^{t+\frac{\Delta t}{2}}\right]T^{t+\frac{\Delta t}{2}} = \left[\frac{2}{\Delta t}C^{t+\frac{\Delta t}{2}}T^{t} + g^{t+\frac{\Delta t}{2}}\right]$$
(6.7)

Este sistema de ecuaciones se resuelve mediante técnicas iterativas. En (6.7), K es la matriz de conductividad, C es la matriz de inercia térmica y g es el vector de flujos térmicos impuestos, que recoge las generaciones térmicas volumétricas y las condiciones de contorno de Neumann y mixtas (convección, radíación).

Escribiendo la fórmula secuencial que dá las sucesivas iteraciones sobre el vector de temperaturas en el instante  $t + \Delta t/2$  del siguiente modo:

$$T_{i+1} = T_i + s_i = T^t + \tau_{i+1} \tag{6.8}$$

se introduce el vector  $\tau_i$  para facilitar la expresión de la condición que define el esquema de longitud de arco fija. La razón del decalaje de índices en al ecuación anterior aparecerá más adelante cuando se discuta la implementación práctica del método. Baste señalar por ahora que la relación que liga s y  $\tau$  es, por construcción, la siguiente:

$$\tau_{i+1} = \sum_{j=1}^{i} s_j \tag{6.9}$$

con

$$\tau_1 = 0 \tag{6.10}$$

Si exigimos que la solución  $T^{t+\frac{\Delta t}{2}}$  se encuentre sobre la hiperesfera de radio l y centro en  $T^t$ , tal condición se expresa, en términos del vector  $\tau_{i+1}$  imponiendo que la norma euclídea de este vector se constante e igual a l durante el proceso iterativo:

$$\tau_{i+1}^T \tau_{i+1} = l^2 \tag{6.11}$$

De este modo, se añade al sistema de ecuaciones original (6.7) una nueva ecuación y una nueva incógnita, que es el paso de tiempo  $\Delta t$  que conduce a la verificación de (6.11). Formamos de este modo un sistema de ecuaciones no lineales que se resuelve de modo iterativo. La expresión en formato Newton-Raphson de las correcciones sucesivas para la variable vectorial  $T_i$  y para la variable escalar  $\Delta t$  se realiza calculando para cada iteración el vector residuo dado por:

$$R_{i} = \left[\frac{2}{\Delta t}C^{t+\frac{\Delta t}{2}}T^{t} + g^{t+\frac{\Delta t}{2}}\right]_{\Delta t = \Delta t_{i}} - \left[K^{t+\frac{\Delta t}{2}} + \frac{2}{\Delta t}C^{t+\frac{\Delta t}{2}}\right]_{\Delta t = \Delta t_{i}}T_{i}$$
(6.12)

y la matriz jacobiana:

$$J_i = -\frac{\partial R_i}{\partial T_i} \tag{6.13}$$

Se forma entonces el sistema de ecuaciones lineales aumentado:

$$\begin{pmatrix} J_i & -\frac{\partial R_i}{\partial \Delta t_i} \\ a_i^T & e_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_i \\ \lambda_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_i \\ l^2 - \tau_i^T \tau_i \end{pmatrix}$$
(6.14)

donde  $\lambda_i$  es la corrección sobre el paso de tiempo (no confundir esta denominación con el parámetro de suboptimización discutido en el capítulo 5):

$$\Delta t_{i+1} = \Delta t_i + \lambda_i \tag{6.15}$$

y  $s_i$  es la corrección del vector de temperaturas dado en (6.8).

El vector  $a_i$  y el escalar  $e_i$  se formulan, de acuerdo con la ecuación (6.11) de la siguiente manera:

$$a_i = \frac{\partial (\tau_i^T \tau_i - l^2)}{\partial T_i} = \tau_i \tag{6.16}$$

$$e_i = \frac{\partial (\tau_i^T \tau_i - l^2)}{\partial \Delta t_i} = 0$$
(6.17)

El vector  $\partial R_i/\partial \Delta t_i$  puede aproximarse a cada paso de tiempo pasando por alto la dependencia de las matrices K, C con la temperatura y utilizando la relación:

$$\frac{\partial}{\partial \Delta t} = \frac{\partial}{\partial t} \tag{6.18}$$

obteniéndose de este modo:

$$\frac{\partial R_i}{\partial \Delta t_i} = \frac{2}{\Delta t_i^2} C^{t + \frac{\Delta t}{2}} \tau_i + \dot{g}$$
(6.19)

Nótese que en la expresión anterior no aparece ningún término en  $\dot{T}$ , ya que en este nuevo contexto, las variables T y  $\Delta t$  son independientes y no se deben tener en cuenta en el cálculo de la derivada parcial en (6.19).

La simple inspección de la ecuación (6.14), en conjunción con (6.17) pone de manifiesto el carácter mal condicionado del sistema de ecuaciones aumentado, debido a la presencia de un término nulo en la diagonal principal. Este inconveniente puede soslayarse mediante el método indirecto propuesto por Crisfield [30] (ver también Felippa [49]), que consiste en desdoblar de alguna manera la ecuación (6.14) con el fin de tratar sólamente la matriz  $J_i$ , cuyo carácter bien condicionado está asegurado por la discretización espacial y temporal realizada. El método garantiza igualmente la invariancia en la estructura de la factorización de la matriz  $J_i^{-1}$ , lo cual permite cambiar con facilidad de un esquema de integración estándar con  $\Delta t$  establecido a un esquema de longitud de arco, con *l* fijo. La primera ecuación en (6.14) se utiliza para obtener la siguiente expresión para la corrección vectorial sobre la temperatura:

$$s_i = J_i^{-1} R_i + \lambda_i J_i^{-1} \frac{\partial R_i}{\partial \Delta t_i} = \overline{s_i} + \lambda_i \overline{\overline{s_i}}$$
(6.20)

La corrección total  $s_i$  se descompone así en dos aportaciones. La primera,  $\overline{s_i}$  recoge la influencia de los fenómenos no lineales a través de la dependencia de las propiedades térmicas con la temperatura, mientras que la segunda,  $\overline{s_i}$  es la aportación debida al paso de tiempo variable durante el proceso iterativo.

En cada iteración, se calcula  $J_i$  (o una 'buena' aproximación),  $R_i$ ,  $\tau_i$  (mediante la ecuación 6.9), y el vector  $\partial R_i/\partial \Delta t$ . Mediante la resolución (sólo en su etapa de sustitución) de dos sistemas lineales con la misma matriz de coeficientes, tal y como se enuncia en la ecuación (6.20), se obtienen los vectores  $\overline{s_i}$  y  $\overline{s_i}$ .

La expresión de  $\tau_{i+1}$  obtenida de este modo se introduce directamente en (6.11) para obtener el valor de  $\lambda_i$  que verifica la condición de longitud de arco impuesta:

$$(\tau_i + \overline{s_i} + \lambda \overline{\overline{s_i}})^T (\tau_i + \overline{s_i} + \lambda \overline{\overline{s_i}}) = l^2$$
(6.21)

Haciendo:

$$v_i = \tau_i + \overline{s_i} \tag{6.22}$$

y desarrollando el producto escalar (6.21), se obtiene la siguiente ecuación cuadrática en  $\lambda_i$ :

$$v_i^T v_i + 2v_i^T \overline{\overline{s_i}} \lambda_i + \overline{\overline{s_i}}^T \overline{\overline{s_i}} \lambda_i^2 - l^2 = 0$$
(6.23)

Esta ecuación tiene dos raíces,  $\lambda_i^{(1)}$  y  $\lambda_i^{(2)}$ , correspondientes a los dos puntos de intersección de la hiperesfera de ecuación  $\tau_{i+1}^T \tau_{i+1} = l^2$  con la trayectoria en  $\Re^N$  correspondiente a la ecuación de evolución R = 0. Intuitivamente se comprende que la solución con sentido físico es aquella que proporciona un ángulo agudo entre las sucesivas correcciones globales. Se forman, por lo tanto, los vectores:

$$s_{i}^{(1)} = \overline{s_{i}} + \lambda_{i}^{(1)} \overline{\overline{s_{i}}}$$

$$s_{i}^{(2)} = \overline{s_{i}} + \lambda_{i}^{(2)} \overline{\overline{s_{i}}}$$
(6.24)

y se comprueba para qué superíndice j se verifica la condición:

$$s_{i-1}^T s_i^{(j)} > 0 \tag{6.25}$$

eligiéndose para  $\lambda_i$  la solución correspondiente a este j. En circunstancias normales, la solución con sentido físico es siempre la más próxima a la solución de la ecuación lineal en  $\lambda_i$  que se obtiene si se suprime el término cuadrático  $\overline{s_i}^T \overline{s_i}$  en la ecuación (6.21):

$$\lambda^{\star} = \frac{l^2 - v_i^T v_i}{2v_i^T \overline{s_i}} \tag{6.26}$$

La razón de esto se encuentra en el hecho de que normalmente, de los dos términos que forman  $s_i$  en (6.20), la norma de  $\overline{s_i}$  es bastante mayor que la de  $\overline{\overline{s_i}}$ , dependiendo la corrección debida al cambio en el paso de tiempo del propio  $\lambda_i$ . De este modo la solución con sentido físico se encuentra próxima a la solución linealizada  $\lambda_{\star}$ .

La condición esférica (6.11) representa un caso particular de la metodología de longitud de arco más general, que resumimos a continuación, en el esquema de presentación seguido recientemente por Skeie y Felippa [141]. La adición del paso de tiempo como variable requiere el concurso de una ecuación suplementaria cuya misión es, además de hacer el sistema de ecuaciones aumentado *compatible*, determinar con mayor facilidad de convergencia los puntos sobre la trayectoria en  $\Re^N$  dada por la curva R(T) = 0que minimizan el esfuerzo computacional global, para una tolerancia en la integración temporal dada. La expresión general de esta ecuación adicional es:

$$c(T,\Delta t) = 0 \tag{6.27}$$

La condición más simple, corresponde la *imposición externa de la longitud del paso* (figura 6.1.a), que se calcula inicialmente a cada paso de tiempo basándose en el error acumulado:

$$c(T,\Delta t) = c(\Delta t) = \Delta t - l = 0$$
(6.28)

Si se limita sólo el rango de variación del vector de temperaturas, tenemos la condición de *limitación de estados*, como por ejemplo la condición de Crisfield introducida, en su versión para ecuaciones parabólicas, en los párrafos anteriores:

$$c(T,\Delta t) = c(T) = (T - T^t)^T (T - T^t) - l^2 = \|\tau\|_2 = 0$$
(6.29)

Otras versiones de esta ecuación pueden utilizarse, sustituyendo la norma euclídea por otro tipo de medida. Skeie y Felippa señalan que aunque la superficie que limita las variaciones de  $\tau$  es una hiperesfera en el espacio de las temperaturas, este método debería denominarse de restricción hipercilíndrica, ya que la ecuación (6.29) corresponde a un hipercilindro en el espacio N + 1 dimensional  $(T, \Delta t)$ , con el eje en la dirección de la variable  $\Delta t$ . La línea vertical en la figura 6.1.b representa la intersección de este hipercilindro con el plano de la solución

La metodología de *longitud de arco estándar* fué inicialmente propuesta por Riks [126] y Wempner [165] utilizando una relación del tipo:

$$c(T, \Delta t) = (T - T^{t})^{T} (\dot{T}) + (\Delta t - \Delta t_{n}) - l = 0$$
(6.30)

donde  $\Delta t_n$  es la longitud del paso de tiempo anterior. De este modo se constringe a las sucesivas iteraciones de aproximación a la solución a estar contenidas en el hiperplano perpendicular en el espacio N+1 dimensional al vector velocidad  $\dot{T}$ , tal y como puede



Figura6.1: Métodos de longitud de arco en N+1 variables (1).

verse en la figura 6.1.c. Nótese que la condición (6.30) coincide con este esquema en sus últimas iteraciones.

La condición hiperelíptica global general limita la variación de las sucesivas iteraciones a un hiperelipsoide, determinado por la constante b en la dirección de los pasos de tiempo y por una matriz definida positiva S y una constante a en el complemento ortogonal de dimensión N (figura 6.2.a):

$$c(T,\Delta t) = a^{2}(T-T^{t})^{T}S(T-T^{t}) + b^{2}(\Delta t - \Delta t_{n})^{2} - l^{2} = 0$$
(6.31)

a partir de la cual, con S = I y a = b = 1 se obtiene una restricción esférica global en  $\Re^{N+1}$  (figura 6.2.b).

Basándose en la ecuación (6.31), Skeie y Felippa proponen una limitación hiperelíptica en  $\Re^{N+1}$  que priviligie de algún modo la dirección de la velocidad  $\dot{T}$  (figura 6.2.c), definiendo así la *condición hiperelíptica local* mediante una ecuación del tipo:



Figura6.2: Métodos de longitud de arco en N+1 variables (2).

$$c(T, \Delta t) = (T - T^{t})^{T} \dot{T} [a^{2} \dot{T}^{T} S \dot{T} + b^{2}] \dot{T}^{T} (T - T^{t})$$

$$+ 2(T - T^{t})^{T} \dot{T} [a^{2} - b^{2}] \dot{T}^{T} \dot{T} (\Delta t - \Delta t_{n}) \qquad (6.32)$$

$$+ \dot{T}^{T} [a^{2} S + b^{2} \dot{T} \dot{T}^{T}] \dot{T} (\Delta t - \Delta t_{n})^{2} - l^{2} = 0$$

donde S es una matriz simétrica definida positiva, adoptando por simplicidad S = I. El uso de restricciones de la forma  $c(T, \Delta t) = 0$ , aplicadas en el espacio N + 1 dimensional comporta, como señalan diversos autores, la necesidad de homogenizar las unidades, ya que el eje temporal tiene diferentes dimensiones de los restantes N ejes, con dimensiones de temperatura en nuestro caso. Esta razón, unida a la facilidad de implementación de la versión hipercilíndrica c(T) = 0 de Crisfield, que posibilita, como se ha subrayado anteriormente, el cambio de un método con l predeterminado a otro con  $\Delta t$  fijado sin complicaciones de programación nos inducen a proponer una versión modificada de la condición (6.11), inspirada en (6.32). Sustituyendo la hiperesfera en  $\Re^N$  (o hipercilindro esférico en  $\Re^{N+1}$ ) por un hiperelipsoide orientado en la dirección de  $\dot{T}$ , y con semiejes iguales en las restantes N - 1 direcciones, podemos escribir, utilizando la definición de  $\tau_i$  dada en (6.8):

$$c(T) = b^{2} \tau_{i+1}^{T} \tau_{i+1} + (a^{2} - b^{2}) \left[\frac{\tau_{i+1}^{T} \dot{T}}{\|\dot{T}\|_{2}}\right]^{2} - l^{2} = 0$$
(6.33)

donde las constantes a y b determinan la excentricidad de la superficie restrictiva. La longitud del semieje en la dirección privilegiada, paralela a  $\dot{T}$  es l/a y el semieje en cualquier dirección ortogonal a ésta tiene valor l/b. Haciendo a = b = 1 se recupera la condición N-esférica (6.11). Para unificar criterios, las constantes a y b se escogen de modo que el volumen del N-elipsoide sea igual al de la N-esfera. Esta condición se impone haciendo:

$$ab = 1 \tag{6.34}$$

De esta manera el hiperelipsoide viene determinado por un tamaño característico, l, y por una excentricidad característica, a. El elipsoide deformado en la dirección de la velocidad implica la elección a < 1 (típicamente de debe escoger  $0.5 \le a \le 1$  para no trabajar con superficies excesivamente deformadas que puedan dañar las características de la convergencia).

La implementación práctica no reviste mayores dificultades que el caso N-esférico. Una vez obtenidos los vectores  $\overline{s_i}$  y  $\overline{\overline{s_i}}$  de acuerdo con la ecuación (6.20), y utilizando el vector  $v_i$  definido en (6.22), la ecuación (6.33) proporciona una ecuación cuadrática sobre la corrección del paso de tiempo,  $\lambda_i$ :

$$b^{2}[v_{i}^{T}v_{i} + 2v_{i}^{T}\overline{\overline{s_{i}}}\lambda_{i} + \overline{\overline{s_{i}}}^{T}\overline{\overline{s_{i}}}\lambda_{i}^{2}] + \frac{(a^{2} - b^{2})}{\|\dot{T}\|_{2}^{2}}[(v_{i}^{T}\dot{T})^{2} + 2(v_{i}^{T}\dot{T})(\overline{\overline{s_{i}}}^{T}\dot{T})\lambda_{i} + (\overline{\overline{s_{i}}}^{T}\dot{T})^{2}\lambda_{i}^{2}] = l^{2}$$

$$(6.35)$$

que, convenientemente reordenada, se escribe:

$$a + b\lambda_i + c\lambda_i^2 = 0 \tag{6.36}$$

con:

X

$$a = b^{2}v_{i}^{T}v_{i} + \frac{(a^{2} - b^{2})}{\|\dot{T}\|_{2}^{2}}(v_{i}^{T}\dot{T})^{2} - l^{2}$$

$$b = 2b^{2}v_{i}^{T}\overline{s_{i}} + 2\frac{(a^{2} - b^{2})}{\|\dot{T}\|_{2}^{2}}(v_{i}^{T}\dot{T})(\overline{s_{i}}^{T}\dot{T})$$

$$c = b^{2}\overline{s_{i}}^{T}\overline{s_{i}} + \frac{(a^{2} - b^{2})}{\|\dot{T}\|_{2}^{2}}(\overline{s_{i}}^{T}\dot{T})^{2}$$
(6.37)

La selección de la raiz con sentido físico se realiza con los mismos criterios descritos para el caso N-esférico.

El vector velocidad que se utiliza es el correspondiente al paso de tiempo anterior, computado una vez que se alcanzó convergencia. En las fórmulas anteriores se puede, sin embargo, actualizar el vector  $\dot{T}$  a cada iteración, con lo cual la orientación de la superficie limitadora varía ligeramente de una iteración a la otra.

La aplicación del método descrito (tanto es su versión N-esférica como en la Nelipsoidal) requiere dos etapas de sustitución del jacobiano factorizado por iteración. Este procedimento puede, sin embargo, modificarse de dos modos distintos. En primer lugar, se puede calcular el vector  $\partial R_i/\partial \Delta t_i$  (y consecutivamente  $\overline{s_i}$ ), manteniéndolos constantes durante todo el proceso iterativo a lo largo del cálculo de un paso de tiempo, actuando de modo parecido al esquema Newton-Raphson modificado. La segunda aproximación consiste en calcular exactamente al principio del paso de tiempo  $\overline{s_i}$ , y aproximarlo sucesivamente mediante el método secante quasi-Newton de Broyden (más adelante se mostrará que esto no es posible si se utiliza el algoritmo BFGS). En cualquiera de los dos casos, el costo adicional del algoritmo se reduce a una etapa de sustitución del jacobiano factorizado por paso de tiempo. Varias pruebas numéricas han confirmado la validez de esta metodología, utilizada con éxito en algunas ocasiones en el campo de la mecánica estructural, pero cuya eficacia en el análisis de problemas difusivos no había sido todavía validada.

Nótese que la primera iteración representa un caso particular debido al desacoplamiento entre los subíndices, que facilita la aplicación del algoritmo *indirecto* de Crisfield. Como la suposición inicial sobre el campo de temperaturas T y sobre el paso de tiempo  $\Delta t$  provienen del paso de tiempo precedente, la primera corrección  $s_i$ 



Figura6.3: Relajación de la condición de arco fijo en la primera iteración.

no lleva forzosamente el vector de temperaturas sobre la superficie de restricción. Se puede escalar la corrección hasta intersectar dicha superficie, o más fácilmente, puede relajarse en esta primera iteración la condición geométrica (6.11) o (6.33), que se aplica sólo a partir de la segunda iteración. De acuerdo con nuestra experiencia, esta segunda forma de actuar proporciona mejores resultados. Además, el factor de escala necesario para llevar la primera iterada sobre la superficie de restricción (que en el caso esférico es la razón entre la longitud de la primera corrección y el radio *l*) dá una buena predicción sobre la dificultad en la convergencia en la medida que su valor se aleja de la unidad, pudiéndose utilizar como activador de una nueva factorización de la matriz jacobiana. La figura 6.3 muestra el procedimiento en los casos N-esférico y N-elipsoidal, poniendo de manifiesto cómo la relajación inicial pude acelerar la convergencia.

Debe subrayarse, además, el problema particular que plantean las condiciones de contorno de Dirichlet cuando se calcula el vector  $\overline{s_i}$ . Como la solución sobre los nodos de contorno con temperatura fijada es exacta durante todo el proceso iterativo, las correcciones sucesivas sobre estos nodos deben ser nulas. Esto se cumple necesariamente en el vector  $\overline{s_i}$ , correspondiente al esquema con  $\Delta t$  prefijado, pero no debe olvidarse en

la parte  $\lambda_i \overline{\overline{s_i}}$ . Se requiere un ciclo adicional sobre este tipo de contorno para anular la corrección *total*.

En general, como puede apreciarse en la figura 6.3, no cabe esperar una aceleración en el proceso de convergencia debido a la adopción de la forma elipsoidal frente a la esférica, sino más bien al contrario, debido a que se privilegia la convergencia hacia pasos de tiempo más grandes, lo cual tiene como efecto secundario inmediato un deterioro en la convergencia en el seno de cada paso de tiempo, que no debe ser considerado como intrínsecamente negativo desde el momento que, como contrapartida, se obtienen pasos de tiempo mayores con el mismo criterio de exactitud en la integración temporal.

# 6.3 Adaptación de la Metodología Quasi-Newton al Algoritmo de Longitud de Arco.

El problema fundamental que se plantea cuando se intenta resolver iterativamente el sistema de ecuaciones no lineales aumentado con la variable  $\Delta t$  reside en el hecho que ahora los residuos utilizados a cada iteración para hallar las sucesivas correcciones  $\overline{s_i}$  y  $\overline{s_i}$  han sido calculados con pasos de tiempo distintos, debido a que la iteración se extiende al propio  $\Delta t$ .

Con referencia al método de Broyden, recordemos que la aproximación a la inversa de la matriz jacobiana viene dada por:

$$J_i^{-1} \simeq H_i = \prod_{j=i-1}^1 (I + w_j s_j^T) H_1$$
(6.38)

con

$$w_{j} = \frac{s_{j} - H_{j}y_{j}}{s_{j}^{T}H_{j}y_{j}}$$
(6.39)

donde,  $H_1$  es la matriz jacobiana inicial factorizada, I es la matriz identidad, y los vectores  $s_i \in y_i$  se definen del siguiente modo (ver capítulo 5):

$$s_i = T_{i+1} - T_i \tag{6.40}$$

$$y_i = R_i - R_{i+1} \tag{6.41}$$

El hecho de calcular  $R_i$  y  $R_{i+1}$  correspondientes a niveles temporales distintos puede tenerse en cuenta desarrollando en serie de Taylor el vector residuo alrededor de  $R_i$ . Escribiendo entonces:

$$T_{i+1} = T_i + \overline{s_i} + \lambda_i \overline{\overline{s_i}} \tag{6.42}$$

$$y_i = R_i + \left(\frac{\partial R}{\partial \Delta t}\right)_i \lambda_i - R_{i+1} \tag{6.43}$$

se tiene que, de acuerdo con esta expresión para  $y_i$ , la matriz de Broyden  $H_i$  verifica:

$$H_{i-1}y_{i-1} = \overline{s_{i-1}} + \lambda_{i-1}\overline{\overline{s_{i-1}}} - H_{i-1}R_i = s_{i-1} - H_{i-1}R_i$$
(6.44)

que es exactamente el mismo esquema utilizado en un contexto de paso de tiempo prefijado (ecuación 5.41), de modo que no se requieren modificaciones adicionales para implementar el algoritmo de longitud de arco, con  $\Delta t$  variable. El método de Broyden presentado en el capítulo 5, adaptado al procedimiento de longitud de arco se resume del siguiente modo:

1) Calcular  $R_i$  y  $(\partial R/\partial \Delta t)_i$  (tal y como se dijo en la sección precedente, este último vector puede mantenerse constante, siendo calculado sólo al inicio de un nuevo paso de tiempo).

2) Para preparar el cálculo de  $\overline{s_i}$ , hállese

$$H_{i-1}R_i = \prod_{j=i-2}^{1} (I + w_j s_j^T) H_1 R_i$$
(6.45)

3) Para preparar el cálculo de  $\overline{\overline{s_i}}$ , hállese

$$H_{i-1}\left(\frac{\partial R}{\partial \Delta t}\right)_i = \prod_{j=i-2}^1 (I + w_j s_j^T) H_1\left(\frac{\partial R}{\partial \Delta t}\right)_i \tag{6.46}$$

4) Calcular y almacenar en memoria el vector  $w_{i-1}$ , utilizando (6.44) y (6.39).

5) Completar el cálculo de  $\overline{s_i}$ :

$$\overline{s_i} = (I + w_{i-1}s_{i-1}^T)H_{i-1}R_i \tag{6.47}$$

6) Completar el cálculo de  $\overline{\overline{s_i}}$ :

$$\overline{\overline{s_i}} = (I + w_{i-1}s_{i-1}^T)H_{i-1}(\frac{\partial R}{\partial \Delta t})_i$$
(6.48)

7) Resolver la ecuación cuadrática en  $\lambda_i$ , que corresponda, es decir (6.23) o (6.36), calcular y memorizar  $s_i$ .

8) Actualizar el vector de temperaturas T y el paso de tiempo  $\Delta t$ , utilizando (6.8) y (6.15).

9) Comprobar la convergencia, y eventualmente repetir el proceso a partir de 1).

La adaptación del método BFGS al esquema de longitud de arco impuesta implica alguna modificación del procedimiento presentado en el capítulo 5. Si se adopta la forma producto de Brodlie et al. presentada en la proposición 5.7, las ecuaciones (5.52), (5.53), (5.54) y (5.55) deben alterarse ahora para tener en cuenta, en el cálculo de los vectores  $y_{i-1}$  y  $R_{i-1}$ , el desacoplamiento temporal motivado por el proceso iterativo sobre  $\Delta t$ . Las definiciones del capítulo 5 se modifican del siguiente modo:

$$w_{i-1} = \frac{s_{i-1}}{\overline{y}_{i-1}^T s_{i-1}} \tag{6.49}$$

$$v_{i-1} = R_i - \xi \overline{R}_{i-1}$$
 (6.50)

$$\xi = \left(\frac{\overline{y}_{i-1}^{T} s_{i-1}}{s_{i-1}^{T} \overline{R}_{i-1}}\right)^{1/2} \tag{6.51}$$

tomando ahora, para  $\overline{R}_{i-1}$  la expansión en serie de Taylor de primer grado:

$$\overline{R}_{i-1} = R_{i-1} + \left(\frac{\partial R}{\partial \Delta t}\right)_{i-1} \lambda_{i-1}$$
(6.52)

y, de modo coherente con (6.43):

$$\overline{y}_{i-1} = \overline{R}_{i-1} - R_i \tag{6.53}$$

Con las nuevas definiciones (6.49), (6.50) y (6.51), la forma producto del algoritmo BFGS permanece inalterada:

$$H_{i} = (I + w_{i-1}v_{i-1}^{T})H_{i-1}(I + v_{i-1}w_{i-1}^{T})$$
(6.54)

Conviene resaltar, sin embargo, que si se adopta el esquema BFGS, el vector  $\partial R_i/\partial \Delta t_i$ debe explícitamente calcularse en cada iteración para poder aplicar las fórmulas anteriores. Como hemos visto anteriormente, este inconveniente no aparece si se utiliza la fórmula de Broyden. Además, debido a la estructura de la forma producto BFGS, en la cual la matriz inicial  $H_1$  es premultiplicada y posmultiplicada por las diferentes correcciones, incluso si se mantiene fijo  $\partial R_i/\partial \Delta t_i$ , el vector que debe ser utilizado en la correspondiente etapa de sustitución no es constante, haciéndose necesarias dos sustituciones por iteración de  $H_1$  en cualquier caso. Recordemos que esto no sucede en el algoritmo de Broyden, debido a que la corrección sucesiva del vector  $H_1\partial R_i/\partial \Delta t_i$  se efectúa mediante operaciones vectoriales simples sólamente a la izquierda de  $H_1$ . De este modo, el método BFGS aparece gravemente penalizado en su adaptación al método de longitud de arco, dado que la etapa de sustitución resulta la más costosa desde el punto de vista computacional.

El análisis de las curvas de convergencia revela que, cuando se utiliza el método de longitud de arco, las primeras iteraciones no ofrecen tasas de convergencia buenas, si se toman como primeras suposiciones el campo de temperaturas al final del paso de tiempo anterior, y el propio paso de tiempo anterior. Skeie y Felippa [141] señalan que la convergencia mejora notablemente si, previamente al inicio de las iteraciones de Newton-Raphson, se realiza una predicción sobre el campo de temperaturas y sobre el tamaño del paso de tiempo. El predictor sobre T (recordemos que es la temperatura a la mitad del paso de tiempo) toma la forma:

$$T_p = T^t + 2\dot{T}_{n-1}\Delta t_{n-1} \tag{6.55}$$

donde  $T_{n-1}$  es la velocidad en el paso de tiempo anterior, y  $\Delta t_{n-1}$  es el tamaño del paso de tiempo utilizado en el paso anterior. El predictor sobre el próximo  $\Delta t$  puede calcularse aproximando al derivada del paso de tiempo con respecto al contador de pasos mediante la extrapolación:

$$\Delta t_p = 2\Delta t_{n-1} - \Delta t_{n-2} \tag{6.56}$$

Si en (6.55) se utiliza  $\Delta t_p$  en lugar de  $\Delta t_{n-1}$ , no sólo no se ha observado ninguna mejora en las tasas de convergencia, sino que en algunos casos se produce más bien un ligero deterioro de las mismas.

# 6.4 Estrategias de Selección de la Longitud de Arco y Control sobre la Integración Temporal.

Como se ha indicado más arriba, el propósito fundamental de esta metodología es minimizar el número de cálculos y factorizaciones de la matriz jacobiana, de modo que la misma matriz  $H_1$  pueda ser utilizada durante el mayor número de pasos de tiempo posible, garantizando al mismo tiempo buenas características en el proceso de convergencia del método implícito. Como el paso de tiempo ahora cambia continuamente, resulta evidente que la convergencia se hace cada vez más difícil a medida que el paso de tiempo difiere del paso de tiempo utilizado en el último cálculo de  $H_1$ . La elección de una estrategia de refactorización no es, en general, fácil. Dependiendo del número de nodos, se puede preferir realizar más factorizaciones (y, por lo tanto, menos iteraciones), o viceversa. En nuestra implementación de los algoritmos presentados más arriba, se procede al cálculo de una nueva matriz  $H_1$  actualizada si se dan una de las siguientes circunstancias:

a) Si el paso de tiempo al principio del cálculo de un nuevo paso verifica una de las dos condiciones siguientes:

$$\begin{array}{rcl} \Delta t &\geq & \nu \Delta t_{\star} \\ & o \\ \Delta t &\leq & \nu^{-1} \Delta t_{\star} \end{array}$$

$$(6.57)$$

donde  $\Delta t_{\star}$  es el paso de tiempo utilizado en el último cálculo de la matriz jacobiana, y  $\nu$  es una constante libremente prefijada por el analista ( $\nu > 1$ ). Si se prefiere privilegiar el cálculo e inversión de jacobianos, se adopta  $\nu$  próximo a la unidad, mientras que si se tiene un gran número de grados de libertad, se debe favorecer el algoritmo iterativo, haciendo  $\nu >> 1$ . En la práctica, se han utilizado valores desde 3 hasta incluso 10 con éxito.

b) Si, en cualquier momento, se detecta una divergencia en el vector  $s_i$  o sobre el escalar corrector de pasos de tiempo  $\lambda_i$ .

c) Si se han calculado NSTEPS pasos de tiempo desde la última actualización del jacobiano, siendo NSTEPS un parámetro libre fijado inicialmente por el analista.

El algoritimo de longitud de arco descrito en las secciones precedentes debe ser combinado con un mecanismo automático de selección del arco l, que variará así de un

paso de tiempo al siguiente de acuerdo con ciertas reglas. Esta estrategia de selección del arco es totalmente equivalente a la selección del paso de tiempo si se utilizan esquemas con  $\Delta t$  fijado 'a priori' antes de calcular cada paso.

La solución más sencilla sería simplemente mantener constante el parámetro l, que de alguna manera determina el volumen de estados accesibles a partir de una cierta posición de equilibrio térmico. Esta es la forma en la cual se procede en muchos casos en el análisis estructural de sólidos (ver por ejemplo Kolar y Kamel [79]). Sin embargo, la experiencia numérica en el tratamiento del problema parabólico demuestra que procediendo de este modo se obtienen tasas de cambio de  $\Delta t$  demasiado bajas para analizar problemas con varias constantes de tiempo superpuestas, que además dependen fuertemente del arco impuesto, cuya magnitud ideal es difícil de conocer 'a priori'.

Otra propuesta conceptualmente coherente sería fijar el arco como una fracción fija (y relativamente pequeña) de la norma (euclídea o máxima) del actual vector de temperaturas, haciendo:

$$l = f \|T\| (6.58)$$

siendo la fracción f inferior, en todo caso, a 0.01. Sin embargo, actuando así se pierde la medida sobre la *rigidez* efectiva del problema. Los resultados de esta técnica no han sido satisfactorios, ya que no es capaz de acelerar o reducir los pasos de tiempo de modo conveniente durante el proceso de integración temporal.

Crisfield [31] propone el uso del número de iteraciones utilizado en la resolución de un paso de tiempo dado como medida del grado de no linealidad del problema, pilotando así la longitud del arco de acuerdo con la siguiente expresión heurística:

$$l_{new} = \sqrt{\left(\frac{I_{opt}}{I_{old}}\right)} \ l_{old} \tag{6.59}$$

donde  $I_{old}$  es el número de iteraciones requerido en el paso previo, y  $I_{opt}$  es el número medio de iteraciones por paso de tiempo que se desea obtener.

Sin embargo, en nuestro caso, esta fórmula no es de aplicación, ya que, en general,  $I_{old}$  puede ser grande no sólo debido a una fuerte no linealidad local que efectivamente aconseje una limitación del arco, sino simplemente porque la calidad de la matriz iterante  $H_1$  se haya deteriorado. Esta consideración pone de manifiesto que que el costo efectivo de la solución del sistema de ecuaciones no lineales *debe* ser separado de la estrategia de selección del arco, de modo que la eventual *rigidización* del problema se refleje sobre la selección del arco indirectamente a través del análisis del error en la integración temporal.

El esquema adoptado se sirve del estimador de error de integración temporal  $E_{int}$ para definir un coeficiente de dilatación (o contracción) del arco,  $\Xi$ , cuya determinación se detalla a continuación. En primer lugar, si tras el cálculo de un paso de tiempo el criterio (6.5) no se verifica, el paso de tiempo se rechaza, multiplicándose  $\Delta t$  y l (pues ambos van estrechamente correlacionados) por un factor de reducción  $\eta$ , normalmente comprendido entre 0.2 y 0.5, y se calcula de nuevo el paso de tiempo.

Si el paso de tiempo es aceptable, el arco l se multiplica por el factor  $\Xi$ , superior a la unidad ( $1.1 \le \Xi \le 1.25$  en la práctica) y se continúa con la integración temporal.

Esta regla está en general de acuerdo con el criterio, subrayado por Winget y Hughes [170], sobre la conveniencia de aumentar lentamente el tamaño del paso de tiempo si no se detectan problemas, pero disminuirlo bruscamente si un paso de tiempo resulta inaceptable.

La experiencia numérica acumulada muestra, sin embargo, que el mantenimiento de un  $\Xi$  constante conduce demasiado frecuentemente a pasos de tiempo inaceptables, que provocan una disminución del paso de tiempo y una pérdida de eficacia en términos de periodo de tiempo analizado para un número de pasos de tiempo determinado.

La tasa de crecimiento del arco debería ser limitada cuando el error de integración alcanza un valor cercano a  $\epsilon_{int}$ , con el fin de limitar el número de pasos de tiempo rechazados y estabilizar el error de integración en torno a un valor fijo convenido. Para esto, se escoge una fracción  $\mu$  de la tolerancia  $\epsilon_{int}$  (0.25  $\leq \mu \leq$  0.75 normalmente), en torno a la cual se desea estabilizar el error de integración temporal, y se aplican las siguientes reglas para determinar la tasa de cambio del arco  $\Xi$ :

a) Si  $E_{int} \leq 0.1\epsilon_{int}$ , se tiene una integración 'demasiado buena'. La tasa de crecimiento del arco se hace igual al  $\Xi$  original.

b) Si  $0.1\epsilon_{int} \leq E_{int} \leq \mu\epsilon_{int}$ , la tasa de crecimiento del arco se interpola linealmente entre  $\Xi$  y 1 en el rango  $(0.1\epsilon_{int}, \mu\epsilon_{int})$ .

c) Si  $\mu \epsilon_{int} \leq E_{int} \leq \epsilon_{int}$ , el arco se multiplica por un factor interpolado linealmente entre 1 y  $\eta$  en el rango ( $\mu \epsilon_{int}, \epsilon_{int}$ ).



Figura 6.4: Modificación de la longitud del arco en función del error de integración temporal.

El esquema general de obtención de  $\Xi$  en función del error  $E_{int}$  se muestra en la figura 6.4.

Esta estrategia proporciona el efecto de realimentación necesario sobre el arco necesario para mantener el error  $E_{int}$  alrededor del valor óptimo  $\mu \epsilon_{int}$ , de modo que se rechazan pasos de tiempo sólamente en condiciones muy severas, tales como un cambio brusco en las condiciones de contorno o en las tasas de generación térmica por unidad de volumen.

El cálculo del primer paso de tiempo representa un caso particular, ya que deben ser especificados tanto el paso de tiempo inicial como el arco inicial. Como la correlación entre ambos es difícil de establecer de antemano, parece juicioso calcular el primer paso de tiempo con un esquema a  $\Delta t$  constante, obtener el arco de trayectoria descrito por la solución durante este paso de tiempo y utilizarlo, convenientemente modificado de acuerdo con las reglas presentadas en los párrafos anteriores, que son capaces de modificar de esta manera el paso de tiempo inicial  $\Delta t_0$ , acortándolo o alargándolo según convenga.

El principal problema asociado a la metodología de longitud de arco implementada de esta forma reside en la solución de la ecuación cuadrática en  $\lambda_i$ . Un discriminante negativo en esta ecuación indica claramente que el algoritmo no es capaz de encontrar una posición de equilibrio térmico sobre la superficie de limitación de estados. Las razones de esto pueden ser dos:

a) La correlación que liga el arco l y el paso de tiempo  $\Delta t$  en su progresión durante la integración temporal se ha perdido.

b) El transitorio térmico ha alcanzado un estado cuasi-permanente.

El primer caso tiene como consecuencia inmediata en la mayoría de los casos una divergencia en  $\lambda_i$ , y aparece frecuentemente cuando hay cambios bruscos en las condiciones de contorno o en las tasas de generación térmica volumétrica. Esta complicación se resuelve pasando momentáneamente a un esquema de integración con  $\Delta t$  fijo para restaurar la relación entre l y  $\Delta t$ , como si de un paso inicial se tratase.

El segundo caso es más difícil de detectar, aunque se revela generalmente a través de dos indicadores:  $\|\dot{T}\|$  tiende a cero y  $\Delta t$  tiende a infinito. En este caso, naturalmente, la simulación numérica se detiene.

# Capítulo 7 Experimentación Numérica.

En este capítulo se presentan los resultados de algunos casos de prueba desarrollados para evaluar comparativamente los métodos elegidos para la solución del problema estudiado. En primer lugar se analizan varios problemas de régimen permanente. Posteriormente se analizan las prestaciones de los diversos algoritmos comparados para el caso transitorio, con pasos de tiempo constantes o variables, en este último caso fijados mediante un criterio de variación seleccionado a priori por el analista. En la tercera sección se estudia la eficacia del método de longitud de arco impuesta presentado en el capítulo precedente combinado con el algoritmo de Broyden como método automático de selección del paso de tiempo.

#### 7.1 Problemas en Régimen Permanente.

Problema 1

En este problema se analizan no linealidades estrictamente ligadas a conductividades térmicas dependientes de la temperatura. Una barra de 1 m longitud y 0.1 m de anchura posee una conductividad térmica dada por k = 1 + 2T. El extremo derecho de la barra se mantiene a una temperatura  $T_d = 0$ , mientras que su lado izquierdo se mantiene a  $T_i = 1$ . Las caras superior e inferior se suponen adiabáticas. La barra se dividió en 160 elementos triangulares, tal y como muestra la figura 7.1.

Se realizaron ocho cálculos, todos y cada uno de ellos partiendo de una suposición inicial sobre el campo de temperaturas correspondiente a una temperatura uniforme de valor T = 0.5.


Figura 7.1: Problema 1. Malla de elementos finitos.

En primer lugar se ensayaron métodos que requieren la factorización de la matriz jacobiana en cada iteración, es decir los métodos de iteración directa (ID) y de Newton-Raphson completo (NR). Sucesivamente se probaron los métodos de Newton-Raphson modificado, de Broyden y los algoritmos BFGS1 y BFGS2 presentados anteriormente, con una única factorización inicial del jacobiano. Ulteriormente se aumentó la calidad del jacobiano de iteración realizando dos iteraciones iniciales de Newton-Raphson completas, y continuando con el método NRM y los dos algoritmos QN analizados. En el primer caso, la distribución de temperaturas con la cual se calcula el jacobiano es uniforme, en el segundo resulta lineal.

Las curvas de convergencia correspondientes a estos cálculos se muestran en la figura 7.2, en representación logarítmica. El único criterio de convergencia adoptado se fundamenta en la ecuación 5.93, con  $\varepsilon_1 = 5 \times 10^{-8}$ , con el fin de analizar con detalle todo el proceso de convergencia, manteniendonos todavía lejanos del ruido numérico del ordenador.

La curva de convergencia correspondiente al método de Newton-Raphson completo exhibe su típica forma parabólica, correspondiente a una tasa de convergencia



iteration number

Figura 7.2: Problema 1. Curvas de convergencia.

cuadrática. La coincidencia entre las dos formulaciones del método BFGS es total y las curvas correspondientes se superponen. Por otra parte, debe señalarse que en este caso los métodos QN convergen más rápidamente que el método de iteración directa sólo con dos factorizaciones LU iniciales, caso en el cual se puede apreciar la convergencia superlineal de los métodos a través de la forma 'quasi-parabólica' de las curvas de convergencia correspondientes.

Cuando se realiza un único cálculo de la matriz jacobiana, el método de Broyden muestra una eficacia ligeramente superior, y la curva BFGS excede incluso a la curva NRM durante un cierto rango. La razón de este fenómeno se puede buscar en la desventaja intrínseca del método BFGS, que garantiza convergencia superlineal sólo si algún tipo de suboptimización se lleva a cabo.

Para mostrar la fuerte dependencia que liga las tasas de convergencia y la calidad del jacobiano inicial (este problema presenta un acusado carácter no lineal, pues la norma de la matriz jacobiana es 3 veces superior a la norma de la matriz de conductividad), se adoptó como suposición inicial un campo de temperaturas uniforme de valor T = 0. En esta situación, y con una sóla factorización inicial, el método de Newton-Raphson



Figura 7.3: Problema 1. Solución: campo de temperaturas.

modificado diverge casi inmediatamente, y los dos algoritmos QN necesitaron 21 iteraciones para alcanzar la convergencia. La solución numérica, que coincide exactamente con la analítica (ver Carslaw y Jaeger [18]) se presenta en la figura 7.3.

A continuación se presentan dos problemas que serán más tarde analizados en régimen transitorio. El primero de ellos es puramente académico y sirve para comparar los métodos quasi-Newton con sus homólogos Newton-Secante, con no linealidades conductivas y radiativas.

#### <u>Problema 2</u>

Se analiza un problema mixto conducción-radiación parecido al anterior. La malla de elementos finitos se muestra en la figura 7.4. El modelo involucra 412 nodos y 644 elementos. El lado del cuadrado exterior es 1 m y el radio de la cavidad interna es 0.45 m. La conductividad térmica del material es  $k = 2 + 0.01T Wm^{-2}.^{\circ}K^{-1}$ , donde T se expresa en grados Kelvin. Sobre la cara superior se aplica un flujo térmico constante de valor 30000  $Wm^{-2}$ , la cara inferior se mantiene a una temperatura constante de  $273^{\circ}K$ , mientras que las dos caras laterales están térmicamente aisladas. Una genera-



Figura 7.4: Problema 2. Malla de elementos finitos.

ción térmica volumétrica constante de valor  $g = 2500 Wm^{-3}$  se aplica a todo el sólido. Como criterio de convergencia se adopta  $\varepsilon_1 = 10^{-6}$ .

Para la resolución de este problema se parte de un campo de temperaturas uniforme de valor  $T = 1000 \,^{\circ}K$ . El problema se ha resuelto utilizando los algoritmos NR, NRM, Broyden, BFGS, Broyden-secante y BFGS-secante en sus formatos estándar. La figura 7.5 muestra las curvas de convergencia obtenidas en todos estos cálculos. La conclusión fundamental que se puede extraer de esta prueba es que la aproximación Newton-Secante no introduce variaciones notables en la eficiencia de los respectivos algoritmos QN, aunque naturalmente se aprecia una ligera pérdida de eficacia. La tabla 7.1 resume el número de iteraciones requeridas en cada cálculo. En cualquier caso, todos los métodos se comparan muy favorablemente con el clásico método de Newton-Raphson modificado.

El campo de temperaturas obtenido se muestra en la figura 7.6 en representación tridimensional. La temperatura alcanza un valor máximo de 1520.4  $^{o}K$ .

#### Problema 3

Por último se presenta un análisis de los diversos métodos sobre una aplicación en el

Tabla7.1: Problema 2. Comparación de los diferentes métodos.

método	NR	NRM	Broyden	BFGS	BS	BFGSS
iteraciones	6	20	10	12	12	11



Figura7.5: Problema 2. Curvas de convergencia.



Figura 7.6: Problema 2. Campo de temperaturas en régimen permanente.

dominio de la tecnología de reactores de fusión. Se ha escogido un caso típico de los estudiados en el capítulo 9 de esta memoria, adonde se remite al lector para conocimiento de características materiales, cargas térmicas y demás detalles. Limitémonos aquí a señalar que la malla de elementos finitos mostrada en la figura 7.7 representa la sección transversal de la placa divertora de un reactor de fusión por confinamiento magnético. Un intenso flujo térmico  $(10 MWm^{-2})$  llega al componente por su parte superior. La energía se transmite a los dos tubos refrigerantes, por los cuales circula agua a presión a 333°K. La deposición volumétrica de calor en el grafito es  $g = 9 MWm^{-3}$ , siendo por otra parte  $g = 12 MWm^{-3}$  en el resto de los materiales. El calor se transmite por radiación a través del hueco entre la matriz de grafito y el soporte de acero inoxidable, así como en las cavidades EFGHIJKLMNOE y PQRSP. Las emisividades utilizadas fueron 0.95 para el grafito y 0.5 para el resto de los materiales. La cara inferior AB se mantiene a una temperatura constante de valor 373°K.

El campo de temperaturas en régimen permanente se muestra en la figura 7.8. El punto más cargado de la matriz de grafito alcanza una temperatura de  $\sim 1300 \, {}^{o}K$ . La figura 7.9 muestra las tasas de convergencia para los diversos métodos comparados en



Figura 7.7: Problema 3. Malla de elementos finitos.

método	ID	NR	NRM	Broyden	BFGS
iteraciones	17	5	-	9	9
tiempo CPU	65 m 59 s	21 m 29 s	10 m 14 s	6 m 31 s	6 m 49 s

Tabla7.2: Problema 3. Iteraciones y tiempos de cálculo.

este estudio, con excepción de los algoritmos Newton-Secante. La suposición inicial de temperaturas fué una distribución uniforme  $T = 373 \,^{\circ}K$ , relativamente más lejana a la solución que en los problemas presentados anteriormente. De todos los algoritmos analizados, sólo el método de Newton-Raphson modificado no pudo alcanzar la convergencia, debido probablemente a la mala calidad de la suposición inicial sobre la temperatura. La tabla 7.2 recoge, además del número de iteraciones necesario en cada caso, el tiempo de cálculo total requerido. Las ventajas de los algoritmos QN aparecen una vez más confirmadas. Debe tenerse en cuenta que los tiempos de CPU recogidos en esta tabla incluyen en todos los casos el cálculo de las matrices de factores de vista, de modo que la ventaja intrínseca de la metodología QN es ligeramente superior de cuanto estas cifras indican.



Figura 7.8: Problema 3. Campo de temperatura en régimen permanente.



iteration number

Figura 7.9: Problema 3. Curvas de convergencia.

## 7.2 Problemas en Régimen Transitorio.

En las pruebas que se presentan a continuación se pondrá de manifiesto que las ventajas de la utilización de los algoritmos de la familia QN - SN son todavía más relevantes cuando se estudia la ecuación parabólica de difusión-transporte del calor en régimen transitorio. En este caso se dispone a cada paso de tiempo de una distribución de temperaturas relativamente próxima a la solución de equilibrio, que es simplemente la correspondiente al final del paso de tiempo anterior. Por otra parte, desde el punto de vista de la eficacia computacional, no se deberían permitir más de una factorización por paso de tiempo (más adelante veremos que incluso este costo numérico puede ser notablemente abaratado), de modo que se comparan sólamente algoritmos QN y SN con el método estándar de Newton-Raphson modificado.

#### Problema 4

Comencemos con un problema puramente conductivo, estudiado precedentemente por Orivuori [100] y otros autores, y del cual se conoce la solución analítica (Carslaw y Jaeger [18]). Una barra de 3 m de longitud y 0.2 m de anchura está completamente aislada térmicamente y su temperatura inicial es uniforme e igual a 0 (figura 7.10).

Al instante t = 0 s se aplica al extremo derecho de la barra un flujo de calor  $q = 1 Wm^{-2}$  que se mantiene constante en el tiempo. La conductividad térmica del material es  $k = 1 + 0.5T Wm^{-2} \cdot K^{-1}$ , su densidad es  $\rho = 1 Kgm^{-3}$  y su capacidad térmica viene dada por  $C_p = 1 + 0.5T JKg^{-1} \cdot K^{-1}$ . La discretización espacial se llevó a cabo mediante 120 elementos triangulares, con 93 nodos en total. El problema se resolvió inicialmente utilizando un paso de tiempo  $\Delta t = 0.05 s$  para analizar los primeros 0.8 s del transitorio, mediante 16 pasos de tiempo. El criterio de convergencia es  $\varepsilon_1 = 5 \times 10^{-8}$ .

Para ahorrar cálculos y factorizaciones de la matriz jacobiana, mantendremos constante la factorización LU durante un cierto número de pasos de tiempo, refrescando la matriz sólo si se supera un cierto número máximo de iteraciones (por ejemplo, 25), o si se alcanza el número de pasos de tiempo con la misma matriz previsto a priori. Se pretende así realizar un estudio de la sensibilidad de los diferentes métodos a la calidad de la matriz de precondicionamiento. La tabla 7.3 presenta de modo resumido los resultados que se han obtenido cambiando la frecuencia de actualización del jacobiano.



Figura7.10: Problema 4. Malla de elementos finitos.



Figura 7.11: Problema 4. Evolución de la temperatura en el extremo térmicamente cargado.



#### iteration number



De estos resultados se colige que los dos métodos QN son menos sensibles a la calidad de la matriz jacobiana. De la columna 1 a la 4, el número de iteraciones QN se multiplica aproximadamente por un factor 2, mientras que el número de iteraciones NRM se multiplica aproximadamente por 3.

El mismo problema fué posteriormente analizado utilizando 32 pasos de tiempo con  $\Delta t = 0.025 s$ . Los resultados se resumen en la tabla 7.4.

La temperatura obtenida en el extremo de la barra donde se aplica la carga térmica con los dos cálculos precedentes se representa en la figura 7.11, así como la solución

	factoriza cada	factoriza cada	factoriza cada	factoriza cada
método	paso	4 pasos	8 pasos	16 pasos
NRM	87	111	146	224
Broyden	72	91	107	136
BFGS	76	93	109	140
factorizaciones	16	4	2	1

	factoriza cada	factoriza cada	factoriza cada	factoriza cada
método	paso	4 pasos	16 pasos	32 pasos
NRM	146	178	281	430
Broyden	134	155	210	264
BFGS	136	157	210	276
factorizaciones	32	8	2	1

Tabla7.4: Problema 4. Iteraciones con  $\Delta t = 0.025$ .

análitica [18]. La eficacia de la metodología QN puede evidenciarse si se considera que la obtención de la curva con  $\Delta t = 0.025 s$  mediante el algoritmo de Broyden y una única factorización inicial (264 iteraciones en total) requiere aproximadamente el mismo esfuerzo computacional que el cálculo de la curva con  $\Delta t = 0.05 s$  con el algoritmo NRM con una sóla factorización inicial (224 iteraciones).

Las curvas de convergencia que se muestran en la figura 7.12 corresponden al caso de factorización única con 32 pasos de tiempo, para el primer paso de tiempo y para el último. Puede apreciarse que el cambio de la pendiente de la curva NRM entre los dos pasos de tiempo es mucho más acusado que el correspondiente a las curvas QN. El algoritmo de Broyden exhibe un descenso ligeramente más regular que BFGS, especialmente cuando la convergencia es más difícil (en el paso de tiempo 32).

#### Problema 5

Si el problema analizado anteriormente representaba un caso de *rigidización numérica*, ya que la conductividad térmica se incrementaba considerablemente durante el transitorio, se presenta ahora un problema con características opuestas, en el cual la conductividad global tiende a disminuir hasta que se alcanza un estado estacionario.

Dos placas infinitas con una conductividad térmica extremadamente alta  $(k = 30000 Wm^{-2}.^{\circ}K^{-1})$ , emisividad 0.9 y capacidad térmica  $\rho C_p = 10000 Jm^{-3}$  se encuentran enfrentadas al instante t = 0, con temperaturas iniciales de  $1200^{\circ}K$  y  $300^{\circ}K$ , respectivamente. La discretización espacial se llevó a cabo dividiendo cada placa en 20 elementos triangulares, tal y como se muestra en la figura 7.13.

La radiación a través del hueco entre ambas placas equilibra energéticamente el sistema, haciendo converger asintóticamente la temperatura a  $750 \,{}^{o}K$ . La solución analítica se puede obtener si se adopta como válida la hipótesis de temperatura uni-



Figura7.13: Problema 5. Malla de elementos finitos.

forme en ambas placas durante todo el transitorio, lo cual es cierto debido a la elevada conductividad térmica del material. La solución numérica obtenida con un paso de tiempo  $\Delta t = 0.5 s$  se confunde con la expresión analítica para la temperatura, que es una combinación lineal de funciones logarítmicas que dependen de las condiciones iniciales. En la figura 7.14 se representa gráficamente la evolución térmica de la placa fría durante los primeros 5 s del transitorio. El criterio de convergencia utilizado es el mismo que en el problema anterior. La tabla 7.5 recoge las estadísticas sobre cada uno de los diferentes algoritmos utilizados en la resolución de este problema.

Posteriormente se repieron los análisis utilizando 20 pasos de 0.25 s cada uno. Los resultados se presentan en la tabla 7:6.

Los dos algoritmos BFGS requirieron en todas las ocasiones el mismo número de iteraciones para alcanzar la convergencia. Si se comparan los resultados de la tablas 7.5 y 7.6, la conclusión que se extrae es que el uso de los métodos QN permite pasos de tiempo más pequeños sin encarecer el cálculo en comparación con el método de Newton-Raphson modificado.

Es interesante hacer notar que los métodos quasi-Newton exhiben una indepen-



Figura 7.14: Problema 5. Evolución de la temperatura en la placa fría.

	factoriza cada	factoriza cada	factoriza cada
método	paso	5 pasos	10 pasos
NRM	44	60	76
Broyden	40	40	40
BFGS	40	44	49
factorizaciones	10	2	1

Tabla7.5: Problema 5. Iteraciones con  $\Delta t = 0.5$ .

Tabla7.6: Problema 5. Iteraciones con  $\Delta t = 0.25$ .

[	factoriza cada	factoriza cada	factoriza cada	factoriza cada
método	paso	5 pasos	10 pasos	20 pasos
NRM	74	91	106	132
Broyden	71	76	80	80
BFGS	73	79	80	80
factorizaciones	20	4	2	1

dencia asintótica del número de factorizaciones realizadas para actualizar la matriz iterante, de modo que si la matriz es de mala calidad (como en las últimas columnas de las tablas precedentes), el número de iteraciones es casi independiente del hecho de refrescar o no el jacobiano.

#### Problema 6

Se analiza ahora un problema en régimen transitorio que corresponde a la geometría y propiedades materiales descritas anteriormente en el problema 2. Tomando como condición inicial el campo de temperaturas obtenido entonces, interesa la evolución térmica del sólido cuando en el instante t = 0 s, las condiciones de contorno que determinaban el equilibrio térmico se modifica bruscamente como sigue (ver figura 7.4):

- El contorno derecho se expone a una condición de contorno de radiación sobre un cuerpo negro a temperatura constante de  $273 \,{}^{o}K$ , suponiéndose una emisividad del material de 0.1.

- El contorno inferior se mantiene a temperatura constante  $T = 273 \,^{\circ}K$ .

- El contorno izquierdo permanece adiabático.

- El contorno superior se carga con un flujo térmico dependiente del tiempo, tal y como se muestra en la figura 7.15.

La generación térmica volumétrica permanece igual a su valor en régimen permanente  $(g = 2500 Wm^{-3})$ . El período de tiempo de interés es el intervalo  $0 \le t \le 0.2 s$ , que se analiza mediante 20 pasos de tiempo iguales con  $\Delta t = 0.01 s$ . El propósito de este ejercicio fué comparar las prestaciones de los métodos Newton-Secante con las de sus homólogos QN. El criterio de convergencia es el mismo que en el problema 2. La tabla 7.7 resume los resultados obtenidos mediante los algoritmos NRM, Broyden, Broyden-Secante, BFGS y BFGS-Secante con un único e inicial cálculo de la matriz jacobiana en el primer paso de tiempo. Se presenta el número total de iteraciones para el estudio de todo el transitorio.

En este caso los dos métodos BFGS son ligeramente más eficientes. Por otra parte, no se aprecian diferencias significativas en la tasa de convergencia debido a la aproximación secante. Si el criterio de convergencia utilizado hubiese sido más exigente, cabría esperar para los algoritmos secantes un número de iteraciones ligeramente superior al correspondiente a sus respectivas versiones QN. La figura 7.16 muestra la evolución del



Figura 7.15: Problema 6. Carga térmica sobre el contorno superior (figura 7.4).

Tabla (. 1: Problema 6: Comparación de los diferentes metodos.						
método	NRM	Broyden	Broyden-S	BFGS	BFGS-S	
iteraciones	110	93	93	91	91	

campo de temperaturas mediante algunos mapas de isotermas en instantes seleccionados.

#### Problema 7

En este ejemplo se intenta estudiar la sensibilidad de los diferentes métodos objeto de análisis a variaciones sobre el paso de tiempo utilizado, en el marco de un caso práctico. Más concretamente se pretende ver cómo se comporta un determinado método iterativo en un paso de tiempo determinado, cuando el paso de tiempo actual no es igual al paso de tiempo con el cual se calculó y factorizó la matriz jacobiana que precondiciona el proceso iterativo.

Por la particular estructura de las ecuaciones matriciales no lineales analizadas, se comprende que el paso de tiempo es un parámetro crítico en la formulación de la matriz iterante. Se pretende pues estimar cuáles son los órdenes de magnitud aceptables de la diferencia entre el paso de tiempo usado en la matriz iterante y el utilizado en el cálculo efectivo del residuo para asegurar tasas de convergencia computacionalmente económicas.

El ejemplo que se estudia corresponde a un transitorio accidental en la placa divertora de un reactor de fusión (ver en el capítulo 9 la descripción detallada de la secuencia accidental). El caso corresponde al estudio en régimen permanente presentado en el problema 4. Se analiza el transitorio a partir del campo de temperaturas calculado con las condiciones de contorno y de generación térmica descritas más arriba. Las condiciones de contorno se modifican en el instante t = 0 s (ver figura 7.7). El refrigerante desaparece instantáneamente en los dos tubos, y el único mecanismo de transporte de calor dentro de ellos es la radiación térmica. El flujo térmico en el contorno superior desaparece, y se supone que esta superficie es libre de irradiar calor sobre un cuerpo negro a 373°K. Las demás condiciones de contorno permanecen invariables.

Se utilizaron en el análisis 40 pasos de tiempo, divididos de 8 series dentro de cada una de las cuales  $\Delta t$  se mantuvo constante. Los valores del paso de tiempo correspondientes fueron 0.005 s, 0.01 s, 0.05 s, 0.1 s, 0.5 s, 1 s, 5 s, y 10 s. La señal de cálculo y factorización de una nueva matriz jacobiana se activó en este caso cuando la diferencia entre el paso de tiempo usado en la última factorización y el paso de tiempo actual fuera superior al 100 % (o, por supuesto, en el caso de detectar dificultades en la convergencia). Como este último presupuesto no se verificó en ningún caso (se



Figura 7.16: Problema 6. Evolución del campo de temperaturas.

método	NRM	Broyden	BFGS
iteraciones	279	167	188
tiempo CPU	2 h 30 m	1 h 46 m	1 h 50 m

Tabla7.8: Problema 7. Comparación de los diferentes métodos.

utilizaron simultáneamente las ecuaciones 5.93 y 5.95, con  $\varepsilon_1 = 10^{-3}$  y  $\varepsilon_2 = 10^{-2}$ ), el número de factorizaciones fué 4 en los tres cálculos realizados (en los pasos de tiempo 1, 10, 20 y 30). En la tabla 7.8 se presenta el número total de iteraciones requerido para analizar los 40 pasos de tiempo utilizando los algoritmos MNR, Broyden y BFGS, así como el tiempo total de cálculo en cada uno de los casos. Como antes se señaló en el problema 4, debe hacerse notar que en este caso hay presentes 4 cavidades en el modelo, y el cálculo de factores de forma requiere un tiempo de cálculo significativo, igual en todos los casos, pero que no se tiene en cuenta en los resultados que se presentan aunque su consideración haría la comparación todavía más favorable los métodos QN.

Estos resultados hablan por sí mismos. El método de Newton-Raphson modificado resulta mucho más sensible al cambio de paso de tiempo sin actualización de la matriz de precondicionamiento que los otros dos esquemas. Con matriz 'fresca' (es decir en los pasos 1 a 5, 11 a 15, 21 a 25, y 31 a 35), los tres métodos convergieron en alrededor de 3 iteraciones, pero en los pasos de tiempo 'difíciles', los algoritmos de Broyden y BFGS invirtieron  $\sim 5$  y  $\sim 6$  iteraciones respectivamente en alcanzar la convergencia, mientras que el número medio de iteraciones del método NRM en estos fué de 12. En la figura 7.17 se muestra el campo de temperaturas en 4 instantes de tiempo seleccionados.

De acuerdo con estos resultados, sólo la metodología QN-SN se muestra como firme candidata para un eventual acoplamiento con algoritmos de integración temporal con paso de tiempo variable. Este punto se desarrolla en la siguiente sección.



•

Figura 7.17: Problema 7. Evolución del campo de temperaturas.



# 7.3 Análisis del Método de Longitud de Arco.

En esta sección se resuelven algunos casos de prueba mediante el método de ajuste automático de paso de tiempo, basado en el algoritmo de longitud de arco impuesta en combinación con el método de Broyden descritos en el capítulo 6.

### <u>Problema 8</u>

Como introducción, y para poner de manifiesto las ventajas de un control del transitorio mediante longitud de arco impuesta frente al control a paso de tiempo impuesto, se analiza un problema muy similar a otro tratado por Winget y Hughes [170]. La modificación principal ha consistido en dar a los materiales involucrados propiedades térmicas fuertemente dependientes de la temperatura, con la finalidad de acentuar la dificultad del problema en su vertiente no lineal. Se analiza la porción de aislante térmico representada en la malla de elementos finitos de la figura 7.18.

El rectángulo ABCD está compuesto de un material con las siguientes propiedades:  $C_p = 0.02 \ W/Kg/^{O}K$ , densidad unitaria y  $k = 0.002 + 4 \times 10^{-6}T \ W/m/^{O}K$ . El rectángulo AEFG, por su parte, tiene  $C_p = 8.11 \times 10^{-4} \ W/Kg/^{O}K$ , densidad igualmente unitaria y  $k = 1.57 + 4 \times 10^{-9}T W/m/^{O}K$ . La longitud AD es de 1*m*. Además del carácter no lineal de los materiales, la segunda dificultad de este problema es la extrema *rigidez* del sistema de ecuaciones asociado (téngase presente que la razón entre las distintas difusividades térmicas es del orden de 50). Un método puramente explícito requeriría realizar la integración temporal con el paso de tiempo crítico correspondiente a la malla del material metálico ABCD, que resulta del orden de 0.01 *s*, utilizando por lo tanto varios centenares de pasos de tiempo para llevar a cabo el análisis.

Sobre este ejemplo, se han realizado dos análisis típicos, controlados por condiciones de contorno de Dirichlet (cálculo A), y de Neumann (cálculo B), respectivamente. En ambos casos compararemos las prestaciones de el método de longitud de arco con restricción esférica, el mismo método con restricción elipsoidal (con relación de semiejes 2 : 1) y el método de ajuste automático de paso de tiempo propuesto por Winget y Hughes, que resumimos a continuación.

A partir de una medida del error de integración  $E_{int}$  (basada, como se vió en el capítulo anterior sobre el residuo al final del paso de tiempo), de una tolerancia máxima para este error  $\epsilon_{int}$  y de una fracción óptima de la tolerancia  $\mu \simeq 0.25$  en torno a la cual estabilizar la integración numérica, los citados autores proponen el siguiente método de control del paso de tiempo:

a) Si  $E_{int} > \epsilon_{int}$ , el paso de tiempo es rechazado, se multiplica  $\Delta t$  por un coeficiente  $\eta < 1$  análogo a nuestro coeficiente de reducción del arco.

b) Si  $\mu \epsilon_{int} < E_{int} \leq \epsilon_{int}$ , la solución es aceptable y se continua la integración temporal con el mismo paso de tiempo.

c) Si  $\mu \epsilon_{int} \geq E_{int}$  durante  $N_1$  pasos de tiempo, entonces la solución es 'demasiado' exacta. Se sustituye el paso de tiempo actual  $\Delta t$  por  $\xi_1 \Delta t$  ( $\xi_1 > 1$ ). Esta tasa de crecimiento del paso de tiempo es análoga a la tasa de crecimiento del arco  $\Xi$  propuesta en el capítulo 6.

d) Si el punto c) se debe repetir más de  $N_2$  veces, entonces la tasa de crecimiento del paso de tiempo no es lo suficientemente grande. Se sustituye entonces  $\xi_1$  por  $\xi_1\xi_2$ , y  $\Delta t$  por  $\xi_2\Delta t$ , y se continua el proceso de integración temporal, siendo naturalmente  $\xi_2 > 1$ .

e) Adicionalmente, se pueden introducir los valores máximo y mínimo admisibles para  $\Delta t$ .

#### <u>Caso A</u>

El cuerpo se halla inicialmente a una temperatura uniforme de  $100^{\circ}K$ . En el instante inicial, el lado CD adquiere una temperatura de  $273^{\circ}K$ , manteniéndose fija en su valor inicial sobre el lado GF y siendo el resto del contorno adiabático.

Se escoge el siguiente conjunto de parámetros de control: fracción óptima del error de integración temporal  $\mu = 0.25$ , error de integración temporal sobre el residuo al final del paso de tiempo  $\epsilon_{int} = 10^{-2}$ , tasa inicial de crecimiento del arco  $\Xi = 1.2$ , factor de reducción del arco en caso de paso de tiempo rechazado  $\eta = 0.3$ , factor de refactorización de la matriz jacobiana  $\nu = 4$ , y paso de tiempo inicial  $\Delta t_0 = 0.001s$ . Como criterios de convergencia se tomaron  $\varepsilon_1 = 10^{-3}$ , y  $\varepsilon_2 = 10^{-2}$ .

Para la aplicación del método de control sobre el paso de tiempo de Winget y Hughes, se adoptaron valores análogos para no privilegiar un método sobre otro, tomándose  $\xi_1 = 1.2, \xi_2 = 1.1, y N_1 = N_2 = 3.$ 

El régimen permanente se alcanza en la parte inferior al cabo de unos 10 s y en la parte superior en unos 200 s. De este modo, se interrumpe el cálculo tras 50 pasos de cálculo o cuando se haya llegado a un tiempo t > 200 s. Este carácter rígido del problema se aprecia en la figura 7.19, donde se muestra, con escala logarítmica sobre el tiempo, la evolución de la temperatura en los puntos P ( $\Box$ ), Q ( $\Delta$ ) y R (\*).

Las figuras 7.20 y 7.21 resumen el comportamiento de los tres métodos que se comparan (método de Winget y Hughes =  $\triangle$ , método N-esférico =  $\Box$ , método Nelipsoidal = \*). En la primera de ellas se muestra la evolución del error de integración temporal en función del contador de pasos de tiempo, mientras que en la segunda se muestra la evolución del paso de tiempo utilizado.

De la observación de estas figuras se concluye que los métodos de arco conducen mucho más rápidamente el error de integración cometido hacia el valor óptimo deseado, adaptando el paso de tiempo con mayor flexibilidad (nótese que el error de integración con los métodos de arco yace en la década deseada a partir de los primeros 6 o 7 pasos, mientras que con el método de control sobre  $\Delta t$  entra en esa zona sólo a partir del paso 35). El error aumenta en los últimos pasos de tiempo debido al crecimiento del paso de tiempo. Además, puede apreciarse como a medida que se alcanza el régimen permanente, el algoritmo de longitud de arco 'busca' errores ligeramente superiores a  $\mu \epsilon_{int}$  para disminuir el arco, haciéndole tender a cero, a la vez que estabiliza el paso de



Figura 7.19: Problema 8 (A). Evolución de la temperatura en algunos nodos seleccionados.



Figura7.20: Problema 8 (A). Evolución del paso de tiempo.



Figura 7.21: Problema 8 (A). Error de integración temporal.

tiempo en torno a un valor más o menos constante. El caso N-elipsoidal naturalmente proporciona pasos de tiempo mayores, pero tiene un comportamiento ligeramente más irregular que el caso N-esférico, habiéndo sido necesario rechazar 3 pasos de tiempo por violación del criterio de exactitud en la integración temporal, mientras que esta circunstancia no se presentó con el método N-esférico. El periodo de tiempo considerado (200 s) fué analizado mediante el método N-esférico en 49 pasos, y en 43 pasos por el método N-elipsoidal. Estos resultados muestran la mayor adaptabilidad del método propuesto, sobre todo si se tiene en cuenta que el algoritmo de control sobre  $\Delta t$  sólo alcanzó un tiempo final de 5.4 s en 50 pasos de tiempo.

El esfuerzo computacional es, obviamente, superior en el análisis mediante el método de longitud de arco, ya que la variación del paso de tiempo utilizado es superior (nótese que  $\Delta t$  recorre 5 décadas). El caso N-esférico requirió 10 factorizaciones de la matriz jacobiana y 255 iteraciones de Broyden, el caso N-elipsoidal 11 factorizaciones y 203 iteraciones, mientras que el método de control sobre  $\Delta t$  necesitó 5 factorizaciones y 174 iteraciones.

#### <u>Caso B</u>

Este ejemplo, con las mismas condiciones iniciales que el anterior, se usa para estudiar un transitorio controlado por condiciones de contorno de Neumann. A partir del instante inicial, sobre el lado CD se aplica un flujo térmico constante de valor  $q = 1 W/m^2$ , manteniéndose fija la temperatura en su valor inicial sobre el lado GF y siendo el resto del contorno adiabático. Se pretende analizar el periodo  $0 \le t \le 20s$ . En este problema, además de la rigidez asociada a la diferencia de constantes de tiempo, el comportamiento no lineal del material aislante es más acusado, ya que, por ejemplo, su conductividad térmica pasa de un valor  $0.0024 W/m/^{0}K$  a  $100 \ ^{0}K$  hasta  $0.006 W/m/^{0}K$ a  $1000 \ ^{0}K$ . Se adopta el mismo conjunto de parámetros de control que en el caso A, para los tres métodos comparados, excepto el criterio de exactitud de integración temporal que se reduce a  $\epsilon_{int} = 10^{-3}$  debido a la mayor severidad de las excursiones térmicas de este caso.

La figura 7.22 muestra la evolución de la temperatura sobre la línea GBC durante el transitorio, a intervalos espaciados aproximadamente 1 s.

Las prestaciones de los tres métodos considerados se comparan en las figuras 7.23 y 7.24, que muestran respectivamente el error en la integración temporal y el paso de tiempo utilizado en función del contador de pasos, para el método de control sobre  $\Delta t$  ( $\Delta$ ), el método de control esférico sobre el arco ( $\Box$ ) y el método de control elipsoidal sobre el arco (\*). De nuevo se observa que el método de control sobre el paso de tiempo produce errores más dispersos, mientras que el error obtenido con el método de control o de control sobre el arco de control sobre el arco se ciñe más estrechamente sobre la franja en torno al valor óptimo prefijado. Además, los pasos de tiempo obtenidos con este último método tardan más en adaptarse a la realimentación que proporciona la información sobre el análisis a posteriori del error de integración.

El periodo de tiempo considerado fué analizado, mediante el método de control sobre  $\Delta t$ , en 96 pasos de tiempo, con un número total de iteraciones de Broyden de 328 y 5 factorizaciones de la matriz jacobiana. El método de control esférico sobre el arco requirió 73 pasos, 289 iteraciones de Broyden y 9 factorizaciones de la matriz jacobiana, frente a los 71 pasos, 263 iteraciones y 6 factorizaciones que se invirtieron en el análisis mediante el método de control sobre el arco con restricción elipsoidal.

Una segunda serie de cálculos se realizó partiendo de un paso de tiempo inicial



Figura 7.22: Problema 8 (B). Evolución de la temperatura sobre la línea GBC.



Figura 7.23: Problema 8 (B). Evolución del paso de tiempo.



Figura 7.24: Problema 8 (B). Error de integración temporal.

 $\Delta t_0 = 0.002 s$ . En este caso, el método de control sobre el paso de tiempo requirió 84 pasos de tiempo, el de control esférico sobre el arco 73 pasos, y el de contro elipsoidal, 76 pasos de tiempo. Esto muestra una vez más la mejor adaptabilidad del esquema propuesto, que permite obtener en cada instante del proceso de integración temporal el paso de tiempo óptimo para la tolerancia de error especificada.

#### Problema 9

Se analiza ahora otro ejemplo propuesto en [170], que involucra discontinuidades bruscas en las condiciones de contorno. Este problema se utiliza para analizar con mayor detalle las variaciones menores sobre la metodología propuesta con el fin de establecer su implementación óptima. En particular, se analiza la sensibilidad del método a la omisión de la segunda sustitución (sobre el vector  $\overline{s_i}$ ) (ver capítulo 6).

La figura 7.25 muestra una placa de dimensiones  $1m \times 1m$ . La densidad del material es  $\rho = 1 \ Kg/m^3$ , su capacidad térmica es  $C_p = 50 \ W/Kg/^O K$  y la conductividad viene dada por  $k = 2(1 + 0.005T) \ W/m/^O K$ . Se supone una generación térmica volumétrica



Figura7.25: Problema 9. Malla de elementos finitos.

constante de valor  $Q = 2500 W/m^3$ . Las condiciones de contorno son:

a) La cara superior se mantiene a una temperatura constante de valor 273  $^{O}K$ .

b) Sobre el lado derecho se aplica un flujo térmico constante  $q = 1000 W/m^2$ .

c) La cara inferior es adiabática.

d) El lado izquierdo se halla expuesto a una condición de radiación del tipo  $q = h_{rad}(T^4 - T_{rad}^4)$  con  $h_{rad} = 10^{-9}$ . La temperatura de radiación es  $T_{rad} = 1473 \ ^{O}K$  si  $0 \ s \le t \le 0.5 \ s \ y \ T_{rad} = 273 \ ^{O}K$  si  $0.5s \ < t$ .

El sólido tiene una temperatura inicial de 273  $^{O}K$ .

El principal interés de este ejemplo es analizar cómo el algoritmo diseñado en el capítulo precedente atraviesa la discontinuidad en t = 0.5 s. El problema se resuelve utilizando 80 pasos de tiempo como máximo, interrumpiendose el cálculo cuando se llega a t = 20 s. Los parámetros de cálculo utilizados fueron los siguientes: fracción óptima del error de integración temporal en torno a la cual fijar este error  $\mu = 0.25$ , error de integración temporal sobre el residuo al final del paso de tiempo  $\epsilon_{int} = 10^{-3}$ , tasa inicial de crecimiento del arco  $\Xi = 1.1$ , factor de reducción del arco en caso de paso de tiempo rechazado  $\eta = 0.2$ , factor de refactorización de la matriz jacobiana  $\nu = 5$ , y



Figura 7.26: Problema 9. Evolución temporal de 4 puntos seleccionados.

paso de tiempo inicial  $\Delta t_0 = 10^{-3}s$ . Como criterio de convergencia sobre el residuo a mitad del paso de tiempo se usaron (ecuaciones 5.93 y 5.95)  $\varepsilon_1 = 10^{-4}$ , y  $\varepsilon_2 = 10^{-3}$ .

La figura 7.26 muestra la evolución de 4 nodos seleccionados hasta t = 1 s.

Se realizó una comparación entre la metodología de longitud de arco completa (con dos sustituciones por iteración y ulterior aplicación del algoritmo de Broyden sobre ambos), que denominamos caso A, y su versión simplificada, sustituyendo sólo  $\overline{s_i}$ , manteniendo constante durante cada paso de tiempo  $\partial R/\partial \Delta t$ , pero actualizando a cada iteración el vector  $\overline{s_i}$  de acuerdo con el método de Broyden (caso B). En ambos casos se utilizó una restricción N-esférica y se omitó la etapa de predicción descrita en el capítulo anterior.

Los resultados se resumen en la tabla 7.9, donde se indica en qué pasos de tiempo fué necesaria una refactorización y cuántos pasos de tiempo hubieron de repertirse. Se aprecia una cierta ventaja del método simplificado de sustitución sólo sobre  $\overline{s_i}$  más algoritmo QN aplicado a los dos vectores sobre el método completo de doble sustitución. En efecto, en el caso B fueron necesarios sólo 70 pasos de tiempo para analizar el periódo de tiempo deseado, mientras que en el caso A los 80 pasos de tiempo prescritos apenas

	Caso A	Caso B
factorizacion en los	1 6 16 27 27	1 5 13 27 27 27
pasos	30 44 55 69 78	$32 \ 38 \ 51 \ 61 \ 68$
iteraciones	458	369
pasos de tiempo totales	80	70
pasos de tiempo rechazados	3(27, 27, 30)	2(27, 27)
tiempo analizado	13.46 s	59.69 s
tiempo CPU	5 m 39 s	4 m 19 s

Tabla7.9: Problema 9. Comparación de los casos A y B.

bastaron para llegar a 10 s de análisis. De este modo, se adopta como método estándar en el tratamiento de  $\overline{s_i}$  la aproximación seguida en el caso B.

La figura 7.27 representa la evolución del paso de tiempo utilizado, mientras que en las figuras 7.28 y 7.29 se representan el error de integración temporal  $E_{int}$  y el número de iteraciones requerido como función del paso de tiempo ( $\Box = caso A, \Delta = caso B$ ). En ambos casos se observa cómo el error de integración disminuye bruscamente debido a la reducción en el tamaño del paso de tiempo necesaria para atravesar la discontinuidad, estabilizándose posteriormente en torno al valor preestablecido de  $0.25 \times 10^{-3}$  ( $\mu \epsilon_{int}$ ). El proceso de aceleración sobre el paso de tiempo, sin embargo, es más o menos el mismo y la razón de la mayor eficacia en el caso B se debe a que se rechazó un paso de tiempo menos, lo cual significa que se invirtieron menos pasos de tiempo en recuperar el orden de magnitud del tamaño de  $\Delta t$  con el cual se estaba trabajando antes del cambio brusco en la condición de contorno.

Las pruebas realizadas sobre este problema utilizando el mecanismo de predicción inicial a cada paso de tiempo dieron resultados poco satisfactorios, que se justifican debido a la discontinuidad brusca del vector  $\dot{T}$ . Del mismo modo, la aplicación de la restricción N-elipsoidal dá resultados deficientes, ya que la dirección privilegiada viene determinada por la velocidad.



Figura 7.28: Problema 9. Error de integración temporal.



Figura7.29: Problema 9. Número de iteraciones por paso de tiempo.

#### Problema 10

Finalmente analizaremos las prestaciones del método en un caso práctico. Se estudia uno de los casos presentados en el capítulo 9, correspondiente al accidente de pérdida de refrigerante en la mitad de los tubos que refrigeran la placa divertora de un reactor de fusión.

La malla de elementos finitos se muestra en la figura 7.30 (el modelo contiene 430 nodos). Un flujo de  $10 MW/m^2$  se aplica permanentemente sobre la cara superior, siendo el resto del contorno exterior adiabático. A partir de t = 0 s el coeficiente de película en el tubo refrigerante izquierdo decae linealmente hasta cero en 0.1 s. Como consecuencia de esto, el tubo seco se convierte en una cavidad radiante y en el tubo funcionante se produce un comienzo de ebullición nucleada. Los detalles sobre dimensiones y propiedades materiales se dan en el capítulo 9.

Este problema es rígido en el tiempo debido a que se presentan dos constantes de tiempo características: durante la primera etapa (hasta 0.5 s), el campo de temperaturas cambia su forma debido a la falta de refrigerante en el tubo izquierdo. Como se supone que el flujo térmico sobre la cara superior no desaparece, durante una segunda etapa la temperatura aumenta de modo notable en la parte izquierda del componente, sin cambiar apreciablemente su morfología. De este modo, en la primera etapa T tiene una norma pequeña pero cambia de dirección fuertemente, mientras que en la segunda, la dirección del vector velocidad varía poco, pero su módulo crece más rápidamente. Se pretende analizar los primeros 20 s de la secuencia accidental. En la figura 7.31 se muestra la evolución de la temperatura a lo largo de la línea superior en 7 instantes seleccionados, pudiéndose apreciar cualitativamente la existencia de las dos constantes de tiempo a las cuales se ha hecho alusión más arriba.

El problema se resuelve con el siguiente conjunto de parámetros de control:  $\mu = 0.75$ ,  $\epsilon_{int} = 10^{-3}$ ,  $\Xi = 1.25$ ,  $\eta = 0.5$ ,  $\nu = 5$ ,  $\Delta t_0 = 10^{-2}s$ ,  $\varepsilon_1 = 10^{-3}$ , y  $\varepsilon_2 = 0.05$ . El número máximo de pasos de tiempo se fijó en 70.

Como el paso de tiempo inicial es bastante próximo a la constante de tiempo que controla el primer transitorio (el coeficiente de película en el tubo averiado decrece hasta cero en 0.1 s), se debe esperar una disminución inicial en el paso de tiempo. Después, a medida que la temperatura comienza a aumentar, el paso de tiempo debe crecer de modo controlado por el error a través de la restricción de longitud de arco.



Figura7.30: Problema 10. Malla de elementos finitos.




En primer lugar se realizaron tres cálculos para estudiar de nuevo la sensibilidad del método con respecto a la calidad del vector  $\partial R/\partial \Delta t$ . En el cálculo A se aplicó el método completo, en el cálculo B se omitió su cálculo y su corrección en las iteraciones posteriores a la primera, mientras que en el cálculo C se adoptó el método estándar de sustitución inicial y sucesivas correcciones QN sobre  $\overline{s_i}$ . Los resultados se resumen en la tabla 7.11. En los tres cálculos se utilizó una restricción N-esférica sin etapa de predicción.

Aunque las diferencias en el tiempo de CPU no son relevantes (el número de grados de libertad no es lo suficientemente grande), se comprueba de nuevo que se puede evitar la sustitución del vector  $\partial R/\partial \Delta t$  en cada iteración siempre y cuando se corrija con el algoritmo de Broyden, tal y como se mostró en el capítulo anterior. Cuando no se lleva a cabo esta corrección, la tasa de convergencia se deteriora notablemente. De hecho, todas las factorizaciones de la matriz jacobiana en el cálculo B fueron activadas por la detección de una divergencia sobre el corrector temporal  $\lambda_i$ .

Las figuras 7.32 y 7.33 muestran el paso de tiempo y el error de integración  $E_{int}$ 

caso	A	В	C
iteraciones	354	348	355
tiempo CPU	33 m 39 s	34 m 13 s	32 m 06 s
factorizaciones	3	5	3
en los pasos	1, 19, 46	1, 2, 18, 30, 54	1, 17, 37

Tabla7.10: Problema 10. Comparación de los casos A, B y C.

respectivamente para los tres casos en función del contador de pasos (\* = caso A,  $\Box$  = caso B,  $\Delta$  = caso C). Nótese que el paso de tiempo recorre tres décadas, necesitándose sólamente tres factorizaciones para el análisis del transitorio. La adaptividad del algoritmo se pone de manifiesto en la figura 7.30, que refleja igualmente el hecho de tener dos escalas de tiempo diferentes. El error relativo de integración alcanza rápidamente el valor deseado, y a partir de este punto continúa con un error prácticamente constante.

Posteriormente se realizaron 3 cálculos adicionales para comparar la eficacia del método N-elipsoidal y de la etapa de predicción, adoptando el tratamiento estándar sobre  $\partial R/\partial \Delta t$ . Se forma así la siguiente casuística:

Cálculo A: Restricción N-esférica sin predicción.



Figura 7.32: Problema 10. Evolución del paso de tiempo (Casos A, B, y C).



Figura 7.33: Problema 10. Error de integración temporal (Casos A, B, y C).

	Caso A	Caso D	Caso E	Caso F
factorizaciones	3	4	3	5
en los pasos	1 17 37	1 15 28 61	1 18 46	1 9 17 41 62
iteraciones	355	380	298	250
pasos totales	70	63	70	62
pasos rechazados	-	1 (19)	-	-
tiempo CPU	32 m 7 s	35 m 8 s	28 m 41 s	26 m 22 s

Tabla7.11: Problema 10. Comparación de los casos A, D, E y F.

Cálculo D: Restricción N-elipsoidal sin predicción.

Cálculo E: Restricción N-esférica con predicción.

Cálculo F: Restricción N-elipsoidal con predicción.

Los resultados obtenidos se comparan en la tabla 7.12. La razón entre el semieje privilegiado y los semiejes en las restantes direcciones, para los casos N-elipsoidales se tomó de 4 : 1. Se interrumpe el cálculo cuando se llega a un tiempo t > 20 s o cuando se han calculado 70 pasos de tiempo.

Las ventajas del uso de la etapa de predicción aparecen ahora de una forma mucho más evidente (se ahorran del orden de 100 iteraciones en cada caso), siendo mucho más crítica su omisión en el caso N-elipsoidal. El uso de hiperelipsoides como superficies de restricción proporciona, sin alteración notable del resto de las características del cálculo, pasos de tiempo más grandes (se necesitaron 62 pasos para alcanzar t = 20 s, mientras que en los casos A y E, con restricción esférica, los 70 pasos de tiempo cubrieron 16.14 s y 18.07 s, respectivamente), tal y como se aprecia en la figura 7.34 ( $\Box$  = caso A,  $\Delta$  = caso D, \* = caso E,  $\nabla$  = caso F). Se concluye, por lo tanto que el aprovechamiento eficaz del método N-elipsoidal se mejora mediante la utilización de un esquema de predicción que acelere la convergencia. A pesar de todo, podría, sin embargo, suponerse que el grado de excentricidad utilizado en los casos D y F no es el más adecuado. El error de integración temporal y el número de iteraciones requerido por paso de tiempo se presentan en las figuras 7.35 y 7.36, respectivamente. En cualquiera de los casos se aprecia que el control sobre el error de integración puede realizarse pilotando el tamaño del paso de tiempo mediante el método de longitud de arco.



Figura 7.34: Problema 10. Evolución del paso de tiempo (Casos A, D, E y F).



Figura 7.35: Problema 10. Error de integración temporal (Casos A, D, E y F).



Figura7.36: Problema 10. Número de iteraciones por paso de tiempo (Casos A, D, E y F).

# Capítulo 8

## Análisis de Secuencias Accidentales Globales.

En este capítulo se analizan algunas de las secuencias accidentales más relevantes desde el punto de visto de diseño y seguridad concernientes al reactor de fusión por confinamiento magnético europeo NET (Next European Torus), que ha sido concebido como continuación de la instalación experimental JET, para mostrar la factibilidad tecnológica de la fusión nuclear como fuente de energía.

Algunos estudios precedentes (Malinovic y Kazimi [89], Massidda y Kazimi [90]) analizan accidentes de pérdida de refrigeración para reactores con envoltura reproductora con metal fundido en circulación, en el marco del Estudio de Comparación y Selección de Envolturas Reproductoras ('Blanket Comparison and Selection Study', BCCS). En estos trabajos se pone de manifiesto la importancia de la concepción de diseños intrínsecamente seguros, aprovechando mecanismos pasivos de mitigación de accidentes (Sze et al. [153]).

Uno de los aspectos más importantes de NET radica en la seguridad con respecto al calor residual depositado en sus componentes (principalmente en aquellos directamente enfrentados con el plasma) tras un cierto período de operación normal, debido a la activación de los materiales estructurales.

Se pretende analizar la respuesta del reactor en su versión de diseño más reciente a accidentes de pérdida de refrigerante ('Loss of Coolant Accident' o LOCA) y accidentes de pérdida de flujo ('Loss of Flow Accident' o LOFA). En el primer caso, se supone que una rotura en uno o más circuitos de refrigeración provoca, debido a la diferencia de presiones, la desaparición completa del refrigerante del interior de los tubos de enfriamiento. El segundo caso está asociado a un fallo en el sistema de bombeo, que ocasiona una pérdida de flujo de refrigerante, aunque este se mantiene confinado en el interior de los tubos. La frecuencia previsible de estos accidentes ha sido estimada por Mazille y Djerassi [94], basándose en la experiencia acumulada en reactores nucleares clásicos en  $\sim 10^{-4} - 10^{-2}$  accidentes por año para el LOCA y  $\sim 1$  accidente por año para el LOFA.

Desde el punto de vista térmico, en el primer caso se supone que el único mecanismo de remoción del calor de un componente accidentado sobre un pozo frío será la radiación térmica. Si se excluyen, por lo tanto, efectos mecánicos o químicos debidos al escape de refrigerante, tal secuencia accidental puede analizarse mediante el modelo de cálculo descrito en los capítulos anteriores, mediante una modelización monodimensional en el plano *ecuatorial* del reactor. En el caso de LOFA, antes de proceder al análisis de los transitorios térmicos, conviene tener una idea precisa del comportamiento termohidráulico de un circuito típico de refrigeración tras un fallo en el sistema de bombeo. Para ello, se estudia la disposición óptima de todos los componentes de tal circuito en la dirección *poloidal*, posteriormente se simula mediante un programa de cálculo termohidráulico el comportamiento del refrigerante, y los resultados de este análisis se incorporan al estudio del transitorio térmico en el plano *ecuatorial* del reactor.

Desgraciadamente, el equipo de diseño del reactor NET (NET-Team, patrocinado por la Comisión de las Comunidades Europeas (EURATOM), con sede en Garching bei München, RFA) no dispone de una versión definitiva de referencia del reactor, estando gran parte de sus características siendo sometidas a permanente revisión. Este hecho añade una dificultad adicional al análisis. Se han considerado *dos* reactores NET de referencia básicos. El primero de ellos, denominado NET-DN ('Double Null') presenta como características principales la presencia de las placas divertoras de forma integrada con la primera pared (las placas divertoras se encargan de recibir el intenso flujo térmico debido al bombardeo de iones pesados, debido a la disposición de las bobinas de campo magnético es tal que existen dos puntos con B nulo, hacia donde se desvían todos los iones pesados que contaminan y enfrían el plasma), y la utilización de una envoltura reproductora para la producción de tritio consistente en la mezcla eutéctica litio-plomo (17 % Li, 73 % Pb) debido a las excelentes propiedades del plomo como multiplicador neutrónico. El segundo diseño, NET-SB (Shielding Blanket) sustituye la envoltura reproductora metálica por una serie de capas a través de las cuales circula una disolución acuosa de sales de litio. En esta versión, las placas divertoras se separan de la primera pared interna, siendo dotadas de circuitos de refrigeración independientes.

### 8.1 Breve Descripción del Reactor NET.

El reactor NET constituye el eslabón intermedio entre la instalación de análisis de factibilidad *física* y el reactor de explotación *económica* DEMO. Esto comporta naturalmente la necesidad que a partir del diseño tecnológico, las salvaguardias de seguridad sean lo suficientemente holgadas como para poder ser extrapoladas a tal reactor comercial. La figura 8.1 muestra una vista general de la instalación, donde se señalan los principales subsistemas.

Con respecto al diseño de los componentes, se debe tener en cuenta, además de los requisitos de base, otros aspectos relativos a la duración de su vida operativa y a su fiabilidad. Desde este punto de vista, los componentes de NET pueden clasificarse en las cinco categorías siguientes:

a) Componentes de la máquina básica. Pertenecen a esta categoría las bobinas superconductoras, con su correspondiente estructura de sujeción y sus criostatos, la vasija de vacío y las pantallas de blindaje biológico. Estos componentes son, en general, compatibles con diferentes modalidades operativas de la máquina.

b) Envoltura de blindaje ('Shielding Blanket'). La función principal de este componente consiste en proteger la vasija de vacío de una deposición de energía e irradiación neutrónica demasiado elevada. Esta función es realizada por la envoltura reproductora en el diseño NET-SB.

c) Componentes enfrentados con el plasma ('Plasma Facing Components'). Son las primeras paredes (interior y exterior) y las placas divertoras, componentes expuestos a condiciones de trabajo nominales, si bien no perfectamente definidas todavía, ciertamente muy severas. La optimización del diseño de estos elementos a partir de un proyecto básico conservador es un objetivo del programa NET.

d) Envoltura Reproductora ('Breeding Blanket'). Incluye los correspondientes circuitos de refrigeración y de extracción del tritio. Como se mencionó anteriormente,



1- INNER POLOIDAL COILS 2- BLANKET 3- PLASMA	5- PLASMA EXHAUST 6- BIOLOGICAL SHIELD-CRYOSTAT 7- ACTIVE CONTROL COILS 8- TOPOLDAL ELELD COILS	9- FIRST WALL 10- DIVERTOR PLATES 11- OUTER POLOIDAL COILS
4- VACUUM VESSEL-SHIELD	8- TOROTUAL FIELD COILS	

Figura 8.1: Vista general del reactor NET.

las dos opciones de diseño más avanzadas corresponden a la envoltura reproductora de litio-plomo y al de sales de litio en disolución acuosa.

e) Sistemas auxiliares. En esta sección se incluyen las instrumentaciones y sistemas necesarios para conseguir el correcto funcionamiento de la planta, pero que pueden ser probadas y verificadas de modo independiente (intercambiadores de calor, equipo de bombeo, sistema de recuperación del tritio, sistemas de diagnosis, sistemas de control, etc.).

En la figura 8.2 se muestra una sección poloidal del reactor, señalando sus partes principales.

La cámara toroidal o vasija de vacío funciona como recipiente de depresurización para mantener las condiciones de alto vacío necesarias para hacer posible la reacción nuclear entre el deuterio y el tritio. Está constituída de 16 segmentos de 22.5<sup>°</sup> de apertura cada uno a lo largo de la dirección toroidal. El número de estos segmentos corresponde al número de bobinas superconductoras encargadas de crear el campo magnético toroidal. La división en segmentos de la cámara toroidal tiene como finalidad limitar los efectos de posibles accidentes en cada uno de ellos.

Los componentes internos de la vasija de vacío se hallan mecánicamente sujetos sobre la estructura semipermanente de la cámara toroidal. El espesor de las paredes de la cámara de vacío es del orden de 60 cm, de los cuales alrededor de 50 cm corresponden a acero inoxidable del tipo AISI-316 macizo, y el resto a varias cámaras en las cuales se encuentra agua que circula a baja velocidad y que actúa como refrigerante. Cada uno de los 16 segmentos tiene una apertura de acceso para realizar operaciones de mantenimiento y para disponer las partes móviles en su interior.

A cada uno de los 16 segmentos de la vasija de vacío corresponde un módulo (constituído a su vez de 3 sectores) de primera pared interior y de primera pared exterior, asociada al contenedor de la envoltura reproductora. Las figuras 8.3 y 8.4 ilustran la disposición de estos componentes.

Los componentes móviles del interior del reactor se dividen en componentes del lado interno y componentes del lado externo.

La primera pared interna ('Inner First Wall', IFW) es simplemente una plancha de acero recorrida por tubos refrigerantes de pequeño diámetro a través de los cuales circula el agua de enfriamiento a presión, los cuales se desarrollan a lo largo de la



Figura8.2: Sección del reactor NET.



Figura 8.3: Vista de un sector de componentes dentro de la vasija de vacío.



Figura8.4: Segmentos interior y exterior.

dirección poloidal. Los tramos superior e inferior de la primera pared, directamente enfrentados con los puntos en los cuales las líneas de campo magnético se cruzan, constituyen las placas divertoras. La *envoltura de blindaje interna* ('Inner Shielding Blanket', ISB) es el siguiente componente que se encuentra en la dirección del eje del toroide. Consiste básicamente en una caja de acero inoxidable, en contacto con la parte posterior de la primera pared. Cada uno de estos módulos contiene un conjunto de tubos de sección rectangular por los cuales circula agua conteniendo sales de litio en disolución (figura 8.5).

El módulo básico de primera pared externa se muestra en la figura 8.6 en sección ecuatorial. La apertura angular de cada módulo es de 7.5°. En el interior del volumen de esta caja, y entre la primera pared externa ('Outer First Wall', OFW) y la placa de soporte posterior ('Outer Back Plate', OBP) se aloja la envoltura reproductora, en el cual la mezcla eutéctica litio-plomo en fase líquida circula por 27 tubos que se prolongan en dirección poloidal, dispuestos en 5 filas. En el interno de cada uno de estos tubos, 9 pequeños tubos en forma de U hacen circular el agua de refrigeración necesaria para enfriar el eutéctico sin permitir que solidifique. Este circuito de refrigeración es independiente del correspondiente a la primera pared externa. El material estructural es acero inxidable en todos estos componentes.

Con respecto a la geometría global del reactor, la instalación básica descrita anteriormente, junto con la propia vasija de vacío, los criostatos, las bobinas de campo toroidal y poloidal y los demás sistemas auxiliares está contenida dentro del llamado blindaje biológico, constituido por un cilindro de hormigón de 1.6 m de espesor, cerrado superiormente por un techo troncocónico, dividido en 16 sectores, cada uno de ellos con su correspondiente puerta estanca de acceso.

Las modificaciones más notables introducidas en el diseño NET-SB corresponden, como se apuntó más arriba, a la envoltura reproductora externa, sustituído por una envoltura de blindaje con disolución acuosa de sales de litio. Se renuncia a la utilización del eutéctico litio-plomo en gran medida debido a los problemas que provoca el deber trabajar con temperaturas lo suficientemente altas como para asegurar que el material permanece líquido y fluye sin dificultad. La figura 8.7 muestra la sección de la parte externa del toro con este nuevo diseño. La segunda diferencia fundamental entre ambos diseños radica en la estructura y materiales de la primera pared. Mientras que NET-DN



Figura 8.5: NET-DN: Primera pared interna y envoltura de blindaje interna.



Figura 8.6: NET-DN: Envoltura reproductora externa de litio-plomo.



Figura 8.7: NET-SB: Envoltura de blindaje externa.

integra en el mismo componente la primera pared interna y los divertores, en NET-SB se separan físicamente estos componentes, disponiéndose circuitos independientes de refrigeración para cada uno de ellos. En ambos casos se prevé la disposición de un recubrimiento de placas de grafito, cuyo espesor óptimo constituye un parámetro de diseño importantísimo, con la doble función de proteger el acero y evitar que átomos de hierro u otros elementos pesados pasen al plasma, impurificándolo y provocando la extinción de la reacción deuterio-tritio.

### 8.2 Accidentes de Pérdida de Refrigerante en NET-DN.

Una primera serie de cálculos fué realizada tomando como diseño de referencia el reactor NET-DN. El propósito de este análisis fué evaluar los aspectos de seguridad concernientes sólamente al calor residuo. Se supone que, tras la iniciación del accidente, la principal fuente de calor, que es el plasma en ignición, se extingue automáticamente. Se pretende estudiar las consecuencias térmicas sobre los distintos componentes en la hipótesis de que no sea posible asegurar la correcta refrigeración de todos o algunos de ellos durante el período inmediatamente posterior.

El análisis ayuda a comprender cuales son el número y la disposición óptimos para los diferentes circuitos de refrigeración independientes.

Se utiliza el modelo monodimensional mostrado en la figura 8.8 (no a escala), obtenido homogeneizando las sucesivas capas que se irradian energía mutuamente, de modo que constituyen capas cilíndricas coaxiales. En el caso de la envoltura reproductora, se forman así 5 filas, denominadas sucesivamente BB1, BB2, etc., que representan las correspondientes disposiciones de tubos conteniendo la mezcla eutéctica litio-plomo. La vasija de vacío se denota como IVV y OVV en sus partes interna y externa. Las figuras 8.9 y 8.10 muestran en detalle la geometría de la primera pared interna y externa, respectivamente. La elección del cobre como material de base para la primera pared interna se justifica por su excelente conductividad térmica. Las dimensiones del modelo se resumen en la tabla 8.1.

Se consideran 5 materiales distintos: acero inoxidable AISI-316 como componente estructural básico, cobre en la matriz de la primera pared interna, el revestimiento



Figura 8.8: NET-DN: Discretización para el análisis térmico.



Figura 8.9: NET-DN: Detalle de la primera pared interna.



Figura 8.10: NET-DN: Detalle de la primera pared externa.

	zona	radio	radio
componente		interior (m)	exterior (m)
IFW	grafito	3.637	3.657
IFW	matriz de cobre	3.590	3.635
ISB	total	3.420	3.590
OFW	grafito	6.538	6.558
OFW	bloque AISI-316	6.560	6.577
OBP	placa posterior	7.340	7.490
BB1	total	6.660	6.744
BB2	total	6.790	6.874
BB3	total	6.920	7.000
BB4	total	7.050	7.134
BB5	total	7.180	7.264
IVV	total	2.250	3.250
OVV	total	7.680	8.270

Tabla8.1: NET-DN. Descripción de la discretización espacial.

Tabla8.2: NET-DN. Propiedades materiales utilizadas para el análisis.

material	AISI-316	cobre	grafito	Li-Pb
densidad $(Kg/m^3)$	7920	8850	2100	9430
calor específico $(J/Kg^0K)$	512	420	1950	90
conductividad $(W/m^0K)$	15	385	30	16
emisividad ( % )	30	30	100	+

de grafito de 2 cm de espesor en las dos superficies directamente enfrentadas con el plasma, el material reproductor litio-plomo, y el agua de refrigeración. En este primer cálculo estimativo, las propiedades materiales se supusieron constantes, tal y como se recoge en la tabla 8.2.

El calor residual utilizado en este cálculo fué proporcionado por Ponti [113] mediante el código de activación ANITA, suponiendo las hipótesis sobre la historia de explotación de la planta que se resumen en la tabla 8.3. De este análisis del calor residuo resultan tres curvas básicas de calor residual, correspondiendo a los materiales AISI-316, cobre y litio-plomo, tal y como se muestra en la figura 8.11. En cada componente, estas curvas básicas se aplican afectadas de un coeficiente de atenuación espacial, calculado igualmente para esta geometría. Estos coeficientes se listan en la tabla 8.4. El calor



Figura 8.11: Transitorios de calor residual.

Tabla8.3: NET-DN.	<b>Hipótesis</b>	para el	cálculo	del	calor	residual	

flujo neutrónico $(MW/m^2)$	1	
años de operación	1	
factor de carga (%)	100	
carga superficial integrada ( $MW$ año $/m^2$ )	1	

residual en el grafito resulta prácticamente despreciable.

En el momento de comenzar este estudio, todavía no existía ningún diseño establecido sobre los diferentes circuitos de refrigeración necesarios para una instalación de este tipo. Resulta, por supuesto, deseable tomar en cuenta los aspectos relacionados con la seguridad a la hora de decidir qué diseño se debe adoptar. En principio, se deberían tener en cuenta las siguientes recomendaciones:

a) minimización del número de circuitos independientes.

b) optimización de la transmisión del calor entre componentes enfrentados mediante radiación (ennegreciendo de alguna manera las superficies involucradas).

c) compatibilización con los procedimientos de manutención.

componente	A151-310	cobre	LI-PD
IFW	0.6	1.	0.
OFW	1.	0.	0.
OBP	0.04	0.	0.
BB1	0.43	0.	1.
BB2	0.28	0.	0.7
BB3	0.14	0.	0.54
BB4	0.09	0.	0.40
BB5	0.05	0.	0.30
IVV	0.03	0.	0.
OVV	0.01	0.	0.

Tabla8.4: NET-DN. Factores de atenuación del calor residual.

De acuerdo con estos criterios, parece juicioso escoger 5 circuitos de refrigeración independientes:

- Dos circuitos correspondientes a la parte móvil interna (IFW e ISB). Esta división es aconsejada por el hecho de que el circuito correspondiente a la primera pared interna refrigera igualmente las placas divertoras, lo cual incrementa la probabilidad de un accidente. Además, el refrigerante a través del componente ISB contiene tritio (debido a la presencia de sales de litio), lo cual imposibilita su mezcla con el otro refrigerante.

- Dos circuitos para la parte móvil exterior, correspondientes a la primera pared externa y su correspondiente placa posterior (OFW y OBP), y a los tubos de agua de la envoltura reproductora. La necesidad de dos circuitos se justifica en este caso por la necesidad de variar el diseño e incluso la composición de la envoltura reproductora, lo cual debe ser posible sin modificar el sistema de refrigeración de la caja que lo contiene.

- Un circuito de refrigeración para la vasija de vacío, tanto en su parte interna como externa, ya que el calor depositado en este componente en condiciones nominales es muy bajo, así como el calor de activación (ver tabla de coeficientes de atenuación).

De este modo, se tiene que los componentes conectados a circuitos de refrigeración independientes se encuentran siempre mutuamente enfrentados, facilitándose así la remoción del calor mediante la radiación térmica desde las capas interiores hacia las exteriores. Los circuitos independientes se muestran sobre el esquema de discretización espacial en la figura 8.8.

componente	zona	temperatura $({}^{0}C)$	
IFW	grafito	1380	
IFW	cobre	305	
ISB	AISI-316	325	
OFW	grafito	1360	
OFW	AISI-316	310	
OBP	AISI-316	300	
BB	Li-Pb	350	
IVV	AISI-316	100	
OVV	AISI-316	100	

Tabla8.5: NET-DN. Temperaturas nominales de funcionamiento.

El análisis se inicia a partir de las temperaturas de proyecto, proporcionadas por el equipo de diseño (NET-Team), que se recogen en la tabla 8.5.

Los circuitos de refrigeración en contacto con el material fértil deben trabajar a temperaturas relativamente elevadas (~  $300 \, {}^{\circ}C$ ) con el fin de evitar la solidificación de la mezcla eutéctica. Esto constituye un grave inconveniente ya que limita el margen de seguridad entre la temperatura nominal de funcionamiento y la excursión máxima de temperaturas que se puede prever, que es precisamente lo que intentamos estimar en este estudio preliminar. Además, tales temperaturas de funcionamiento requieren una elevada *presurización en el refrigerante* si se quiere evitar flujo bifásico en el interior de los tubos. Así, los tubos de refrigeración de la vasija de vacío trabajan a una presión nominal de 0.5 *bar*, mientras que en el resto, se debe adoptar  $p = 15 \, bar$  (datos provinientes del NET-Team). Esto acarrea consecuencias mecánicas muy severas si uno de los tubos refrigerantes de alta presión se rompe.

La aproximación adoptada en este análisis consiste en tratar los nodos correspondientes a los circuitos funcionantes con temperatura del refrigerante de ingreso fija como condición de Dirichlet, manteniendo el coeficiente de intercambio térmico en los tubos a su valor nominal. En los tubos accidentados, tal condición se relaja, manteniéndose una conductividad residual que tiene en cuenta la transmisión del calor a través del material entre dos tubos consecutivos.

La elección del sistema de refrigeración presentada en los párrafos anteriores permite un análisis casuístico racional de las secuencias accidentales más interesantes desde el punto de vista de la seguridad. En todos los casos se supusieron condiciones de contorno adiabáticas sobre las paredes de la vasija de vacío. Esta suposición es conservativa, pero resulta razonable ya que la vasija de vacío se encuentra separada del sistema criogénico por una capa de material aislante.

Se estudiaron las siguientes secuencias accidentales:

a) Pérdida de refrigerante en cada uno de los circuitos de refrigeración independientes, seguido de una extinción automática del plasma gracias al sistema de control.

b) Pérdida de refrigerante en todos los circuitos de refrigeración de forma simultánea, debido a un accidente de pérdida de energía eléctrica en toda la planta. En este caso, la extinción del plasma está prácticamente asegurada debido a la pérdida de corriente eléctrica en las bobinas de campo.

Los resultados obtenidos se muestran de forma gráfica en las figuras 8.12, 8.13 y 8.14, donde se refleja la distribución radial de temperaturas en cada caso para varios instantes de tiempo, y las excursiones de temperatura de las capas afectadas (los número identifican las zonas cilíndricas descritas en la figura 8.8). La característica fundamental de todos los transitorios es la descarga por radiación del calor acumulado en las placas de grafito sobre los componentes más próximos. Este fenómeno presenta una constante de tiempo de  $\sim 2h$ . La magnitud de la excursión de temperatura en el componente averiado es variable, siendo más severa en el caso de zonas refrigeradas sólamente por radiación térmica.

Pérdida de refrigerante en la primera pared interna (IFW).

Como se muestra en la figura 8.12.a, una temperatura máxima de valor  $370 \, {}^{0}C$  se alcanza en la primera pared interna en ~ 6 min. Después, el calor residual es eliminado gracias al circuito de refrigeración del ISB, que permanece funcionando.

Pérdida de refrigerante en la primera pared externa (OFW/OBP).

El resultado se muestra en la figura 8.12.b. Este accidente es más severo debido a que el elemento accidentado sólo puede eliminar calor por radiación. La temperatura máxima en la primera pared externa alcanza un valor máximo de ~  $700 \, {}^{0}C$  en unos  $25 \, min$  después de la iniciación del accidente.

Pérdida de refrigerante en la envoltura de blindaje interna (ISB).

La figura correspondiente es la 8.13.a. El transitorio térmico es muy parecido al correspondiente a la figura 8.12.a. En esta ocasión, es el circuito de refrigeración







Figura 8.13: Transitorios térmicos en NET-DN. 8.13.a: Pérdida de refrigerante en ISB. 8.13.b: Pérdida de refrigerante en BB.



Figura 8.14: Transitorios térmicos en NET-DN. 8.14.a: Pérdida de refrigerante en IVV/OVV. 8.14.b: Pérdida de refrigerante en todo el reactor.

de la primera pared IFW el que ayuda en la remoción del calor residual en el ISB. La magnitud de la excursión de temperatura, que se alcanza con relativa rapidez ( $\sim 1 min$ ), es de  $325 \, {}^{0}C$ .

Pérdida de refrigerante en la envoltura reproductora (BB).

La distribución de temperaturas mostrada en la figura 8.13.b (arriba) pone de manifiesto la diferencia entre este caso y los restantes. La envoltura reproductora descarga por radiación a través de sus 5 capas el calor residual sobre la primera pared externa y la placa posterior. Como el fenómeno está enteramente controlado por la radiación térmica, la constante de tiempo del transitorio es muy grande. La temperatura máxima  $(650 \, {}^{\circ}C)$  se alcanza en la segunda fila de material fértil al cabo de 9 h.

Pérdida de refrigerante en la vasija de vacío (IVV/OVV).

La gran inercia térmica de la vasija de vacío hace que el accidente considerado sea prácticamente irrelevante (figura 8.14.a). Mientras que el calor acumulado en los revestimientos de grafito se descarga sobre las primeras paredes en  $\sim 2 h$ , la temperatura de la vasija de vacío crece lentamente hasta alcanzar un valor de 180 °C al cabo de  $\sim 24 h$ .

#### Pérdida de refrigerante en todo el reactor.

La evolución del transitorio térmico se muestra en la figura 8.14.b. Tras un cierto tiempo, se produce un máximo local de la temperatura en la primera fila de material fértil, alcanzándose temperaturas del orden de 900  $^{\circ}C$  al cabo de 1 día. Los componentes de la parte interna presentan un comportamiento análogo, llegando en el mismo período de tiempo a una temperatura máxima de alrededor de 720  $^{\circ}C$ . Debido a las condiciones de contorno globalmente adiabáticas que se han impuesto, las temperaturas continuan creciendo, aunque la temperatura de fusión de los componentes se alcanza sólamente tras 10 días.

En el análisis precedente, el único mecanismo de remoción del calor residual considerado ha sido la radiación térmica. A esta consideración ya conservadora, que excluye explícitamente la posibilidad de cada componente de tener un cierto grado de autorrefrigeración, se añade el hecho de haber utilizado emisividades minoradas.

En general, la escala de tiempo involucrada es del orden de algunos minutos cuando se considera los componentes directamente enfrentados con el plasma, mientras que es de varias horas para componentes con mayor inercia térmica, como la envoltura reproductora y la vasija de vacío. Se ha comprobado que en el caso de pérdida de refrigerante en *un único circuito* permanece siempre bastante por debajo de las temperaturas de fusión de los materiales, aunque es probable que no se podría evitar la ebullición del agua contenida en los tubos si ésta permanece en ellos sin fluir tras la iniciación del accidente. Esto podría provocar la subida brusca de la presión en los tubos, que podrían estallar provocando un daño irreparable a la instalación.

La situación, sin embargo, no es tan dramática como parece, ya que en el caso de accidente de pérdida de flujo, la energía depositada en los primeros minutos podría ser eficazmente eliminada debido al flujo de refrigerante residual, debido a la propia inercia del agua en los tubos, a la inercia de la bomba averiada, y más tarde, si el diseño de los circuitos refrigerantes es adecuado, al efecto termosifón inducido por diferencia de densidades en las ramas fría y caliente del circuito. La suma de todas estas aportaciones puede ser capaz de asegurar el mínimo flujo para evitar que el refrigerante entre en ebullición.

Los resultados mostrados arrojan igualmente alguna luz sobre la importancia del calor residual con respecto a los procedimientos de manutención. En efecto, los casos accidentales en los componentes IFW e ISB muestran que la temperatura en el componente afectado permanece baja debido a la conducción térmica que conecta ambos circuitos. Es posible, por lo tanto, vaciar cualquiera de los dos con el fin de realizar operaciones de manutención sin esperar graves consecuencias. La situación en la primera pared externa es un poco más complicada, ya la excursión térmica es más severa, por lo cual parece necesario el concurso de sistemas de refrigeración auxiliares, o bien la espera, con el circuito de enfriamiento funcionando, durante un cierto período de tiempo antes de realizar el mantenimiento.

# 8.3 Análisis Termohidraulico de un Circuito de Refrigeración en NET-DN.

En la sección anterior se realizó un análisis preliminar sobre las consecuencias térmicas de accidentes de pérdida de refrigerante, considerando como único mecanismo de eliminación del calor residuo la radiación térmica.

Para mejorar la capacidad de enfriamiento del sistema, en esta sección se presenta un diseño provisional del circuito de refrigeración del componente más crítico (el conjunto primera pared interna - divertor) que permita el establecimiento de un régimen termohidraulico residual tras la parada accidental de las bombas de impulsión (accidente de pérdida de flujo, LOFA), mitigando las consecuencias del accidente, suponiendo siempre que una extinción del plasma en tiempo breve ( $\sim 1 s$ ). Este diseño ha sido realizado teniendo en cuenta las condiciones nominales de funcionamiento del reactor, y dimensionado en modo de que sea capaz por sí mismo de eliminar el calor residual que se produce en todo el reactor. Los resultados muestran que se puede evitar la ebullición del agua de refrigeración, limitando el pico de presión producido, tomando medidas de diseño relativamente simples.

Los precedentes inmediatos de este estudio son los trabajos de Roth y Chow [129] y Klippel [77], en el marco del análisis térmico y termohidraulico de la envoltura reproductora. Los primeros utilizan como reactor de referencia MARS [84] ('Mirror Advanced Reactor Study'), que incorpora como refrigerante la propia mezcla eutéctica de litioplomo en circulación. El código de cálculo empleado es ATHENA [130], que permite la representación del efecto del campo magnético sobre el flujo del metal líquido. Con refrencia a NET-DN, y asumiendo el diseño de la envoltura reproductora en su versión litio-plomo, Klippel propone el uso del agua como refrigerante y analiza, mediante el programa RELAP [121], los transitorios térmicos asociados al circuito de refrigeración de la envoltura reproductora.

Extrapolando los resultados obtenidos a los restantes circuitos de refrigeración (hipótesis que los resultados de Klippel parecen avalar) se podría demostrar que, en el caso de LOFA, el calor residual que se genera en las estructuras internas del reactor puede ser eliminado mediante mecanismos *pasivos* (radiación térmica y convección natural), de modo que el reactor sea intrínsecamente seguro para este tipo de secuencias accidentales. Las condiciones para que esto se produzca son eficiencia en la conducciónradiación en la dirección radial y el diseño correcto de los componentes directamente enfrentados con el plasma que permita el establecimiento del régimen de efecto termosifón mencionado anteriormente.

Utilizando el esquema de análisis de la sección precedente, se simuló un accidente de pérdida de refrigerante en todos los circuitos de refrigeración excepto el correspondiente a la primera pared interna. El flujo total de energía que debe ser eliminado por la primera pared interna se muestra en la figura 8.15, y es la suma del calor residual propio de la primera pared más el flujo térmico que por radiación y conducción le llega de los componentes adyacentes. Un estudio paramétrico realizado muestra que esta curva es muy sensible al espesor de grafito del revestimiento de la primera pared, ya que la temperatura de funcionamiento en régimen permanente de este revestimiento depende en gran medida esta magnitud, y, como consecuencia de esto, el calor acumulado en el grafito (que se descarga sobre la primera pared en los primeros minutos del transitorio) varía notablemente según se emplee un grosor en la protección de grafito u otro. En los análisis presentados aquí, se tomó, por recomendación del NET-Team, un espesor de grafito de 2 cm.

A continuación describimos brevemente el circuito de refrigeración propuesto para la primera pared interna, que se muestra de modo esquemático en la figura 8.16.

#### Características generales.

Cada uno de los paneles IFW-Divertor es refrigerado por una serie de tubos en forma de U que se desarrollan en dirección poloidal. Estos tubos están conectados a dos cabezales colectores (uno para la rama fría y otro para la rama caliente). Como en cada segmento del reactor hay 3 paneles, se tienen 6 cabezales por segmento (3 fríos y 3 calientes). En cada segmento, los tres tubos correspondientes a cada lado se unen en un colector de manutención por segmento, situado ya fuera de la contención biológica. Finalmente, los 16 colectores de mantenimiento de la rama fría se unen en un único colector anular que es alimentado por un único sistema de bombeo. Análogamente, los 16 colectores calientes se unen en otro colector toroidal único que alimenta un intercambiador de calor. El sistema se completa con un presurizador, cuya misión es atenuar los transitorios de presión sobre el circuito. La parte externa del circuito es completamente convencional, y sus condiciones de funcionamiento nominal serán presentadas



Figura 8.15: Carga térmica sobre el componente IFW (NET-DN).

más adelante. El parámetro fundamental para conseguir el efecto de convección natural deseado es la diferencia de cota entre la fuente de calor (el toroide) y el pozo frío (el intercambiador de calor). Tal distancia es de aproximadamente 25 m en el diseño propuesto.

#### Componentes específicos para el reactor de fusión.

El colector toroidal consiste en un gran tubo de diámetro interno  $\sim 0.7 m$  y longitud total  $\sim 100 m$ , conectado a los 16 tubos de ingreso (o de salida), y a un tubo de salida (o de ingreso) de  $\sim 0.6 m$  de diámetro. Debido a sus grandes dimensiones y a la diferente distribución de la velocidad del fluído en sus diferentes puntos, el comportamiento termohidraulico de estos colectores debe ser investigado experimentalmente antes de fijar el diseño de manera definitiva.

El panel de primera pared interna-divertor constituye el elemento que trabaja bajo condiciones más severas. debido a la interacción plasma-pared, y al flujo térmico extremadamente elevado en la región divertora ( $\sim 10 MW/m^2$ ). Se adoptó como diseño de referencia la propuesta de JRC-Ispra, que se muestra en la figura 8.9. En cada



Figura 8.16: Disposición del circuito de refrigeración para IFW (NET-DN).

Carga superficial			Carga volur	nétrica	
Divertor superior	MW	40	Densidad de calor	$MW/m^3$	15
Divertor inferior	MW	40	Volumen total IFW	$m^3$	7
IFW	MW	20			
Total	MW	100	Total	MW	105
POTENCIA TOTA	L IFW		•	MW	205
POTENCIA POR P	ANEL			MW	4.27

Tabla8.6: Potencia nominal en el circuito IFW.

panel existen 42 tubos en forma de U de acero inoxidable que atraviesan la matriz de cobre, revestida a su vez por una capa de grafito de 20 mm de espesor, separada algunos milímetros de la superficie de cobre. Esta solución integrada limita la vida de la primera pared, reduciéndola a la de la placa divertora, pero simplifica notablemente la manutención y la disposición de los circuitos de refrigeración.

Como paso previo al análisis del transitorio accidental, se deben estudiar las condiciones nominales de funcionamiento en régimen permanente del circuito propuesto. Las únicas condiciones de contorno conocida son de tipo *integral*: se conoce la potencia total que debe evacuarse, así como las temperaturas de entrada y salida de los tubos de refrigeración en los paneles IFW-Divertor. El análisis termohidraulico fué realizado con la ayuda del código CATHARE (Code for Analysis of Thermohydraulics during an Accident of Reactor and Safety Evaluation) [21]. Este programa de cálculo ha sido desarrollado por un equipo mixto Eléctricité de France-Commisariat á l'Energie Atomique-FRAMATOME en Grenoble. Es un modelo de resolución de las seis ecuaciones básicas (presión, entalpía líquida y del vapor, velocidad del líquido y del vapor y fracción de vapor) que aparecen en el estudio monodimensional de las ecuaciones de flujo bifásico. El régimen permanente se calcula como límite de un pseudo-transitorio de equilibrio, acoplado con un procedimiento iterativo sobre ciertas magnitudes sobre las cuales puede actuar libremente el analista (geometría, características de la bomba, etc.).

La discretización en elementos llevada a cabo sobre el circuito propuesto se muestra

en la figura 8.17.

La potencia total evacuada se desglosa en la tabla 8.6. Los resultados del estudio en régimen permanente se muestran en la tabla 8.7, concerniente a las condiciones de funcionamiento del circuito de refrigeración en los paneles IFW-Divertor. Las características del presurizador se resumen en la tabla 8.8. Este componente ha sido sobredimensionado de modo que se evite su vaciado incluso si la temperatura media del refrigerante en todo el circuito es de  $25 \, {}^{0}C$ .

Los parámetros correspondientes al intercambiador de calor se listan en la tabla 8.9. Se adoptó una hipótesis simplificadora para evitar una modelización más costosa desde el punto de vista computacional del lado secundario, suponiendo que éste consiste en una gran masa de agua a una temperatura constante de 15 °C. Esto supone una suposición optimista, concentrándose el análisis en la fiabililidad del diseño del circuito primario. El coeficiente de intercambio térmico en los tubos del primario es determinado por CATHARE identificando primeramente el régimen de flujo y aplicando después la correlación del tipo Nu = f(Re, Pr) que liga el número de Nusselt con los números de Reynolds y Prandtl, así como al resto de las propiedades dependientes del fluído y de la pared aplicable a cada categoría de flujo. Para flujo monofásico, se aplica la conocida correlación de Colburn. El coeficiente de intercambio térmico en el lado secundario se calculó utilizando la correlación aplicable a convección libre  $h_s = 0.17 K/d(GrPr)^{0.33}$ , donde K es la conductividad térmica del tubo, d es el diámetro externo del tubo, y Gr y Pr representan los números de Grashof y Prandtl, respectivamente. La tabla 8.10 recoge, por su parte, los parámetros relativos al sistema de bombeo.

La secuencia accidental analizada se origina cuando tienen lugar simultáneamente la parada en la bomba y la extinción del plasma. La deposición de calor sobre el tubo viene entonces dada única y exclusivamente por la curva de la figura 8.15. No se hace ninguna otra suposición sobre la actuación de sistema de emergencia alguno. Las condiciones de intercambio térmico en el lado secundario del intercambiador de calor se suponen constantes e iguales a las nominales durante todo el transitorio. Se ha realizado un estudio paramétrico sobre el valor de la inercia de la bomba que permite



Figura 8.17: LOFA IFW NET-DN: Subdivisión del circuito de refrigeración para su análisis con CATHARE.

Tabla8.7: Datos termohidraulicos del panel IFW/Divertor.				
Tubos en U por panel		42		
Numero total de tubos en IFW		2016		
Diámetro interior	mm	7		
Diámetro exterior	mm	8		
Distancia mínima entre centros de los tubos	mm	11		
Presión de ingreso	MPa	4		
Temperatura de ingreso	$^{\circ}C$	50		
Temperatura de salida	$^{\circ}C$	130		
Temperatura de saturación al ingreso	$^{\circ}C$	250		
Velocidad del refrigerante en el tubo en U	m/s	8		
Caída de presión en el tubo en U	MPa	1.7		
Flujo másico en cada tubo en U	Kg/s	0.3		

Tabla8.8: Datos del presurizador.

Volumen total	$m^3$	20		
Sección horizontal	$m^2$	2		
Altura	m	10		
Nivel nominal del líquido	m	6		
Espesor de la pared de AISI 316	mm	50		
Tabla8.9: Parámetros del intercambiad	lor de calor.			
---	-----------------------	-------	--	--
Potencia nominal	MW	205		
Temperatura de ingreso lado primario	$^{\circ}C$	130		
Temperatura de salida lado primario	$^{\circ}C$	50		
Temperatura lado secundario	$^{\circ}C$	15		
Salto de temperaturas logarítmico medio	$^{\circ}C$	67		
Diámetro interno de los tubos primarios en	mm	11		
U				
Número de tubos en U en el primario		1715		
Arae total de intercambio térmica	$m^2$	3630		
Longitud total tubos primario	m	57		
Coeficiente de película primario	$W/m^2 \cdot \circ C$	22600		
Coeficiente de película secundario $W/m^2 \cdot C$				
Coeficiente de intercambio térmico global $W/m^2 \cdot C$				

Tabla8.10: Parámetros del sistema de bombeo.

Altura	$m - H_2O$	240
Caudal	$m^3/s$	0.62
Velocidad de giro	rpm	1476
Velocidad de sincronismo	rpm	1488
Par	$N \cdot m$	9330
Inercia	$Kg \cdot m^2$	$100 \div 500$



Figura 8.18: LOFA IFW NET-DN: Flujo másico reducido.



Figura 8.19: LOFA IFW NET-DN: Velocidad del líquido a la salida del tubo en U.

amortiguar las severas condiciones termohidraulicas durante los primeros segundos del transitorio. Se adoptaron 3 valores típicos para este parámetro:  $I = 100 Kg \cdot m^2$ ,  $I = 200 Kg \cdot m^2$  e  $I = 500 Kg \cdot m^2$ . Los resultados más relevantes se muestran en las figuras 8.18-8.23.

La figura 8.18 muestra el flujo másico normalizado a su valor nominal en el conducto de impulsión de la bomba, para los tres valores de la inercia seleccionados. La figura 8.19 muestra la velocidad del líquido a la salida del panel IFW-Divertor en función del tiempo. El pico de velocidad que se observa en la curva correspondiente a la inercia menor (~ 40 s tras la iniciación del transitorio) se debe al efecto de arrastre de la fase vapor durante una breve etapa de ebullición del agua, que puede por otra parte verse de forma más evidente en la figura 8.20, donde se muestran las temperaturas de salida del panel (líneas llenas) y las correspondientes temperaturas de saturación (líneas de trazos), como función del tiempo. Puede apreciarse que con una inercia  $I = 200 Kg \cdot m^2$ , la curva de temperatura roza la correspondiente temperatura de saturación, evitándose



Figura 8.20: LOFA IFW NET-DN: Temperaturas del líquido y de saturación a la salida del tubo en U.



Figura 8.21: LOFA IFW NET-DN: Presión a la salida del tubo en U.



Figura 8.22: LOFA IFW NET-DN: Nivel del líquido en el presurizador.



Figura 8.23: LOFA IFW NET-DN: Perfil de temperaturas a lo largo del tubo en U para diferentes tiempos.

la ebullición por poco. Con  $I = 500 Kg \cdot m^2$ , el margen de subenfriamiento mínimo es de  $50 \, {}^{0}C$  se alcanza al cabo de ~  $300 \, s$ . A partir de  $t \sim 600 \, s$ , la temperatura en el punto más caliente del circuito decrece más rápidamente que la temperatura de saturación, controlada de modo eficaz por el presurizador, de modo que el circuito termohidraulico se enfría lentamente sin ulteriores problemas de cambio de fase.

La figura 8.21 muestra la evolución de la presión del circuito, medida igualmente a la salida del tubo refrigerante del panel IFW-Divertor. La excursión de presión más importante, correspondiente a la inercia más baja  $I = 500 Kg \cdot m^2$ , es de ~ 0.5 MPa. En los otros dos casos no se aprecian sobrepresiones considerables, de modo que se puede descartar la posibilidad de rotura de los tubos, con las consiguientes implicaciones mecánicas y químicas. La figura 8.22 muestra la evolución del nivel de agua en el presurizador en función del tiempo. Con inercia baja, un flujo neto de agua entra en este componente durante los primeros minutos de la secuencia accidental. Esto se debe a que la potencia residua no disminuye tan rápidamente como la velocidad del refrigerante. Cuando la velocidad alcanza un régimen cuasi permanente, el presurizador se vacía lentamente debido al enfriamiento global de la masa de agua en todo el circuito.

Finalmente, en la figura 8.23 se muestra la distribución de temperaturas a lo largo de toda la longitud del tubo refrigerante, en los puntos interior y exterior, para diversos instantes de tiempo, correspondientes al segundo caso  $(I = 200 Kg \cdot m^2)$ .

A continuación se realizó un intento de extrapolación de los resultados mostrados precedentemente a una configuración de un reactor *de potencia*. En efecto, el inter-

Presión primario	MPa	16.5
Incremento temperatura primario	$^{\circ}C$	50
Temperatura entrada al panel IFW-Divertor	$^{\circ}C$	275
Temperatura salida del panel IFW-Divertor	$^{\circ}C$	325
Temperatura de saturación de entrada	$^{\circ}C$	350
Subenfriamiento a la entrada	$^{\circ}C$	75
Densidad del refrigerante a la entrada	$Kg/m^3$	774.5
Velocidad del refrigerante a la entrada	m/s	8

Tabla8.11: Datos termohidraulicos (Configuración de potencia).

cambiador de calor utilizado como pozo frío en el análisis precedente (con temperatura del líquido constante en el lado secundario) no tiene en cuenta la necesidad de producir el vapor de agua necesario para alimentar una turbina. El propósito de esta extrapolación es obtener un prediseño del circuito de refrigeración que permita la conversión de los 205 MW térmicos asociados al conjunto IFW-Divertor en energía eléctrica. A continuación se presentan las modificaciones necesarias efectuadas en el circuito para conseguir este objetivo.

#### Condiciones termohidraulicas impuestas.

Para producir vapor de cierta calidad en el lado secundario del pozo frío, es necesario adoptar valores más altos para la presión y temperatura de funcionamiento en el lado primario. En particular, la presión del circuito debe incrementarse de  $\sim 20 bar$ a  $\sim 150 bar$ . Esto plantea, naturalmente, nuevos y serios problemas asociados a la resistencia mecánica de los tubos, requiriéndose un nuevo diseño para el panel IFW-Divertor, que se muestra en la figura 8.24. Fenoglio [51] realizó el cálculo mecánico de dimensionamiento para tal diseño, que incorpora una doble serie de tubos en forma de U, de diámetro inferior al utilizado en la versión estándar NET-DN. La tabla 8.11 recoge las condiciones de trabajo nominales del circuito termohidraulico en esta configuración de potencia. Por otra parte, las principales características del diseño del panel IFW-Divertor modificado para trabajar a alta presión se muestran en la tabla 8.12.

Características del generador de vapor.

Los principales parámetros del generador de vapor resultante del diseño (ver en el trabajo de Fenoglio [51] para todos detalles de cálculo) se presentan en la tabla 8.13.



Figura 8.24: LOFA IFW NET-DN: Configuración de potencia. Detalle de la sección IFW.

Tabla8.12: Datos sobre el panel IFW-Divertor (Configuración de potencia).

NT / 1 / 1		<u> </u>
Numero de tubos por panel		91
Número total de tubos en IFW		4368
Diámetro interno	mm	6
Espesor de la pared del tubo	mm	0.5
Diámetro exterior	mm	7
Longitud poloidal	m	21



Figura 8.25: LOFA IFW NET-DN: Configuración de potencia. Generador de vapor.

Las características de este componente (figura 8.25) resultan bastante parecidas a las de un generador de vapor convencional utilizado en un reactor de agua a presión (PWR).

Hipótesis de cálculo sobre el lado secundario.

El lado secundario del generador de vapor se analizó en este caso con más detalle que en el caso correspondiente al intercambiador agua-agua presentado precedentemente. El caudal de agua de alimentación al lado secundario debe ser suministrado al programa de cálculo CATHARE de modo realista, así como el caudal de vapor a la salida.

Como se supone un accidente de pérdida de flujo debido a un fallo en el sistema de energía eléctrica en toda la planta, la bomba de alimentación al lado secundario se supone igualmente averiada. Con el fin de realizar un cálculo realista, se supone que la bomba del secundario posee una inercia bastante elevada  $(I = 3000 Kg \cdot m^2)$  y se obtiene una ley de decrecimiento del flujo másico en el secundario por extrapolación (ajustando a una curva exponencial) de los resultados obtenidos en el primario. Esta ley se utiliza como dato para simular el comportamiento del secundario durante el análisis. El efecto de la inercia en el secundario desaparece al cabo de ~ 500 s, cuando el valor del caudal másico del agua de alimentación al secundario tiene un valor igual al

Tablao.15. Datos del generador o	le vape	<u>n.</u>
Potencia intercambiada	MW	207.4
Presión media lado primario	bar	147
Presión lado secundario	bar	40
Temperatura ingreso lado primario	°C	325
Temperatura salida lado primario	°C	275
Caudal másico lado primario	Kg/s	760
Caudal másico lado secundario	Kg/s	102
Temperatura del vapor	°C	250
Numero de tubos		1610
Diámetro exterior de los tubos	mm	18
Superficie total de intercambio	$m^2$	1275
Longitud total del tubo	m	14
Diámetro del haz de tubos	m	1.8
Diámetro exterior del GV (Haz)	m	2.2
Diámetro externo (Cúpula)	m	2.9
Altura del haz de tubos	m	6.5
Altura de la cúpula	m	6.5

Tabla8.13: Datos del generador de vapor

4% de su valor nominal. A partir de este instante, el flujo másico se supone controlado por un sistema de alimentación auxiliar capaz de proporcionar el 3% del valor nominal al cabo de 1000 s, decreciendo linealmente hasta el 1.5 % al cabo de 5000 s, valor que se mantiene constante para t > 5000 s.

Por cuanto respecta al flujo de vapor *saliente* del generador, se supone la existencia de una válvula de laminación capaz de cerrarse mediante una ley sobre el caudal, de modo que siga la misma curva de decrecimiento que el calor residual que se debe eliminar (figura 8.15).

Análisis del transitorio en configuración de potencia.

Los resultados se muestran en las figuras 8.26-8.31. La inercia de la bomba del circuito primario se supuso de valor  $I = 1500 Kg \cdot m^2$ , que es en este caso el valor umbral para poder evitar la ebullición en el punto más caliente de los tubos de refrigeración del panel IFW-Divertor. La presión máxima que se alcanza en el secundario del generador de vapor es de 73 bar, bastante por debajo de los límites de seguridad en centrales PWR estándar. La figura 8.26 muestra la evolución de la temperatura a la salida



Figura 8.26: LOFA IFW NET-DN (Configuración de potencia): Temperaturas del líquido y de saturación a la salida del tubo en U.

del panel, así como la correspondiente temperatura de saturación. La evolución de la presión en tres puntos seleccionados del circuito (salida del panel, presurizador y conducto de aspiración de la bomba) se representa gráficamente en la figura 8.27. Puede apreciarse que la sobrepresión sobre el valor de funcionamiento en régimen permanente es bastante limitada. Las figuras 8.28 y 8.29 muestran la evolución a largo término de la presión y de la masa (en ambas fases) en el lado secundario del generador de vapor. La presión aumenta en los primeros instantes para alcanzar un valor casi doble del correspondiente al régimen permanente, para decrecer lentamente después. El nivel de agua en el presurizador en función del tiempo se representa en la figura 8.30.

Finalmente, uno de los resultados más significativo desde el punto de vista de la seguridad pasiva se muestra en la figura 8.31, donde se representa la velocidad del agua de refrigeración a la entrada del panel. El mecanismo de convección natural es capaz de mantener en circulación el agua de refrigeración, con una velocidad asintóticamente constante de valor  $\sim 0.5 m/s$  incluso 3200 s después de la parada de la bomba. Este cálculo confirma los resultados obtenidos por Klippel [77] en el análisis del circuito de refrigeración de la envoltura reproductora de litio-plomo, donde, con diferencias de nivel entre la fuente de calor (el material fértil) y el intercambiador (pozo frío) oscilando entre 11 y 15 m, se predijo una velocidad residual debida a la convección natural del orden del 6 % del valor nominal de la velocidad en funcionamiento a pleno régimen, valor que se mantiene prácticamente constante a partir de los 600 s tras la parada del sistema de bombeo.

Como conclusión de este análisis sobre las condiciones de funcionamiento del panel



Figura 8.27: LOFA IFW NET-DN (Configuración de potencia): Transitorio de presión en el circuito.



Figura 8.28: LOFA IFW NET-DN (Configuración de potencia): Presión en el lado secundario del generador de vapor.



Figura8.29: LOFA IFW NET-DN (Configuración de potencia): Inventario de masa en el secundario del generador de vapor.



Figura 8.30: LOFA IFW NET-DN (Configuración de potencia): Nivel del líquido en el presurizador.



Figura 8.31: LOFA IFW NET-DN (Configuración de potencia): Velocidad del refrigerante en la entrada al panel IFW-Divertor.

IFW-Divertor para aprovechamiento *efectivo* de la energía térmica depositada, se resalta que el componente crítico es de nuevo el conjunto primera pared-divertor, debido a las condiciones de temperatura y presión extraordinariamente severas en las cuales debe trabajar este elemento (presiones de operación en los tubos de refrigeración del orden de 150 *bar* parecen a priori difíciles de obtener).

Desde el punto de vista de la seguridad tras un accidente de pérdida de flujo, la combinación entre la acción a corto término del refrigerante todavía en movimiento debido al efecto de convección natural más la radiación térmica como fenómeno a largo término parecen mecanismos pasivos de remoción del calor lo suficientemente eficientes como para garantizar la integridad de la instalación siempre y cuando se produzca una extinción del plasma en un tiempo breve ( $\sim 1 s$ ), bien mediante un sistema de seguridad auxiliar, bien de forma natural como consecuencia del accidente mismo (pérdida de corriente en las bobinas, enfriamiento brusco del plasma debido a las impurezas, etc.).

### 8.4 Accidentes de Pérdida de Refrigerante en NET-SB.

En las secciones precedentes se analizaron algunas secuencias accidentales tomando como reactor de referencia NET-DN, con envoltura reproductora de litio-plomo. Como se apuntó, tal elección, a pesar de las ventajas en términos de eficiencia neutrónica y como simplicidad en su diseño, adolece de graves inconvenientes debido a que las elevadas temperaturas de trabajo en el fluído refrigerante obligan a presurizar el circuito, siendo así más vulnerable a accidentes de tipo LOCA (ver en Cha et al. [22] las consideraciones generales que conducen a la selección de la envoltura reproductora de metales líquidos, así como las líneas de diseño óptimas para su eficaz refrigeración).

En esta sección se presentan algunas estimaciones de las consecuencias térmicas de secuencias accidentales de tipo LOCA y LOFA para el reactor NET en la versión 'Shielding Blanket', que se presentó en la sección 8.1.

A diferencia del análisis correspondiente a NET-DN presentado en la sección 8.2, en esta sección se calculan las temperaturas de régimen permanente correspondientes al funcionamiento del reactor en condiciones nominales. Por otra parte, la experiencia obtenida en la sección precedente sobre el comportamiento de la velocidad del refrigerante como consecuencia de un LOFA permite prestar mayor atención a la excursión de temperatura motivada en los circuitos funcionantes por un accidente en un circuito de refrigeración adyacente.

Para el análisis de la distribución de temperatura en régimen permanente, se utilizaron los datos provinientes del análisis neutrónico monodimensional (con geometría axisimétrica) utilizado por en el NET-Team por Verschuur y Cornelissen [160]. La figura 8.32 muestra este modelo de capas concéntricas, delimitado por la vasija de vacío interna (IVV) y extrena (OVV). La primera pared interna (IFW) se halla revestida de una capa de grafito, como en el caso NET-DN, y está en contacto directo con la envoltura de blindaje interna (ISB), a su vez subdividido en seis zonas de acero inoxidable AISI-316 (SFI1, SRI1, SFI2, SRI2, SFI3 y SRI3). La primera pared externa (OFW) está igualmente protegida del plasma por un revestimiento de grafito, pero se encuentra aislada de las cuatro capas externas de la envoltura de blindaje (OSB), cada una de ellas dividida en una zona anterior (SFO1, SFO2, etc.) y otra posterior (SBO1, SBO2,



Figura 8.32: NET-SB: Modelo homogeneizado de capas concéntricas.

etc.). Las dimensiones de cada una de estas zonas se muestran en la figura expresadas en milímetros.

Este cálculo proporcionó los datos necesarios sobre la densidad de deposición de energía para cada una de las zonas consideradas. Esta distribución de densidad de potencia térmica se muestra en las figuras 8.33 (parte interna) y 8.34 (parte externa), desglosadas en las aportaciones debidas a la irradiación  $\gamma$  (g) y al bombardeo neutrónico (n). En las capas sólidas, la densidad de potencia se debe mayoritariamente a la interacción  $\gamma$ , mientras que en los canales de refrigeración (CI1, CO1, etc.), la deposición de calor más importante se debe a la moderación y absorción neutrónica.

En el cálculo de la distribución de temperaturas de régimen permanente, la densidad de calor depositada en el agua se añade a las capas sólidas inmediatas, simplemente sumando a la generación volumétrica correspondiente la cantidad:

$$x = \frac{v_{cc}h_{cc}}{2v_{al}} \tag{8.1}$$

donde:

 $v_{cc}$  = volumen del canal de refrigeración homogeneizado







Figura 8.34: NET-SB: Deposición de calor en régimen permanente (parte externa).

Componente	Régimen Permanente	1 s	10 m	60 m	2 h	3 h
SRI3	2.309e6	2.126e4	1.883e4	1.524e4	1.232e4	1.010e4
SFI3	3.309e6	3.468e4	3.032e4	2.452e4	1.984e4	1.629e4
SRI2	5.162e6	4.858e4	4.223e4	3.413e4	2.761e4	2.266e4
SFI2	7.205e6	7.799e4	6.733e4	5.435e4	4.394e4	3.605e4
SRI1	1.035e7	1.022e5	8.775e4	7.079e4	5.721e4	4.691e4
SFI1	1.370e7	1.690e5	1.454e5	1.171e5	9.434e4	7.702e4
FWI	1.200e7	2.800e5	2.418e5	1.946e5	1.561e5	1.258e5
FWO	1.500e7	3.851e5	3.252e5	2.611e5	2.098e5	1.709e5
SFO1	1.838e7	2.321e5	1.961e5	1.576e5	1.271e5	1.040e5
SRO1	1.475e7	1.596e5	1.351e5	1.087e5	8.790e4	7.206e4
SFO2	1.091e7	1.341e5	1.141e5	9.189e4	7.428e4	6.091e4
SRO2	8.894e6	9.159e4	7.863e4	6.343e4	5.128e4	4.206e4
SFO3	5.836e6	7.167e4	6.186e4	4.994e4	4.039e4	3.314e4
SRO3	3.978e6	4.335e4	3.779e4	3.055e4	2.471e4	2.028e4
SFO4	2.612e6	3.158e4	2.775e4	2.245e4	1.815e4	1.489e4
SRO4	2.028e6	2.167e4	1.926e4	1.559e4	1.259e4	1.031e4

Tabla8.14: Tasa de generación volumétrica de calor  $(W/m^3)$ 

 $h_{cc}$  = deposición de calor en el canal de refrigeración homogeneizado

 $v_{al} =$  volumen de la capa adyacente

El mismo modelo geométrico fué utilizado después por Ponti [114] para calcular el calor residual debido a activacion y transmutación en los materiales. En la tabla 8.14 se muestra, en función del tiempo, la generación térmica producida en cada zona del reactor.

A partir de este modelo geométrico, la figura 8.35 muestra la discretización espacial en una dimensión realizada, con la correspondiente numeración de los elementos. Los nodos 14, 24, y 34 representan la temperatura media del refrigerante en los circuitos de refrigeración de la envoltura de blindaje interna. Los nodos 42 y 46 representan la temperatura media de los circuitos de refrigeración de la primera pared interna. De modo análogo, los nodos 65 y 69 representan el circuito de refrigeración de la primera pared externa y los nodos 78, 89, 100, y 111 corresponden al circuito de refrigeración de la envoltura de blindaje externa.

Con este modelo, las primeras paredes interna y externa no se homogeneizan, nece-



Figura 8.35: NET-SB: Modelo de cálculo axisimétrico.

sitándose un factor de corrección para tener en cuenta el volumen efectivo. Además de la generación volumétrica en los componentes, se supone que la carga superficial debido al quemado del deuterio-tritio constituye un flujo térmico adicional nominal aplicado sobre las primeras paredes de  $0.15 MW/m^2$ . Esta carga superficial es un orden de magnitud inferior al flujo térmico sobre las placas divertoras, encargadas de recoger todos los iones pesados presentes en el plasma. Esta carga superficial desaparece simultáneamente a la extinción del plasma. La generación volumétrica de calor en el revestimiento de grafito interno es de  $9 MW/m^3$ , siendo  $12.6 MW/m^3$  el correspondiente valor para el grafito externo. El calor de activación en este material resulta prácticamente nulo. Las cargas térmicas correspondientes al régimen permanente debidas al quemado del plasma y a la interacción de neutrones y radiación  $\gamma$  con los materiales estructurales desaparecen cuando se inicia la secuencia accidental.

Se adopta una función lineal para el decrecimiento de las cargas térmicas entre el tiempo de iniciación y el tiempo de extinción total del plasma. Aunque se supone que este tiempo es muy corto, no existen todavía datos fiables sobre cual pudiera ser un valor realista de este parámetro. En un reciente estudio, Massidda y Kazimi [90] consideran dos hipótesis: extinción brusca del quemado en t = 0 s y decrecimiento

lineal desde las condiciones nominales hasta cero en 5 s. En este análisis se adoptó un tiempo de extinción de 1 s. Como veremos más adelante en el capítulo 9, este parámetro adquiere una importancia capital cuando se considera la pérdida de refrigerante en las placas divertoras, que son con gran diferencia el componente más crítico con respecto a este tipo de accidentes.

Mediante el modelo monodimensional propuesto resulta imposible tener en cuenta de modo detallado el efecto de los divertores. En lugar de homogeneizar el problema en la dirección poloidal, se prefiere simplemente no tener en cuenta este elemento, que será posteriormente objeto de un estudio más detallado, y suponer que la secuencia accidental no implica pérdida de capacidad de refrigeración en este componente.

La base de este estudio de seguridad se encuentra en la propuesta de François [57] sobre los parámetros de diseño para el sistema de refrigeración del reactor NET-SB. El balance de potencia desglosado por componentes que se presenta en la tabla 8.15 concuerda con los resultados obtenidos con el modelo numérico, sin tener en cuenta, como hemos apuntado más arriba, las placas divertoras, considerando una altura media de la malla cilíndrica de  $\sim 6 m$ .

La disposición de los circuitos de refrigeración adoptada aquí se fundamenta igualmente en [57]. En la tabla 8.16 se presenta la llamada opción B para los circuitos de refrigeración. Existe un circuito de refrigeración único para cada uno de los siguientes componentes: OFW, IFW, divertor superior, divertor inferior, ISB, y VV. Por su parte, la envoltura de blindaje externa dispone de dos circuitos que funcionan en paralelo: uno para enfriar las placas 1 y 3, y el segundo para la placa 2 y la placa posterior (BP). En la tabla 8.17 se presentan los flujos másicos nominales y otras características termohidraulicas de interés en régimen permante. En este análisis se supuso una presión nominal de funcionamiento de 14 bar en todos los circuitos. La temperatura de ingreso del refrigerante es de 100 °C en todos los circuitos. Los flujos másicos propuestos en la tabla 8.16 se utilizaron para calcular el número de tubos total por circuito de refrigeración, adoptando una velocidad del refrigerante de 4m/s en condiciones de funcionamiento nominal. La tabla 8.18 recoge las características de la modelización de cada capa refrigerante.

El modelo involucra dos materiales sólidos: acero inoxidable y grafito. Los valores de

Tabla8.15: NET-SB: Distribución de Potencia (MW).

.

Componente	Potencia Nominal
Primera Pared Externa	150
Primera Pared Interna	80
Divertor	210
Envoltura de Blindaje Externa	350
Envoltura de Blindaje Interna	120
Vasija de Vacío Externa	50
Vasija de Vacío Interna	20
TOTAL	980

Tabla8.16: NET-SB: Disposición de los circuitos de refrigeración (opción B).

Circuito	Modo	Componente	Potencia	Flujo Másico	Temperatura	Presión
			(MW)	(Kg/s)	(C)	(bar)
1	100%	OFW	150	890	$\sim 100$	14
2	100%	IFW	80	475	$\sim 100$	14
3	100%	UD	105	620	~ 100	14
4	100%	LD	105	620	$\sim 100$	14
5	100%	ISB	120	710	$\sim 100$	14
6	50%	OSB	175	1040	$\sim 100$	14
7	50%	OSB	175	1040	$\sim 100$	14
8	100%	VV	70	850	$\sim 50$	14

Tabla8.17: NET-SB: Modelo de Refrigeración.

Elemento	Perímetro mojado	Velocidad	Número total
	(mm)	(m/s)	de tubos
ISB1 (elemento 34)	10.5	4	1070
ISB2 (elemento 24)	14.5	4	197
ISB3 (elemento 14)	19.7	4	197
IFW1 (elemento 46)	6.0	4	2192
IFW2 (elemento 42)	6.0	4	2192
OFW1 (elemento 65)	6.0	4	4108
OFW2 (elemento 69)	6.0	4	4108
OSB1 (elemento 78)	9.2	4	2041
OSB3 (elemento 100)	15.0	4	767
OSB2 (elemento 89)	11.0	. 4	1428
OSB4 (elemento 111)	16.3	4	650

	AISI-316	Grafito
Conductividad térmica $(W/mK)$	11.6 + 0.0125T	40.
Calor Específico $(J/Kg)$	$80.14 + 1.842T - 0.00206T^2$	1900.
Emisividad	0.8	0.85
Densidad $(Kg/m^3)$	$8084.1 - 0.421T - 3.89 \cdot 10^{-5}T^2$	1880.

Tabla8.18: NET-SB: Propiedades de los materiales (T = Kelvin)

las emisividades de estos materiales a altas temperaturas son difíciles de establecer, pues dependen en gran medida del tratamiento superficial aplicado. Nótese, sin embargo, que la emisividad juega un papel bastante importante en este tipo de cálculos, siendo los resultados numéricos bastante sensibles a pequeñas modificaciones en este parámetro. Las propiedades materiales utilizadas en este cálculo se muestran en la tabla 8.19. En primer lugar se analizaron accidentes de tipo LOCA en varios circuitos de refrigeración. Se supone una desaparición brusca y total del agua de refrigeración en los tubos. El espacio ocupado por el refrigerante se seca y el único mecanismo de transmisión del calor es la conducción térmica a través del acero entre tubos consecutivos. En este caso, interesa estudiar la respuesta en los tubos de refrigeración que permanecen en funcionamiento.

Posteriormente se analizaron secuencias de tipo LOFA. En este caso, el refrigerante permanece en los tubos, pero el flujo másico nominal decrece debido a la pérdida del sistema de bombeo. La ley de decrecimiento de la velocidad del refrigerante se inspira en los resultados obtenidos en el análisis global del circuito de refrigeración NET-DN presentado en la sección anterior. La velocidad residual del refrigerante debido al efecto termosifón de convección natural se estima, durante el período de tiempo inmediatamente posterior a la parada de la bomba, alrededor de un 10 % de la velocidad nominal. En estos casos, el principal interés es analizar la excursión de temperatura en el agua para poder predecir si se produce o no ebullición en los tubos y prevenir así la formación de puntos de quemado del material ('hot spots' en la literatura en inglés).

Se presentan los resultados correspondientes a cinco casos LOCA, en los siguientes circuitos:

A1) circuito IFW (2 en la tabla 8.16).

A2) circuito OFW (1 en la tabla 8.16).



Figura 8.36: NET-SB: Campo de temperaturas nominal con condiciones adiabáticas.

A3) circuito ISB (5 en la tabla 8.16).

A4) 50% circuito OSB (1 en la tabla 8.16).

A5) Todos los circuitos.

En los casos A1, A2, A3, y A4 la vasija de vacío se supone bien refrigerada, asignándole una temperatura constante  $(80 \, {}^{0}C)$  como condición de contorno. En el caso A5 se suponen condiciones de contorno globales adiabáticas.

Los casos LOFA que se consideran son los siguientes:

B1) LOFA en el circuito IFW.

B2) LOFA en el circuito OFW.

B3) LOFA en todos los circuitos.

Como en la hipótesis de LOCA, en los casos B1 y B2 la temperatura de los contornos exterior e interior se mantiene fija a  $80 \,{}^{0}C$ , pero se consideran condiciones adiabáticas en el caso B3.

Las figuras 8.36 y 8.37 muestran los campos de temperaturas obtenidos en el análisis del régimen permanente. La primera de ella corresponde a condiciones de contorno globales adiabáticas, mientras que en la segunda se supuso la temperatura externa del reactor igual a  $80^{\circ}C$ .

La única diferencia apreciable que se observa es, lógicamente, en la temperatura de la vasija de vacío, que alcanza los  $176 \,{}^{0}C$  en su parte interna (IVV) y  $142 \,{}^{0}C$  en la parte externa (OVV) trabajando en condiciones adiabáticas. La temperatura en el grafito alcanza un valor ~  $1500 \,{}^{0}C$  en ambos casos.

Se realizaron varios cálculos para analizar la influencia del valor de la emisividad del grafito en la distribución de temperaturas de régimen permanente en los componentes



Figura 8.37: NET-SB: Campo de temperaturas nominal con contorno exterior a 80 C.

del reactor. Su influencia sobre el transitorio se manifiesta principalmente a través de la diferente temperatura de funcionamiento nominal alcanzada en los revestimientos de grafito. Adoptando una emisividad de 0.75, la temperatura obtenida en el grafito enfrentado a las respectivas primeras paredes fué de  $1459 \,{}^{0}C$  para el grafito interno y  $1441 \,{}^{0}C$  en el externo. Con  $\epsilon = 0.95$ , las temperaturas obtenidas en los mismos puntos fueron  $1376 \,{}^{0}C$  y  $1362 \,{}^{0}C$ , respectivamente. Con la emisividad estándar adoptada,  $\epsilon = 0.85$ , las temperaturas de régimen en los mismos puntos resultan ser  $1414 \,{}^{0}C$  y  $1398 \,{}^{0}C$ .

Con respecto a los tubos de enfriamiento, la tabla 8.20 muestra los incrementos de temperatura en dirección poloidal para cada uno de los circuitos de refrigeración, por cada 0.5 m de altura del cilindro.

#### Accidentes LOCA

La figura 8.38 corresponde al caso A1. En la figura 8.38a se representa gráficamente la evolución de la temperatura en el revestimiento de la primera pared interna y en el punto más caliente de la IFW. El calor almacenado en el grafito tarda alrededor de 3 hen descargarse por radiación. La figura 8.38b muestra la temperatura en algunos puntos de la IFW: punto más caliente, pared seca del tubo más próximo al plasma y el punto de contacto entre IFW e ISB. El componente no alcanza los 400 °C, pero se produce una excursión de temperatura notable (alrededor de 180 °C) en los primeros 3 min. La evolución de la temperatura en el canal de refrigeración más próximo (ISB1) se presenta en la figura 8.38c, donde se aprecia que no se produce excursión de temperatura en el agua de refrigeración. La figura 8.38d muestra la evolución del campo de temperaturas en todo el reactor.





Tabla8.19: NET-SB: Salto térmico en condiciones nominales en los circuitos de refrigeración.

Circuito	Incremento de temperatura
	por cada 0.5 metros de altura
	C
ISB3 (elemento 14)	1.74
ISB2 (elemento 24)	4.57
ISB1 (elemento 34)	2.27
IFW2 (elemento 42)	2.68
IFW1 (elemento 46)	5.39
OFW1 (elemento 65)	6.25
OFW2 (elemento 69)	2.91
OSB1 (elemento 78)	4.46
OSB2 (elemento 89)	3.23
OSB3 (elemento 100)	2.16
OSB4 (elemento 111)	1.14

Los resultados más significativos obtenidos para el caso A2 se muestran en la figura 8.39. La figura 8.39a es equivalente a la 8.38a. En este caso, el punto más cargado de la primera pared externa alcanza una temperatura superior a la de su revestimiento de grafito  $\sim 0.8 h$  después del inicio del accidente. A partir de este punto, el grafito actúa como sumidero de calor. En la figura 8.39b se muestra la excursión de temperatura de la primera pared externa, así como de la primera plancha de blindaje OSB, que se supone bien refrigerada. El incremento de temperatura en la OFW es del orden de  $350 \, {}^{0}C$ , lo que permite suponer que se producirá un cierto daño permanente en el material. La temperatura en el refrigerante en la primera placa OSB se representa en la figura 8.39c. En la figura 8.39d puede apreciarse de nuevo cómo el calor se difunde a través de la cámara del plasma desde las partes exteriores a las interiores, que se mantienen correctamente refrigeradas.

Los resultados concernientes al caso A3 se presentan en la figura 8.40. La figura 8.40a recoge la evolución de la temperatura en algunos puntos significativos. La temperatura decrece rápidamente en el punto más desfavorable de la IFW debido al correcto funcionamiento del circuito de refrigeración asociado a este componente. No se observan excursiones de temperatura por encima de los valores de funcionamiento nominal, debido a la eficiencia de la conductividad térmiva entre el componente averiado (ISB)



Figura8.39: NET-SB: OFW LOCA caso A2.



Figura8.40: NET-SB: ISB LOCA caso A3.

y la primera pared IFW. La temperatura del refrigerante en los tubos IFW se muestra en la figura 8.40b. Los componentes de la parte exterior del reactor no son afectados por esta secuencia accidental, como la figura 8.40c pone de manifiesto.

La figura 8.41 hace referencia al caso A4. Los componentes averiados (las placas 1 y 3 de la envoltura de blindaje externa OSB) se encuentran ahora aislados, de modo que la remoción del calor residual es menos eficiente que en el caso anterior. La figura 8.41a muestra como de la temperatura en la OFW decrece rápidamente. A partir de su valor en régimen permanente, la temperatura de la placa 1 del OSB decrece inicialmente debido a la extinción del plasma, pero inmediatamente vuelve a aumentar hasta un máximo de  $225 \, {}^{0}C \sim 1.5 h$  después del inicio del accidente. El valor de régimen permanente de la placa 3 del OSB es de  $178 \, {}^{0}C$ , no siendo superada esta temperatura durante el transitorio. La figura 8.41b muestra la temperatura en algunos circuitos de refrigeración en función del tiempo.

El caso de LOCA total (A4) se analiza en la figura 8.42. Como las condiciones de contorno exteriores son adiabáticas, la temperatura en el interior del reactor crece indefinidamente. Se analizaron sólamente las primeras 3h del transitorio. Observando la figura 8.42a se puede concluir que la primera pared externa (OFW) sufre un daño más severo que la interna (IFW). A pesar de que las temperaturas de fusión no se alcanzan en el periodo de tiempo analizado (figura 8.42b), puede suponerse que la envoltura de blindaje externa experimenta una degradación notable. Nótese que los componentes externos tienden a irradiar calor sobre los internos, de modo que el calor se difunde hacia el centro del toroide.

#### Accidentes LOFA

Los siguientes gráficos son relativos a los casos LOFA analizados. El mayor interés se concentra en la respuesta térmica de los circuitos averiados. Desde el punto de vista de la seguridad, resulta deseable que las condiciones de intercambio térmico en los tubos no sean muy extramadas. El salto de temperaturas entre la pared del tubo y la temperatura media del refrigerante debería ser lo suficientemente pequeño como para evitar la generación de flujo bifásico. Para asegurar, por otra parte, la correcta modelización del fenómeno, conviene comprobar que el flujo en los tubos permanece en el régimen turbulento, con la velocidad de convección natural asintótica establecida en la sección precedente v = 0.33 m/s, incluso en los finos tubos de la primera pared



Figura8.41: NET-SB: OSB LOCA caso A4.



Figura8.42: NET-SB: LOCA total caso A5.

230



Figura 8.43: NET-SB: Decrecimiento de la velocidad del refrigerante.

interna. En este componente, el número de Reynolds mínimo es de alrededor de 8000, valor a partir del cual se debe interpolar cuidadosamente en la correlación de Colburn para evitar oscilaciones numéricas en los resultados.

La figura 8.43 muestra dos curvas de descenso de la velocidad del refrigerante. Se ha realizado un estudio paramétrico, sobre los casos B1 y B2 (LOFA en IFW y OFW, respectivamente), adoptando las siguientes hipótesis sobre la velocidad:

- 1) Constante con el valor de régimen permanente 4 m/s.
- 2) Curva (a) en la figura 8.43.
- 3) Curva (b) en la figura 8.43.

Las dos últimas hipótesis corresponden a distintos valores de la inercia del sistema de bombeo, tal y como se discutió detalladamente en la sección precedente, correspondiendo la curva (a) a una inercia mayor.

La figura 8.44 corresponde a las hipótesis 1, 2, y 3 para el LOFA en la primera pared interna (caso B1). Por su parte, la figura 8.45 corresponde a las mismas hipótesis sobre la velocidad aplicadas al LOFA en los circuitos de la primera pared externa (caso B2). La primera hipótsis corresponde a una extinción en el quemado del plasma sin interrumpir la alimentación a los circuitos de refrigeración. Con la hipótesis 3 se obtienen excursiones de temperatura en los circuitos de circulación involucrados que multiplican aproximadamente por un factor de 2 los incrementos de temperatura por unidad de longitud en la dirección vertical correspondientes al funcionamiento en régimen permanente.



Figura 8.44: NET-SB: IFW LOFA caso B1.



Figura 8.45: NET-SB: OFW LOFA caso B2.



Figura 8.46: NET-SB: IFW LOFA caso B1.

Esta última hipótesis es probablemente la más realista. Adoptándola como referencia, se obtienen los resultados que se muestran en la figura 8.46, donde se representa gráficamente la evolución de la temperatura en el grafito del revestimiento de la primera pared interna, el canal de refrigeración más desfavorable en la IFW y el punto de contacto IFW-ISB, en el caso B1 de LOFA en IFW. El salto de temperaturas entre la pared de los tubos y la temperatura del refrigerante es lo suficientemente pequeño como para asegurar la no aparación de burbujas.

La figura 8.47 muestra las temperaturas alcanzadas en las paredes de los dos canales de refrigeración de la primera pared externa, así como en la superficie de la OFW directamente enfrentada con la envoltura de blindaje externa OSB, en el caso B2 (LOFA en la primera pared externa), adoptando la hipótesis 3 sobre la velocidad del refrigerante. También en este caso se puede evitar la formaciónde burbujas en los circuitos de refrigeración involucrados en el LOFA.

Finalmente, en la figura 8.48 se muestran los resultados obtenidos en el análisis del accidente LOFA total (B3), suponiendo de nuevo la hipótesis 3 sobre la velocidad del agua en los tubos. Esta suposición contempla la parada accidental de todos los sistemas de bombeo debido a un incidente en el sistema de aprovisionamiento de energía eléctrica en toda la planta. Las tasas de generación térmica en el interior del reactor decrecen mucho más que el flujo de masa de refrigeración residual, de modo que las temperaturas en todo el reactor decrecerán a largo término. Se analiza la respuesta a corto término



Figura8.47: NET-SB: OFW LOFA caso B2.



Figura8.48: NET-SB: LOFA total caso B3.

para comprobar la magnitud de las excursiones de temperatura iniciales. La figura 8.48a muestra la evolución de las temperaturas en varios puntos del componente IFW, mientras que la 8.48b corresponde a la OFW. La figura 8.48c muestra las consecuencias de esta hipótesis accidental en la envoltura de blindaje externa ISB, y la 8.46c en el externo OSB.

El comportamiento a corto plazo de cada circuito de refrigeración es muy similar a un LOFA en cada circuito, ya que en escalas de tiempo breves la radiación térmica no es muy eficaz. Los transitorios termohidraulicos sobre componentes aislados pueden ser analizados mediante un programa de análisis de ciclos termodinámicos, si la variación en la temperatura en las superficies de radiación adyacentes es pequeña y el cálculo se realiza hasta tiempos breves. Esta suposición es de validez más discutible cuando los circuitos de refrigeración se encuentran bien acoplados conductivamente.

Las conclusiones que de los análisis mostrados en este capítulo se pueden extraer son en primer lugar la identificación de la convección natural como el mecanismo de seguridad pasiva más relevante a corto plazo (LOFA), y la evaluación de la eficacia de la radiación entre componentes directamente enfrentados como mecanismo de mitigación de consecuencias en los casos de LOCA, con una escala de tiempo mayor.

El componente más crítico de todos cuantos componen el sistema de elementos directamente enfrentados con el plasma es el divertor, y los estudios que consideren la hipótesis de continuación del quemado del plasma tras la iniciación del accidente deben dirigirse al análisis de este componente, que recibe cargas térmicas superiores en un orden de magnitud al resto de los elementos.

## Capítulo 9

# Transitorios Térmicos Accidentales en las Placas Divertoras.

Las placas divertoras representan sin duda el componente expuesto a condiciones de funcionamiento más severas de cuantos configuran el sistema de separación plasmavasija del reactor, y por lo tanto resulta el componente más frágil en condiciones accidentales. En el marco del proyecto ITER ('International Tokamak Experimental Reactor'), varias propuestas han sido y están siendo consideradas para el diseño óptimo de este elemento, incluyendo al selección de los materiales más adecuados así como su disposición óptima. En este capítulo se resume el trabajo efectuado en JRC-Ispra durante la elaboración de esta memoria para contribuir a la identificación y análisis de algunas de estas propuestas.

El proyecto ITER [72] se enmarca en la iniciativa adoptada en 1986 por la Agencia Internacional de la Energía Atómica (IAEA) en el sentido de promover la cooperación internacional en el dominio de la fusión termonuclear controlada, mediante un proyecto científico-técnico común entre las Comunidades Europeas, Estados Unidos, la Unión de Repúblicas Socialistas Soviéticas y Japón. La tarea de diseño conceptual de la futura planta comenzaron en 1988. Los trabajos incluyen dos fases. La primera de ellas (fase de definición) concluyó en el mismo año con la adopción de un conjunto básico de características técnicas y planes preliminares para llevar a cabo de forma coordinada los diferentes planes de investigación y desarrollo. La segunda etapa, de diseño, se encarga en la actualidad de preparar el diseño de la instalación, incluyendo una estimación del costo total del proyecto y de las características del emplazamiento. El trabajo que se presenta en este capítulo constituye parte de la aportación del socio
europeo (y en particular del Joint Research Centre-Ispra) a esta segunda etapa.

## 9.1 Componentes Directamente Enfrentados con el Plasma en ITER.

El diseño del reactor ITER se basa en la experiencia adquirida durante el proyecto y la realización de otras instalaciones semejantes (NET, JET), pudiéndose considerar, bajo un cierto punto de vista, como una versión evolucionada del reactor NET. Sobre las características fundamentales de los sistemas auxiliares, así como de la vasija de vacío, envoltura reproductora, sistemas magnéticos, criogénicos y mecánicos, y sus implicaciones sobre la seguridad de la instalación se remite al lector al informe ITER de 1989 [72], y a la descripción de estos componentes para NET (Toschi [158], Raeder y Gulden [118], Vetter [161], Chazalon et al. [23], Vieider et al. [162], McCracken et al. [88], Paterno [104]).

El reactor será operado durante un cierto tiempo como banco de pruebas de física de plasmas (*fase física*). Una vez establecidas con claridad las características físicas de la máquina, la instalación será operada como banco de pruebas técnicas en la llamada *fase tecnológica* de la vida del reactor.

Los componentes críticos son, como en cualquier otro reactor de tipo tokamak, aquellos directamente enfrentados con el plasma, es decir, las primeras paredes y las placas divertoras.

La primera pared ('First Wall', FW), muy similar a la de NET, consiste en una serie de armaduras de protección montadas sobre la parte expuesta al plasma de los módulos del envoltura de blindaje interna y externa. Sus funciones principales son:

a) Delimitar la 'zona limpia' dentro de la cual está contenido el plasma en ignición.

b) Absorber la radiación electromagnética y el flujo de partículas cargadas que emana del plasma.

c) Proteger la envoltura reproductora del contacto directo con el plasma y con los electrones de alta energía, durante los transitorios de encendido y apagado, así como durante las disrupciones del plasma.

La protección de grafito de la primera pared debe ser capaz de soportar los flu-

jos térmicos y de radiación neutrónica nominales (~  $0.15 MW/m^2$  y ~  $1.1 MW/m^2$ , respectivamente), así como aguantar el severísimo choque térmico que supone una disrupción del plasma (se depositan ~  $2 MJ/m^2$  en el breve lapso de tiempo de 1 ms). Además, el material de la primera pared debe cumplir los requerimientos necesarios sobre absorción de impurezas (en particular agua y oxígeno), debe minimizar la contaminación del plasma por partículas procedentes de la erosión del material, así como el inventario de tritio bloqueado en la superficie de la primera pared.

El sistema de refrigeración se basa en agua a baja presión ( $60^{\circ}C$  a  $p = 1.5 MPa \simeq 15 bar$ ). Se prevé la instalación de varios circuitos de refrigeración redundantes en paralelo para aumentar el nivel de seguridad, dispuestos en modo tal de favorecer el mecanismo de convección natural en la contingencia de un accidente.

Los paneles de la primera pared sobre los que se monta la protección de grafito son solidarios con los módulos de la envoltura de blindaje. La principal novedad con respecto a NET es que, mientras en la primera pared interna se mantiene una disposición poloidal del circuito de refrigeración (se requieren menos tubos y éstos se adaptan mejor a la geometría esbelta del componente, figura 9.1), para la parte externa se adopta un desarrollo toroidal de los mismos, ya que las aperturas en el plano ecuatorial de la primera pared externa hacen que este diseño sea más simple (figura 9.2). Gracias a la experiencia acumulada en grandes tokamaks, se impone la elección de un material de bajo número atómico para el revestimiento o armadura de protección de la primera pared, del tipo grafito en su forma material compuesto de fibra de carbono ('Carbon Fibre Composite', CFC) o berilio. Durante la fase física, el revestimiento previsto corresponde al material CFC, que presenta excelentes propiedades de resistencia a los choques térmicos. El diseño de base de la primera pared con su revestimiento de grafito CFC se muestra en la figura 9.3. La armadura de grafito se fija sobre el panel de tubos mediante tuercas y tornillos de CFC sobre unas ranuras específicamente dispuestas para este propósito. Esta disposición permite la sustitución del revestimiento mediante brazos mecánicos.

El método de refrigeración del revestimiento depende fundamentalmente del flujo de calor local previsto. El revestimiento refrigerado por radiación se reserva para las áreas más expuestas con flujo de calor altos (~  $0.5 MW/m^2$ ), y las que se refrigeran por conducción, que tienen el mismo diseño de base pero en las cuales el huelgo entre CFC



Figura 9.1: ITER: Primera pared y envoltura de blindaje internas.





Figura 9.2: ITER: Primera pared y envoltura de blindaje externas.



Figura9.3: ITER: Detalle de la primera pared.

y acero se encuentra ocupado por una capa de transición que permita minimizar los esfuerzos mecánicos debidos a los diferentes coeficientes de expansión térmica. El mejor material candidato es el grafito flexible Papyex. El uso de revestimiento refrigerado por radiación se reserva así al ~ 10% de la superficie total expuesta al plasma, para minimizar fenómenos como la erosión, vaporización y deposición local de tritio, ya que la armadura refrigerada por conducción trabaja a temperaturas sensiblemente inferiores a las que se alcanzan con revestimiento refrigerado por radiación (~ 1000 °C frente a ~ 1800 °C, respectivamente). La cantidad total de tritio depositada en la primera pared debe, en cualquier caso, ser inferior a los 150 g.

Una dificultad importante en la implementación práctica de materiales basados en el carbono es la necesidad que éstos tienen de ser sometidos a un recocido, a temperaturas superiores a los  $\sim 350 \,^{0}C$  cada vez que han sido expuestos al contacto con aire o agua. Esto se puede conseguir haciendo circular vapor de agua por los tubos refrigerantes, o calentando con antenas de radiofrecuencia el interior de la cámara del plasma.

La vida útil del revestimiento de grafito es un parámetro sobre el cual existe todavía bastante incertidumbre. Los aspectos básicos son los efectos de la irradiación ('swelling' o hinchazón), y la erosión del material debido a las disrupciones del plasma.

Como el material CFC es bastante transparente a los electrones de alta energía, parece apropiado incluir con cierta periodicidad unas varillas de tungsteno en la matriz de grafito para frenar este tipo de irradiación y proteger así el acero de la parte posterior.

Las placas divertoras deben soportar, durante el funcionamiento en régimen nominal de la instalación, una carga térmica de ~ 100 MW. El diseño de las placas divertoras que se desarrolla actualmente considera sólamente la fase física de la vida del reactor, siendo los materiales candidatos diferentes tipos de grafito. Aunque el análisis correspondiente a la fase tecnológica no ha sido llevado a cabo totalmente, parece que la consecución de tasas de erosión aceptables en el componente obligan al uso de materiales con número atómico Z elevado (posiblemente tungsteno). En la tabla 9.1 se muestran las especificaciones más importantes del componente.

El problema fundamental asociado al diseño de este componente viene dado por el conflicto existente entre la adopción de un espesor de revestimiento elevado, que protege mejor las estructuras subyacentes y soporta mayores tasas de erosión sin necesidad de ser reemplazado, y un espesor pequeño, que limita la temperatura máxima alcanzada

Parámetro	Unidad	Valor
Flujo de calor nominal	MW/m2	10-15
Duración del pulso	-	Continuo
Temperatura máxima admisible	C	1000
Temperatura del refrigerante a la entrada	C	60
Velocidad del refrigerante	m/s	10
Segmentación de la placa	-	1/32 modulos
Segmentación del tubo de refrigerante	-	Aislante individual
Dimensiones máximas	$m \times m$	$1.2 \times 3.5$

Tabla9.1: Especificaciones de operación para el divertor de ITER.

en la superficie de la protección (para cada material considerado, el gradiente térmico es sólo función del flujo térmico nominal), pero por otra parte se erosiona rápidamente.

La principal novedad en el diseño del componente consiste en la elección de una estructura monobloque, en la cual el tubo refrigerante se encuentra directamente inmerso en la matriz de grafito. Las ventajas de esta disposición consisten en un mejor comportamiento del componente frente a las corrientes parásitas provocadas por el campo magnético, la eliminación de discontinuidad en el campo de tensiones térmicas en la interfase armadura-tubo, y una mayor fiabilidad frente a cargas térmicas anormales.

En las siguientes secciones se analizan algunas de las más recientes propuestas para el diseño de este componente, intentando llegar a un compromiso válido, para cada material, sobre el espesor ideal del revestimiento.



Figura 9.4: Divertor ITER. Diseño preliminar.

# 9.2 Análisis de un Accidente LOCA Total en el Divertor ITER-JRC.

En esta sección se presentan los resultados de un análisis detallado en dos dimensiones, simulando un accidente de tipo LOCA en los tubos de refrigeración del divertor del reactor ITER. El diseño elegido para el análisis es la propuesta del equipo de diseño Joint Research Centre (JRC) -Ispra [134]. Se realizaron los cálculos correspondientes al régimen permanente y varios transitorios térmicos correspondientes a diferentes hipótesis. Las principales características de este diseño, que incorpora el grafito de alta conductividad térmica CFC ('Carbon Fiber Composite') como material enfrentado con el plasma, se muestran en las figuras 9.4 - 9.5.

Recientes estudios térmicos y termomecánicos han sido llevados a cabo en JRC, contemplando el comportamiento del componente en régimen permanente (Janssen [74], Scaffidi-Argentina et al. [134]). Estos análisis se limitaron al estudio de la matriz de grafito CFC. En el estudio que se presenta en esta sección se tendrá en cuenta la presencia de la estructura de acero de soporte. El material de los tubos refrigerantes



Figura 9.5: Divertor ITER. Sección del diseño preliminar.

es la aleación de molibdeno-titanio-zirconio (Mo - 0.5 Ti - 0.1 Zr) TZM. Los tubos de refrigerante tienen, además de esta función, la misión de soportar físicamente el peso del componente, junto con la estructura de soporte de acero inoxidable AISI-316, de modo que el no se puede asegurar el perfecto contacto térmico entre el bloque de grafito y el bloque de soporte. Las consecuencias de la existencia de una cierta holgura entre estos dos componenentes debe ser analizada desde el punto de vista térmico.

Las temperaturas extremadamente elevadas que alcanza la matriz de grafito hacen que el mecanismo de radiación térmica tome un papel bastante imporatnte en la evolución del campo de temperaturas en el divertor. Además, como la secuencia accidental considerada es de tipo LOCA, el único mecanismo de remoción pasiva del calor es la radiación térmica sobre los componentes bien refrigerados del reactor, es decir, la primera pared opuesta y la vasija de vacío situada tras la placa divertora.

La secuencia accidental considerada supone una desaparición brusca y total del agua de refrigeración en los tubos, ya que se trabaja en la hipótesis de que un sólo circuito alimenta todos los tubos del divertor. Esto permite analizar, por simetría, sólamente la mitad de la sección transversal del componente. A partir del instante



Figura9.6: Divertor ITER. Discretización con Elementos Finitos.

inicial, los tubos se suponen vacíos, y el calor se difunde a través de esta cavidad por radiación.

La discretización mediante elementos finitos usada para este análisis se muestra en la figura 9.6. En el modelo existen 4 materiales diferentes: grafito CFC en la parte superior, dos piezas de acero inoxidable, un material cerámico aislante y la aleación TZM de los tubos de refrigeración. La vasija de vacío se representa mediante la malla inferior, que actúa como pozo frío mediante la radiación térmica a través de la cavidad EFGHIJKLMNOE, siendo la línea PQRSP otra cavidad. Si se supone la existencia de una holgura entre el grafito y el acero, se debe considerar una tercera cavidad radiante. Hay dos piezas de acero inoxidable en el modelo: en la primera de ellas se encuentra inmerso el ramal de retorno del tubo de refrigeración. Esta pieza soporta, mediante las abrazaderas que se vén en el diseño, el bloque de grafito CFC. La segunda pieza de acero, en forma de doble T, es el rail que permite la fijación de los elementos de grafito, evitando de este modo las vibraciones provocadas por la alta velocidad a la cual circula el refrigerante a través de los tubos.

La sección de la placa divertora que se analiza tiene 17 mm de anchura y 75 mm



Figura 9.7: Hipótesis de Carga Térmica.

de longitud (linea GC). El diámetro de los tubos de refrigeración es 10 mm, y el espesor de sus paredes es 2 mm. La distancia mínima entre el tubo de refrigerante y la superficie de deposición del flujo térmico debido a los iones pesados es 11 mm. Como los bloques de grafito no son continuos en la dirección z, la discretización asumida del componente proporcionará de forma bastante exacta la evolución del campo de temperaturas durante el periodo de análisis.

El flujo de calor motivado por la colisión de partículas cargadas sobre la línea CD en condiciones de funcionamiento nominal en régimen permanente es de 10  $MW/m^2$ , que es la hipótesis estándar para el punto más cargado en el divertor. El tiempo de extinción del plasma después de la iniciación del accidente depende en gran medida de los mecanismos de detección de irregularidades. No disponiendo de datos fiables sobre este parámetro, resulta imposible establecer una hipótesis correcta. En este estudio se consideran 4 casos, en ninguno de los cuales se toma en consideración la posibilidad de una excursión de potencia en el plasma (figura 9.7):

- a) Extinción instantánea del plasma a tiempo t = 0 s.
- b) Extinción lineal de la potencia en 5 s.

c) Continuación de la potencia nominal durante 5 s, seguida de un decrecimiento lineal hasta potencia nula en t = 10 s.

d) Continuación indefinida del quemado del plasma.

Después de la extinción total del plasma (casos a, b, y c), la superficie de grafito se supone expuesta a la radiación sobre un cuerpo negro a temperatura  $T_{\infty}$ . Durante el periodo  $0 \le t \le 10 \, s$ ,  $T_{\infty} = 1300 \, {}^{0}K$ , para  $10 \, s < t \le 50 \, s$ ,  $T_{\infty}$  se interpola linealmente entre  $1300 \, {}^{0}K$  y  $373 \, {}^{0}K$ , mientras que se adopta  $T_{\infty} = 373 \, {}^{0}K$  para tiempos  $t > 50 \, s$ . El efecto de esta condición de contorno radiante puede ser irrelevante durante los primeros segundos del transitorio, ya que el flujo de calor que abandona la superficie de grafito debido a esta condición es muy pequeño comparado con el flujo térmico nominal de  $10 \, MW/m^2$ . En efecto, el flujo intercambiado entre un diferencial de superficie con emisividad  $0.95 \, a \, 1000 \, {}^{0}K$  rodeado por un cuerpo negro a  $373 \, {}^{0}K$ es  $q = 56699W/m^2$ . La radiación térmica, sin embargo, juega un papel importante después, durante el enfriamiento de la placa de grafito. La selección de la temperatura  $T_{\infty}$  descrita anteriormente intenta simular la evolución de la temperatura en la primera pared externa opuesta a la placa divertora en la cámara del plasma, que se supone bien refrigerada.

La respuesta a corto plazo del componente está determinada fundamentalmente por el flujo de calor superficial en el área expuesta al plasma. La generación térmica volumétrica tiene una cierta importancia en el campo de temperaturas de régimen permanente, mientras que su influencia es de primer orden en la respuesta a largo plazo de la temperatura en el divertor. Los valores de densidad volumétrica de potencia utilizados en este análisis se muestran en la tabla 9.2. Son datos provinientes del análisis del reactor NET-SB, perfectamente extrapolables a ITER, debido a la gran semejanza del diseño y condiciones de operación de estos dos reactores [114].

Las propiedades térmicas de los materiales considerados (k, conductividad térmica,

133.2. II DIL. Iasas de Densidad Volumetrica de l'Otencia (VV				Ja ( ** /		
Material	Nominal	1 s	10 m	60 m	2 h	3 h
grafito CFC	9.0e6	0	0	0	0	0
resto	1.2e7	2.8e5	2.4e5	1.9e5	1.5e5	1.2e5

Tabla9.2: ITER: Tasas de Densidad Volumétrica de Potencia  $(W/m^3)$ .

 $\rho$ , densidad, Cp, calor específico) se muestran en la tabla 9.3, en función de la temperatura (<sup>0</sup>K). Los datos provienen de la recopilación realizada por Zolti sobre materiales específicos de la tecnología de fusión [178], y de la colección de datos sobre el acero considerado realizada por Matera [91].

Material	$k (W/m/^{0}K)$	$\rho Cp \ (J/m^3/^0K)$
CFC	$292 - 0.199T + 4.41e-5 T^2$	$1800 (578 - 1.399T + 3.03e-4 T^2)$
TZM	$136.3 - 0.033T + 2.63e-6 T^2$	$10200 (243 - 0.0217T + 4.1e-5 T^2)$
AISI-316	8.749 + 0.01416 T	7960 (406.4 + 0.1771  T)
Cerámico	77.4 - 0.0346 T (T <b>&lt;</b> 1000)	3200 (556.0 + 0.446  T)
	42.8 (T <b>≥</b> 1000)	

Tabla9.3: ITER: Propiedades Térmicas.

Es importante subrayar la importancia de la emisividad en este tipo de cálculos, ya que los resultados son bastante sensibles a este parámetro, como se puso en evidencia en los cálculos monodimensionales presentados en el capítulo anterior. En los casos que se presentan ahora, la emisividad del grafito se tomó igual a 0.95, siendo de 0.5 para el resto de los materiales.

El grafito CFC posee una conductividad térmica fuertemente anisotrópica, con un plano de alta conductividad, teniendo menor conductividad la dirección perpendicular. A grandes temperaturas, sin embargo, ambas tienden a igualarse. El plano de alta conductividad se supone aquí coincidente con el plano de la sección analizada. La difusión del calor en la otra dirección es menos eficaz debido a la discontinuidad del revestimiento de grafito. Se podría, sin embargo, disponer la orientación del material con el plano más conductor coincidiendo con el plano definido por la dirección vertical en la figura 9.6 y la perpendicular al plano de cálculo, con el propósito de favorecer la difusión del pico de flujo en la dirección poloidal. Este efecto sería de poca entidad en los cálculos presentados aquí, ya que el calor se difunde fundamentalmente en la dirección vertical de la figura 9.6. Si se debiera analizar otro tipo de accidente, como por ejemplo un LOCA en la mitad de los tubos de refrigeración (habiendo supuesto la existencia de dos circuitos independientes para aumentar el nivel de seguridad del componente), la simetría del elemento no podría ser utilizada para reducir los cálculos. En este caso, sería necesaria una descripción más cuidadosa de la anisotropía del material si se trabaja con la segunda hipótesis de disposición del material.

La velocidad del agua en los tubos de refrigeración es alrededor de 10 m/s, circulando en un régimen muy turbulento. Se adopta esta condición de diseño para poder obtener una tasa de remoción lo suficientemente alta como para limitar en la medida de lo posible la temperatura de funcionamiento nominal del componente, además de aumentar el coeficiente de intercambio térmico entre la pared del tubo y el agua. El gradiente de temperaturas extremadamente elevado en la capa límite térmica requiere una adecuada presurización en el refrigerante para evitar un flujo bifásico generalizado. Se adopta como presión estándar 10 bar. La evaluación correcta del coeficiente de intercambio térmico en estas condiciones es otra fuente importante de incertidumbre.

Si se utiliza la conocida correlación de Dittus-Boelter a este caso, se obtiene un número de Nusselt de 648.7, que corresponde a un coeficiente de película de valor  $h = 42424 W/m^2/{}^{0}K$ . Hay, sin embargo, dos hechos que hacen razonable mayorar este valor:

a) Para aumentar la turbulencia, se prevé la disposición de una cinta discontinua (Jensen y Bensler [75]) coincidiendo con el diámetro del tubo, que favorece la mezcla del refrigerante a distintas temperaturas. Algunas experiencias recientes [17] han mostrado que el valor del coeficiente de película podría alcanzar valores hasta dos veces superiores a los medidos sin la cinta interna.

 b) Se produce una zona de ebullición nucleada en la parte más critica de la pared.
Esto implica igualmente una mejora significativa en las condiciones de intercambio térmico globales.

Para realizar una modelización cuidadosa del fenómeno, se debería utilizar la correlación de Dittus-Boelter con un número de Reynolds modificado que tenga en cuenta la turbulencia adicional introducida por la cinta interna, y utilizar la correlación de ebullición nucleada apropiada (por ejemplo, la fórmula de Thom [128]) para tener en cuenta la formación de burbujas. Si se considera el tipo de secuencia accidental que se simula en este caso, estos problemas aparecen sólo durante el régimen permanente, de modo que se ha tomado una aproximación más simple, adoptando un valor uniforme del coeficiente de intercambio térmico de 60000  $W/m^2/{}^0K$  en los dos tubos. La temperatura media del refrigerante se supone de 60  ${}^0C$ . A continuación se presentan los principales resultados del análisis. La geometría que incluye la holgura entre el grafito y el acero se denomina geometría A, siendo la geometría B aquella en la cual ambas piezas se suponene en perfecto contacto térmico. Las hipótesis de carga 1, 2, 3, y 4 corresponden al las curvas a, b, c, y d de la figura 9.7, respectivamente.

#### Resultados en Régimen Permanente.

Los campos de temperaturas en régimen permanente correspondientes a las dos geometrías se muestran en la figura 9.8. Nótese que, en el caso A, el tubo de retorno en el acero no contribuye de manera eficaz a la remoción del calor, debido a la inversión de flujos térmicos a través de la holgura. Este efecto se debe a la elevada densidad de potencia volumétrica depositada en régimen permanente en el acero inoxidable AISI-316, y la deficiente transmisión del calor a través del hueco. El aislamiento térmico del rail en forma de doble T provoca que la temperatura máxima del acero se alcance en esta pieza, donde se tiene un máximo en regimen permanente del orden de ~ 750 °K. La figura 9.9 muestra el mapa de isotermas para las dos geometrías. La temperatura máxima que alcanza el grafito en régimen permanente es 1690 °K en ambos casos, que está bastante por encima de la temperatura máxima admisible en régimen permanente (1273 °K) prescrita en las condiciones nominales de operación.

El elevado flujo de calor concentrado en la parte superior de la tubería más cargada produce un gran salto de temperaturas entre la pared del tubo y el refrigerante. Como la presión en los tubos está limitada a 10 *bar* debido a consideraciones de resistencia de materiales, parece imposible evitar la formación de flujo bifásico en esta zona. La temperatura de saturación para p = 10 *bar* es 175 °C. La isoterma A en la figura 9.9 corresponde a 159 °C, por lo tanto el tamaño de la zona con ebullición nucleada puede estimarse alrededor de 1/3 del perímetro mojado.

#### Resultados en Régimen Transitorio.

Se presenta la evolución de las temperaturas en 4 nodos seleccionados, así como algunas representaciones tridimensionales de los campos de temperatura.



Figura 9.8: Campos de Temperatura en Régimen Permanente.



Figura 9.9: Mapas de Isotermas en Régimen Permanente.



Figura 9.10: Nodos Seleccionados en el transitorio.

La figura 9.10 muestra la posición de los nodos seleccionados, así como los correspondientes marcadores en los gráficos para las geometrías A y B (+= punto más caliente de la matriz de grafito, $\times =$  punto más caliente de la pared del tubo de TZM, # = punto C en la figura 9.10 (perteneciente al acero inoxidable).

Los cálculos se realizaron analizando tiempos hasta  $\sim 2200 \ s$ , para estudiar de modo detallado las diferentes constantes de tiempo involucradas en el problema.

Todos los casos muestran un transitorio muy rápido durante los primeros instantes tras la iniciación del accidente. El parámetro que controla este transitorio breve es la forma de la curva de extinción del plasma. Las temperaturas de las zonas conectadas mediante conducción se uniformizan aproximadamente  $\sim 5 min$  después de la iniciación del transitorio. A partir de este punto, la radiación térmica y la deposición volumétrica de energía debida a la activación de los materiales controlan la evolución del campo de temperaturas. En la integración temporal de cada uno de los casos se utilizó un paso de tiempo variable que recorre la escala entre 0.005 s hasta 500 s.

#### Hipótesis de carga 1.

La figura 9.11 muestra la evolución de la temperatura en los nodos seleccionados para la geometría A y la hipótesis de carga 1, con dos escalas de tiempo diferentes (hasta 20 s, y hasta 2200 s).

La figura 9.12 corresponde a la geometría B con la hipótesis de carga 1, representada con las mismas escalas de tiempo. Nótese que en el caso A1, las piezas de acero AISI-316 necesitan alrededor de  $\sim 300~s$  para alcanzar un campo de temperaturas plano, mientras que la matriz de grafito CFC uniformiza su temperatura en tan sólo  $\sim 10~s$ después de la iniciación del LOCA. Este efecto es debido a la excelente conductividad térmica del grafito CFC, que iguala rápidamente la temperatura en ausencia de cargas térmicas significativas. El rail de acero AISI-316 necesita más tiempo para alcanzar un estado cuasi-permanente, debido a la presencia del material cerámico aislante y la escasa eficiencia a corto plazo de la radiación para eliminar el calor residual.

#### Hipótesis de carga 2.

Las figuras 9.13 y 9.14 corresponden a la hipotesis de carga 2. La evolución de la temperatura en los nodos seleccionados para la geometría se muestra en la figura 9.13, con las dos escalas de tiempo adoptadas. No se observa en el grafito una excursión de temperaturas por encima del nivel de funcionamiento en régimen permanente, pero la pared del tubo de TZM alcanza una temperatura ~ 1200  $^{0}K$ ) en tan sólo ~ 6 s. Las gráficas correspondientes a la geometría B se presentan en la figura 9.14. El comportamiento a corto plazo de la matriz de grafito es muy similar al de la geometría A, pero la onda de calor se propaga rápidamente en este caso hasta el soporte de acero.

El divertor en su totalidad alcanza una temperatura cuasi uniforme de valor ~ 700  $^{0}K$ al cabo de 200 s. A partir de este momento, decrece más o menos de modo lineal debido a la radiación térmica sobre los componentes bien refrigerados, alcanzando los ~ 630  $^{0}K$  al cabo de t = 2200 s.

#### Hipótesis de carga 3.

La figura muestra la evolución de la temperatura en los nodos seleccionados para la geometría A. En la figura 9.15 (a) se muestran los primeros 20 s. Se observa un excursión de temperaturas bastante importante, alcanzándose casi los 2400  $^{0}K$  en la superficie del grafito, lo que permite prever una vaporización significativa de este material. Sin embargo, el huelgo entre grafito y acero protege eficientemente este último



Figura9.11: Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga 1. Geometría A.



Figura 9.12: Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga 1. Geometría B.



Figura 9.13: Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga 2. Geometría A.



Figura 9.14: Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga 2. Geometría B.



Figura9.15: Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga 3. Geometría A.

material de una posible fusión. La temperatura del grafito se uniformiza tras ~ 30 s, a partir de los cuales decrece más o menos linealmente (figura 9.15 (b)). Por su parte, la placa de soporte de acero AISI-316 alcanza una temperatura cercana a los 700  $^{0}K$ en un tiempo final de ~ 2200 s.

La figura 9.16 muestra el campo de temperaturas en representación tridimensional en los instantes t = 0.2 s, t = 5 s, t = 10 s, t = 24 s, y t = 84 s.

La figura 9.17 corresponde a la hipótesis de carga 3 y la geometría B. El aumento de temperatura que se aprecia en el grafito es más o menos el mismo que para la geometría A (figura 9.17 (a)), pero en este caso el contacto térmico entre los dos materiales hace que el acero de la placa de soporte del tubo de retorno alcance una temperatura de  $\sim 950 \ {}^{0}K$  en tan sólo 30 s. Esta temperatura es lo bastante próxima al punto de fusión como para suponer que se produce un daño irreversible en el material. La temperatura del divertor se uniformiza en torno a los  $\sim 800 \ {}^{0}K$  tras  $\sim 300 \ s$  y después decrece por radiación térmica hasta 650  $\ {}^{0}K$  al cabo de 2200 s.

La figura 9.18 muestra la forma del campo de temperaturas en los instantes  $t = 0.2 \ s, t = 5 \ s, t = 10 \ s, t = 24 \ s, y \ t = 84 \ s.$ 

Con respecto a los tubos de aleación TZM, la hipótesis de carga 3 no conlleva todavía un daño definitivo para el tubo más expuesto. No se supera la temperatura de recristalización (~ 1800  $^{0}K$ ), ya que la pared del tubo alcanza una temperatura máxima de ~ 1600  $^{0}K$  en el tiempo t = 10 s, muy por debajo de la temperatura de fusión (2893  $^{0}K$ ).

#### Hipótesis de carga 4.

En este caso se supone que el quemado del plasma no se interrumpe tras la iniciación del accidente, manteniéndose el flujo térmico igual a su valor nominal en régimen permanente. Este cálculo sirve para mostrar los tiempos máximos de supervivencia de cada una de las partes del componente. Las temperaturas máximas admisibles para cada material se resumen en la tabla 9.4.

El análisis se ha realizado hasta un tiempo t = 85 s. Los resultados se muestran en las figuras 9.19 y 9.20, correspondientes a las geometrías A y B, respectivamente. Los resultados son muy similares para los dos casos, aunque el caso mostrado en la figura 9.20 es ligeramente menos severo para la matriz de grafito debido al contacto térmico con la placa de soporte, mientras que el caso A corresponde a un comportamiento



Figura 9.16: Evolución del campo de temperatura. Hipótesis de carga 3. Geometría A. (t = 0.2 s, 5 s, 10 s, 24 s y 84 s)



Figura9.17: Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga 3. Geometría B.



Figura<br/>9.18: Evolución del campo de temperatura. Hipótesis de carga 3. Geometría B. <br/>(t = 0.2 s, 5 s, 10 s, 24 s y 84 s)

Tabla9.4: Temperaturas máximas permisibles.

Material	Temperatura máxima ( ${}^{0}K$ )	Mecanismo de fallo
grafito CFC	3500	Sublimación
TZM	1800	Recristalización
TZM	2890	Fusión
AISI-316	1600	Fusión



Figura9.19: Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga 4. Geometría A.



Figura9.20: Transitorios térmicos sobre los nodos seleccionados. Hipótesis de carga 4. Geometría B.

más adiabático del grafito. Puede suponerse que el componente está completamente destruído tras el periodo de tiempo que se analiza. La temperatura de recristalización del TZM se alcanza en  $\sim 8 s$  en ambos casos, y la pared del tubo más cargado empieza a fundir en el instante t = 50 s. La temperatura de sublimación del grafito se alcanza en el tiempo t = 80 s en el caso A, y para t = 90 s en el caso B.

Por su parte, el acero inoxidable no fundirá en un periodo breve de tiempo en el caso A, protegido por el huelgo. Sin embargo, tal y como muestra la figura 9.20, con la geometría B el punto más desfavorable de la pieza de acero inoxidable alcanza la temperatura de fusión en el instante t = 80 s, debido a que el calor se propaga rápidamente hacia la placa de soporte.

#### Efectos a largo plazo.

Si se comparan las figuras 9.11 (b), 9.12 (b), 9.13 (b), 9.14 (b), 9.15 (b), y 9.17 (b), se pueden extraer las siguientes conclusiones:

a) El calor de activación en la placa de soporte de acero inoxidable hace que este componente alcance a largo plazo temperaturas mayores que las que se registran en la matriz de grafito, cuando existe un hueco entre ambos elementos. Esta inversión de temperaturas ocurre  $\sim 1500 \ s$  después de la iniciación del accidente, en todos los casos.

b) La temperatura de los componentes no depende mucho, a largo término, de la severidad del transitorio a corto plazo, pero su influencia no es despreciable. Las temperaturas al final del periodo de tiempo analizado (t = 2200 s) en el grafito, considerando la geometría con holgura fueron 551  ${}^{0}K$ , 590  ${}^{0}K$ , y 630  ${}^{0}K$ , respectivamente para las hipótesis de carga 1, 2 y 3. Las temperaturas correspondientes a la placa de soporte de acero para las misma s hipótesis fueron 607  ${}^{0}K$ , 648  ${}^{0}K$ , y 709  ${}^{0}K$ . Como resulta lógico, la temperatura final de todo el bloque del divertor en el caso de la geometría B al final del transitorio analizado, es más o menos la media de las temperaturas precedentes para cada hipótesis de carga: 578  ${}^{0}K$ , 633  ${}^{0}K$ , y 692  ${}^{0}K$ , respectivamente.

#### Conclusión.

En esta sección se han presentado algunos análisis bidimensionales que contribuyen al estudio de fiabilidad desde el punto de vista térmico del diseño de la placa divertors del reactor ITER en su versión JRC. La secuencia accidental analizada fué un accidente de tipo LOCA total. Las conclusiones fundamentales de este estudio pueden resumirse como sigue:

a) Desde el punto de vista del funcionamiento nominal, la existencia del huelgo entre el grafito y el acero inoxidable no es deseable, ya que se produce una inversión de flujos de calor hacia el tubo exterior, que es el más cargado térmicamente. Por otra parte, la temperatura máxima alcanzada por el grafito CFC con el espesor entre el tubo y la superficie considerado queda por encima de los  $1273^{\,0}K$  que se pretende obtener como máximo. Nuevos estudios fundamentados en variaciones del espesor y otros tipos de grafito darán las condiciones ideales de operación del componente.

 b) Desde el punto de vista del análisis de la secuencia accidental, la existencia de este hueco se revela fundamental para proteger durante la etapa más severa del transitorio, la plancha de soporte de acero inoxidable.

c) La identificación precisa del tiempo de extinción del plasma, así como la forma de la función temporal de decrecimiento de potencia resultan puntos cruciales para la realización de un estudio preciso del fenómeno. La gravedad del accidente depende en gran mediada de este factor. d) La radiación térmica sobre otros elementos bien refrigerados del reactor constituye un mecanismo eficaz de remoción del calor residual. El calor generado y acumulado en componentes con gran capacidad térmica se descarga rápidamente hacia los pozos fríos. Los transitorios a larga escala pueden analizarse de forma precisa utilizando mallas menos refinadas y pasos de tiempo mayores, ya que el transitorio a largo término es controlado básicamente por el calor residual y la radiación térmica, como mecanismos competitivos.

### 9.3 Estudio Paramétrico sobre Geometría y Materiales para el Monobloque de Carbono en el Divertor ITER.

En esta sección se intenta definir, mediante una serie de estudios paramétricos limitados al análisis del monobloque de carbono y su correspondiente tubo de refrigeración cuales son los materiales y geometría óptimos desde el punto de vista térmico. La figura 9.21 muestra la disposición final adoptada para el conjunto de la placa divertora por el equipo de diseño ITER. Como se vé, se apuesta por la separación entre la matriz de grafito y la plancha posterior de acero para minimizar el impacto de los transitorios térmicos accidentales sobre este último material.

Se pretende, además, estudiar la conveniencia de la implantación de *dos* circuitos de refrigeración independientes, estudiando las consecuencias térmicas de un accidente LOCA parcial, es decir, sólo en uno de los dos tubos de refrigeración que existen en cada bloque de carbono.

En particular, se analizan 3 tipos de grafito y 2 materiales distintos para los tubos, combinados con varias geometrías, cuyos parámetros básicos son el espesor del grafito y el espesor de la pared del tubo, y varias hipótesis sobre las cargas térmicas y la evolución de la secuencia accidental. Los flujos térmicos analizados fueron  $10 MW/m^2$ y  $15 MW/m^2$ , y los tipos de accidentes LOCA que se simulan corresponden al caso LOCA total y LOCA en la mitad de los tubos, sea instantáneo (con vacío brusco a t = 0 s en el tubo accidentado) o diferido (el coeficiente de intercambio térmico obtenido como función de la temperatura de pared decrece linealmente a cero en 5 s).

La figura 9.22 muestra el modelo utilizado en todos los cálculos. Los parámetros geométricos variables son el espesor mínimo de la matriz (distancia a) y el espesor de los tubos (distancia t). Otras magnitudes constantes en todos los casos analizados son: b = 7 mm, c = 7 mm, diámetro interno de los tubos, d = 15 mm. Como en los casos descritos en la sección anterior, cuando un tubo se vacía totalmente, se convierte en una cavidad radiante. Las condiciones de contorno estándar fueron adiabáticas sobre los lados izquierdo, inferior y derecho, y, obviamente de flujo impuesto sobre el lado superior. En la figura se señalan igualmente, los identificativos de algunos puntos y líneas significativos para el análisis de los resultados. (P1 es el punto más desfavorable



.

Figura 9.21: ITER: Configuración de la placa divertora.



LEGENDA				
curve 1	•	•	+	
curve 2	×	×	×	
curve 3	Ħ	Ħ	×	
curve 4	٠	•	۰	
curve 5	۵	O	٥	
curve 6	▲			

Figura 9.22: ITER: Modelo geométrico para el análisis del divertor monobloque.



Figura 9.23: ITER: Intercambio térmico en los tubos refrigerantes del divertor.
en la matriz de grafito, y P3 el más desfavorable en los tubos).

Como se señaló en la sección anterior, la determinación fiable del coeficiente de película en el interior de los tubos bajo las condiciones de ebullición nucleada y además con la presencia de la cinta diametral para aumentar la turbulencia resulta extremadamente difícil de predecir. La figura 9.23 muestra los resultados *experimentales* para la geometría de los tubos que nos interesa obtenidos por Koski en Sandia National Laboratories (USA) y transmitidos al NET-Team por Cardella [17]. La dependencia del coeficiente de película con la temperatura de pared que se muestra se ha implementado en el modelo de cálculo utilizado, con excelentes resultados desde el punto de vista numérico. Además, uno de los problemas presentados en este capítulo ha servido a Andritsos [2] para validar definitivamente el programa de cálculo desarrollado, comparando sus prestaciones y resultados con el programa comercial P-THERMAL [105], del paquete de códigos de elementos finitos PATRAN [106].

Los tres tipos de grafito considerados en este estudio son dos materiales compuestos de fibra de carbono: CFC-Aerolor (el mismo analizado en la sección anterior), que denominaremos CFCA para abreviar, y CFC-SEP, de características similares pero con una conductividad térmica ligeramente superior. Una tercera propuesta es el grafito pirolítico templado a compresión ('Compression Annealed Pyrolitic Graphite', CAPG) que se presenta como un excelente candidato, debido a su elevadísima conductividad térmica, aunque sus características mecánicas son más bien pobres. Los grafitos con fibra de carbono presentan anisotropía en su conductividad térmica con plano con mejor conductividad que la dirección perpendicular. En general, se prefiere situar el plano óptimo coincidiendo con el del cálculo, aunque en el caso del CFCA se han analizado ambas opciones, refiriéndose la sigla CFCAI al caso isótropo en el plano del papel, y CFCAA al caso anisótropo con la mayor conductividad en la dirección vertical que conecta superficie de carga y los tubos refrigerantes.

Los dos materiales considerados para la realización de los tubos son cobre (GlidCop) o la aleación de molibdeno-renio MoRe.

Las propiedades térmicas de estos materiales se representan gráficamente en las figuras 9.24 - 9.28.

Aunque no todos las combinaciones estudiadas son admisibles desde el punto de vista del funcionamiento en régimen permanente, a continuación se resumen los princi-



Figura 9.24: Propiedades térmicas del Compuesto de Fibra de Carbono Aerolor.



Figura9.25: Propiedades térmicas del Compuesto de Fibra de Carbono SEP.



Figura 9.26: Propiedades térmicas del grafito pirolítico CAPG.



Figura 9.27: Propiedades térmicas del cobre GlidCop.



Figura 9.28: Propiedades térmicas de la aleación MoRe.

CASO	CASO	Espesor grafito	Espesor tubo	FLUJO
Descripción	identificador	[mm]	[mm]	[MW/m2]
CFCAA	g112 (+)	10	1.5	10
CFCAA + radiación lateral	i112 (×)	10	1.5	10
CFCAI	o112 (*)	10	1.5	10
CFCAA	g222 (♦)	5	1.5	10
CFCAA	g232 (□)	5	1.5	15
CFCAA + LOCA lento	g242 ( $\triangle$ )	5	1.5	15

Tabla9.5: Serie de cálculos 1: Casos con grafito CFC-A, tubos en Cu, LOCA en el tubo izquierdo y sin extinción del plasma.

pales resultados de todos los análisis llevados a cabo en régimen transitorio. Para cada serie de cálculos, se resume en forma tabulada la descripción de los casos analizados, agrupados por materiales. La elección de cada uno de los casos ha sido decidida en colaboración con el NET-Team como socio europeo del equipo ITER. En cada tabla se describen las condiciones geométricas del monobloque de grafito analizado y las hipótesis de carga y condiciones de contorno realizadas. En dos gráficas se muestra, para cada serie de cálculos, la evolución de la temperatura en los puntos más desfavorables sobre la matriz de grafito y en el tubo de refrigerante, así como la temperatura máxima admisible para el material considerado en cada caso, a partir de la cual se considera que el deterioro del material es irreversible (tabla 9.4).

#### Serie de Cálculos 1: LOCA en un tubo con matriz en CFC-A, tubos en GlidCop sin extinción del plasma.

Se han realizado 6 casos analizando la pérdida de refrigerante en el tubo izquierdo del monobloque, suponiendo que el flujo térmico sobre la cara superior se mantiene en su valor de régimen (tabla 9.5). En el caso il12 se sustituye la condición adiabática sobre los contornos izquierdo y derecho por la condición de radiación del primero sobre el segundo, para analizar el efecto limitador de la excursión de temperatura debido a este fenómeno. El LOCA se supone instantáneo en todos los casos, excepto en el último análisis g242, en el cual se asume un LOCA diferido, con el coeficiente de película obtenido en función de la temperatura de pared afectado por un coeficiente que decrece linealmente de 1 a 0 en 5 s.



Figura 9.29: Monobloque ITER: Serie de cálculos 1. Evolución del punto más caliente en el grafito.

Las figuras 9.29 y 9.30 muestran la evolución de los puntos P1 y P3 (figura 9.22) en cada uno de estos casos.

A partir del examen de estas figuras se deduce:

a) Con esta combinación de materiales, la parte más frágil del componente es el tubo de cobre.

b) Las temperaturas máximas alcanzadas en cada material dependen poco de la disposición del grafito en forma isótropa u anisótropa (compárense las curvas + y \*).

c) La radiación térmica en el hueco lateral entre dos bloques consecutivos puede ser ignorada, y sustituída por una condición adiabática. Se obtenienen así resultados conservadores, pero no sensiblemente diferentes.



Figura 9.30: Monobloque ITER: Serie de cálculos 1. Evolución del punto más caliente en el tubo de cobre.

Serie de Cálculos 2: LOCA en un tubo con matriz en CFC-A, tubos en MoRe sin extinción del plasma.

Para esta combinación de materiales se han realizado cuatro cálculos que se resumen en la tabla 9.6. El caso o552 corresponde a la disposición isótropa en el plano de cálculo del grafito CFC-Aerolor. Los resultados para los puntos más desfavorables en el grafito y en el tubo accidentado se muestran en las figuras 9.31 y 9.32, respectivamente, donde de nuevo se aprecia que la disposición con CFC-Aerolor isótropo en el plano del cálculo, aunque mejora la vida del componente tras el accidente, resulta más importante sobre la temperatura en régimen permanente. A espesores iguales de carbono, las prestaciones del tubo de molibdeno-renio de 1 mm de espesor parecen superiores a las del tubo de cobre (con espesor 1.5 mm).

Tabla9.6: Serie de cálculos 2: Casos con grafito CFC-A, tubos en MoRe, LOCA en el tubo izquierdo y sin extinción del plasma.

		L		
CASO	CASO	Espesor grafito	Espesor tubo	FLUJO
Descripción	identificador	[mm]	[mm]	[MW/m2]
CFCAA	g552 (+)	10	1.0	10
CFCAA	o552 (×)	10	1.0	10
CFCAI	g662 (*)	5	1.0	10
CFCAA	g672 (◊)	5	1.0	15



Figura 9.31: Monobloque ITER: Serie de cálculos 2. Evolución del punto más caliente en el grafito.



Figura 9.32: Monobloque ITER: Serie de cálculos 2. Evolución del punto más caliente en el tubo de MoRe.

Serie de Cálculos 3: LOCA con matriz en CAPG, tubos en Cu sin extinción del plasma.

Con esta combinción de materiales, y en el supuesto de que la carga térmica debida al plasma no se interrumpa tras el LOCA en uno de los dos tubos (o en ambos) se realizaron 5 casos. El LOCA en ambos tubos se considera en el caso d223, mientras que el LOCA diferido sólamente en el tubo izquierdo (en 5 s) se analiza en el caso d242. La extraordinariamente elevada conductividad térmica del grafito pirolítico CAPG hace que las temperaturas máximas de funcionamiento en régimen permanente sean más bien bajas, y la excursión térmica sobre el grafito tras la pérdida de refrigerante es bastante limitada. El componente tiende a fallar por fusión del tubo de cobre, aunque este suceso ocurre en menos de 10 s sólo si el LOCA se produce en ambos tubos o el flujo nominal es de 15  $MW/m^2$ .

Tabla9.7: Serie de cálculos 3: Casos con grafito CAPG, tubos en Cu, y sin extinción del plasma.

CASO	CASO	Espesor grafito	Espesor tubo	FLUJO
Descripción	identificador	[mm]	[mm]	[MW/m2]
LOCA en un tubo	d222 (+)	10	1.5	10
LOCA en ambos tubos	d223 (×)	10	1.5	10
LOCA en un tubo	d232 (*)	10	1.5	15
LOCA lento en 1 tubo	d242 (♦)	10	1.5	15
LOCA en un tubo	d552 (□)	20	1.5	15



Figura 9.33: Monobloque ITER: Serie de cálculos 3. Evolución del punto más caliente en el grafito.



Figura 9.34: Monobloque ITER: Serie de cálculos 3. Evolución del punto más caliente en el tubo de cobre.

Serie de Cálculos 4: LOCA en un tubo con matriz en CAPG, tubos en MoRe sin extinción del plasma.

Los casos analizados con esta combinación de materiales se resumen en la tabla 9.8. El LOCA se limita en todos los casos al tubo izquierdo, en el cual se supone una pérdida instantánea de refrigerante. En las figuras 9.35 y 9.36 se muestra la evolución de los puntos más desfavorables en el grafito y en el tubo, respectivamente.

En esta serie de cálculos se combinan las mejores prestaciones del grafito pirolítico con las de la aleación MoRe. De hecho, en ninguno de los cuatro casos analizados se superan las temperaturas límite para cada uno de los materiales, incluso con flujos de calor de 15  $MW/m^2$ , y para todos los espesores de la matriz de CAPG considerados.

Tabla9.8: Serie de cálculos 4: Casos con grafito CAPG, tubos en MoRe, LOCA en el tubo izquierdo y sin extinción del plasma.

CASO	CASO	Espesor grafito	Espesor tubo	FLUJO
Descripción	identificador	[mm]	[mm]	[MW/m2]
LOCA	d692 (+)	10	1.0	10
LOCA	d662 (×)	10	1.0	15
LOCA	d772 (*)	20	1.0	15
LOCA	d882 (♦)	5	1.0	15



Figura 9.35: Monobloque ITER: Serie de cálculos 4. Evolución del punto más caliente en el grafito.



Figura 9.36: Monobloque ITER: Serie de cálculos 4. Evolución del punto más caliente en el tubo de MoRe.

CASO	CASO	Espesor grafito	Espesor tubo	FLUJO
Descripción	identificador	[mm]	[mm]	[MW/m2]
LOCA 1 tubo	s112 (+)	5	1.0	15
LOCA 1 tubo	s222 (×)	10	1.0	15
LOCA 1 tubo	s132 ( <b>*</b> )	5	1.0	10
LOCA 1 tubo	s242 (�)	10	1.0	10
LOCA 1 tubo + radiación	s173 (□)	5	1.0	15
LOCA 2 tubos + radiación	s174 (∆)	5	1.0	15
LOCA 2 tubos	s182 (  )	5	1.0	15

Tabla9.9: Serie de cálculos 5: Casos con grafito CFC-SEP, tubos en MoRe sin extinción del plasma.

# Serie de Cálculos 5: LOCA con matriz en CFC-SEP, tubos en MoRe sin extinción del plasma.

En esta serie de cálculos se realizaron 7 análisis con las hipótesis que se detallan en la tabla 9.9. En algunos casos se ha tenido presente una condición de contorno adicional sobre la superficie superior, suponiendo radiación sobre un cuerpo mantenido a temperatura constante de  $1273^{\circ}K$  (casos s173 y s174). En los casos s174 y s182 se analiza el LOCA simultáneo e instantáneo en los dos tubos. Las temperaturas en los puntos críticos de representan en las figuras 9.37 y 9.38.

Si se comparan estos resultados con los correspondientes al grafito CFC-Aerolor, parece existir alguna ventaja en el uso de compuesto de fibra de carbono SEP, a igualdad de otros parámetros, ya que permite el uso de espesores mayores en la matriz de carbono (compaárense los puntos de partida en régimen permanente de las figuras 9.37 y 9.33. La temperatura máxima para evitar la volatilización del grafito no se supera en los primeros 10 s del transitorio.

### Serie de Cálculos 6: LOCA instantáneo con extinción lineal del plasma en 10 s.

En esta serie de cálculos se pretende analizar la resistencia de las diversas opciones de diseño a un LOCA instantáneo acompañado de una extinción en el plasma con una constante de tiempo superior (linealmente desde su valor de régimen permanente hasta 0 en 10 s). Se consideran las combinaciones de materiales siguientes: CFC-Aerolor/Cu



Figura 9.37: Monobloque ITER: Serie de cálculos 5. Evolución del punto más caliente en el grafito.



Figura 9.38: Monobloque ITER: Serie de cálculos 5. Evolución del punto más caliente en el tubo de MoRe.

Tabla9.10: Serie de cálculos 6: Casos con grafito CFC-Aerolor, tubos en Cu y extinción del plasma.

CASO	CASO	Espesor grafito	Espesor tubo	FLUJO
Descripción	identificador	[mm]	[mm]	[MW/m2]
LOCA 1 tubo CFCAA	g192 (+)	10	1.5	10
LOCA 2 tubos CFCAA	g193 (×)	10	1.5	10

Tabla9.11: Serie de cálculos 6: Casos con grafito PG/SEP, tubos en MoRe y extinción del plasma.

CASO	CASO	Espesor grafito	Espesor tubo	FLUJO
Descripción	identificador	[mm]	[mm]	[MW/m2]
LOCA 1 tubo CAPG	d663 (+)	10	1.0	15
LOCA 2 tubos CAPG	d664 (×)	10	1.0	15
LOCA 1 tubo CFC-SEP	s152 (*)	5	1.0	15
LOCA 2 tubos CFC-SEP	s162 (�)	5	1.0	10

(tabla 9.10 y figuras 9.39 y 9.40), y CAPG/MoRe, CFC-SEP/MoRe (tabla 9.11 y figuras 9.41 y 9.42).

La figura 9.40 pone de nuevo de manifiesto la fragilidad del tubo en cobre, que funde, incluso si falla sólamente un tubo  $\sim 4 s$  después de la iniciación del accidente, aunque la temperatura en el compuesto de fibra de carbono Aerolor se mantiene muy por debajo de los límites de seguridad. Por el contrario, las figuras 9.41 y 9.42 muestran cómo esta hipótesis sobre el comportamiento del plasma no acarrea graves consecuencias para la integridad del divertor en cualquier caso en el que se cuente con la aleación de MoRe como material de los tubos refrigerantes, incluso si fallan los dos.

#### Análisis de los resultados.

En primer lugar, conviene realizar una serie de consideraciones sobre los resultados obtenidos para las distribuciones de temperatura en régimen permanente. Agrupando los casos con referencia a los diferentes materiales empleados en la matriz de grafito, las figuras 9.43 - 9.45 muestran las temperaturas máximas alcanzadas en cada cálculo en el grafito (nótese que en algunas ocasiones el mismo campo en régimen permanente sirve para varios análisis en transitorio).



Figura 9.39: Monobloque ITER: Serie de cálculos 6. Evolución del punto más caliente en el grafito CFC-Aerolor.



en el tubo de Cu.



Figura 9.41: Monobloque ITER: Serie de cálculos 6. Evolución del punto más caliente en el grafito CAPG o CFC-SEP.



Figura 9.42: Monobloque ITER: Serie de cálculos 6. Evolución del punto más caliente en el tubo de MoRe.



Figura 9.43: Monobloque ITER: Temperaturas máximas alcanzadas en el grafito CFC-Aerolor en régimen permanente.



Figura 9.44: Monobloque ITER: Temperaturas máximas alcanzadas en el grafito CFC-SEP en régimen permanente.

Adoptando, según la última recomendación de ITER [73] una temperatura máxima admisible de  $1273^{\circ}K$  en la superficie de la armadura, se observa que la única configuración aceptable con CFC-Aerolor corresponde al caso g222 (5 mm de espesor,  $10 MW/m^2$  de flujo), aunque el caso g662, (que es igual, pero con MoRe en lugar de cobre como material en el tubo) sólo queda por encima del límite establecido por un margen de ~  $90^{\circ}K$ . Para el grafito CFC-SEP, las configuraciones aceptables corresponden a los casos s132, s162 (5 mm de espesor,  $10 MW/m^2$  de flujo) y s242 (10 mmde espesor,  $10 MW/m^2$  de flujo), aunque los casos s112, s152, s173, s174 y s182 (5 mmde espesor,  $15 MW/m^2$  de flujo) quedan sólo ~  $40^{\circ}K$  sobre el límite de temperaturas establecido. Con respecto al grafito CAPG, todos los casos analizados resultan admisi-



Figura 9.45: Monobloque ITER: Temperaturas máximas alcanzadas en el grafito CAPG en régimen permanente.



Figura 9.46: Monobloque ITER: Espesor máximo tolerado en la armadura para no superar T = 1273 K.

bles. Nótese, por otra parte, como estos resultados coinciden con el caso de geometría más compleja (y no exactamente equivalente) analizado en la sección anterior, donde con un espesor de CFC-Aerolor de 11 mm se obtuvo una temperatura máxima nominal de ~ 1700  $^{0}K$  sobre el grafito.

La figura 9.46 muestra, de modo aproximado (a partir de los resultados obtenidos), el espesor de grafito permisible para cada uno de los tres matriales que se han considerado, con las hipótesis de referencia sobre los flujos térmicos. En el caso de grafito pirolítico CAPG se podrían adoptar espesores superiores a los 20 mm. Si se consideran  $15 MW/m^2$ , el único material alternativo es el CFC-SEP con un espesor de 5 mm. Para un espesor de 10 mm (que parece el mínimo razonable), el flujo térmico no debe exceder los 10  $MW/m^2$  si se pretende limitar la temperatura máxima a 1273 °K.

Por cuanto respecta al análisis transitorio, la tabla 9.12 muestra la estadística de los casos, clasificados por tiempo de supervivencia. Además de las temperaturas máximas de la tabla 9.4, se adopta como criterio adicional de deterioro irreversible del material en el tubo un flujo térmico a través de sus paredes superior a los  $40 Mw/m^2$  ('burn out critical flux'). Las temperaturas máximas alcanzadas en régimen permanente al final se muestran en la figuras 9.47 y 9.48.

Con respecto a la hipótesis de no extinción del plasma, sólamente una matriz de grafito CAPG con tubos de MoRe permite al componente soportar un LOCA en la mitad de los tubos de forma indefinida. Nótese, sin embargo, que el caso d882, con un espesor de grafito de tan sólo 5 mm provoca la destrucción del componente por fusión de las paredes del tubo en aproximadamente 50 s. Esto pone de nuevo de manifiesto la necesidad de alcanzar un compromiso entre espesores pequeños que no protegen eficientemente los tubos de refrigerante, pero con los que se obtiene una temperatura de funcionamiento inferior, y espesores grandes, que resisten mejor a la erosión, pero dan temperaturas en régimen permanente más elevadas.

El punto clave en el análisis si se supone una extinción del plasma como consecuencia de la iniciación del accidente es, como se apuntó en la sección anterior, *el tiempo efectivo de anulación del flujo térmico*, que es un parámetro sobre el cual existe todavía bastante incertidumbre. Del análisis realizado se deduce que tanto los casos con grafito CAPG como los que consideran CFC-SEP (en ambos casos con MoRe) como material en el tubo resultan aceptables con la hipótesis de carga realizada. En particular, comparando los casos d663 y d664 parece evidente que las mejora en la respuesta del componente con circuito de refrigeración *doble* no justifica las complicaciones técnicas que tal elección conlleva.

En general, en el caso de suponer que la carga térmica debida al plasma efectivamente se interrumpe, dos mecanismos competitivos deben ser considerados: el primero de ellos es la inercia propia del plasma y de los mecanismos de detección y actuación para interrumpir el quemado del plasma, y el segundo es la inercia térmica de los materiales y del flujo de refrigerante en los tubos, que amortiguan y retardan los efectos del accidente. Del equilibrio entre estos dos factores resultan consecuencias aceptables o no de la secuencia accidental que se estudie.



Figura 9.47: Monobloque ITER: Temperaturas máximas alcanzadas en los casos de supervivencia del componente sin extinción del plasma.



Figura 9.48: Monobloque ITER: Temperaturas máximas alcanzadas en los casos de supervivencia del componente con extinción del plasma.

Como conclusión, puede decirse que la disposición de doble tubo de refrigeración independiente no aporta ventajas relevantes en la hipótesis de extinción del plasma, aunque puede ser de utilidad para la seguridad del componente en la hipótesis de no extinción del plasma, sólo si los materiales elegidos son CAPG y MoRe, con espesores de grafito superiores a los 5 mm. Estas conclusiones, sin embargo, no son definitivas en el caso de extinción gradual del plasma, debiéndose completar el estudio tomando en consideración diferentes casos sobre las inercias respectivas de los dos fenómenos competitivos apuntados más arriba.

Para finalizar, y con referencia a la figura 9.22, se muestra de forma más detallada el

Sin limite	30 s	10 s	5 s
g152 g682	d222 o552	g552 g662	g112 i112
d692 d662	s222 s242	d242 d552	o112 g222
d772 d663	:	s112 s132	g232 g242
d663 s162		s173	g192 g193
			g672 d223
			d232 s174
			s182

Tabla9.12: Análisis Paramétrico: Supervivencia del divertor en los casos estudiados.

transitorio correspondiente al caso s242 (tabla 9.9), que es quizá el más representativo. Las figuras 9.49 y 9.50 muestran el campo de temperaturas en régimen permanente, así como el correspondiente a t = 10 s. La figura 9.51 representa la evolución de los puntos seleccionados de la malla de elementos finitos, con los marcadores definidos en la figura 9.22. La figura 9.52 muestra la temperatura sobre la línea superior de la malla en contacto con el plasma (línea LT), para los tiempos t = 0 s, t = 2.5 s, t = 5 s, t = 7.5 sy t = 10 s. Para los mismos instantes, las figuras 9.53, 9.54, 9.55 y 9.56 representan la temperatura a lo largo de la línea LL, a lo largo de la línea LR, sobre el desarrollo de la superficie del tubo que no sufre el LOCA (línea TR), y el flujo térmico que pasa al refrigerante en el mismo tubo, respectivamente. En estas dos últimas figuras se distingue claramente la parte del perímetro mojado en la cual se produce ebullición nucleada.



ITER - DIVERTOR Case #242



Figura 9.49: Monobloque ITER: Caso s242. Régimen permanente.



Figura 9.50: Monobloque ITER: Caso 242. Campo de temperaturas a t= 10 s.



Figura 9.51: Monobloque ITER: Caso s242. Evolución de la temperatura en los nodos seleccionados (figura 9.22).



Figura 9.52: Monobloque ITER: Caso s242. Temperaturas sobre la línea LT (figura 9.22).



Figura 9.53: Monobloque ITER: Caso s242. Temperaturas sobre la línea LL (figura 9.22).



Figura 9.54: Monobloque ITER: Caso s242. Temperaturas sobre la línea LR (figura 9.22).



Figura 9.55: Monobloque ITER: Caso s242. Temperaturas sobre la línea TR (figura 9.22).



Figura 9.56: Monobloque ITER: Caso s242. Flujo térmico sobre la línea TR (figura 9.22).

## 9.4 Análisis Térmico del Divertor ITER en Condiciones de Punto de Nulo Magnético Oscilante.

Los análisis mostrados en la sección anterior evidencian la dificultad que se encuentra en conseguir espesores relativamente eficaces en el monobloque de grafito, sin elevar la temperatura de funcionamiento en régimen nominal del componente hasta valores no admisibles. Además, la optimización física de los parámetros que definen el plasma en sus condiciones nominales conducen a una revisión al alza del valor máximo del pico de flujo térmico sobre el componente, que se considera definitivamente establecido en torno a los  $15 MW/m^2$ . En esta sección se analiza, desde el doble punto de vista de proyecto y seguridad, la propuesta de realizar un diseño que permita variar periódicamente las condiciones de carga térmica sobre el componente, de modo que se reparta más uniformemente sobre toda la superficie útil y se consigan temperaturas de trabajo nominales menores.

El flujo térmico superficial sobre la placa divertora se distribuye en modo muy irregular, presentando dos picos muy intensos de deposición de energía en aquellos puntos en los cuales las líneas de campo magnético separatrices, que se intersectan en el *punto de nulo*, inciden sobre la placa (figura 9.57). Los máximos de flujo térmico se encuentran en esta posición ya que siguiendo estas líneas abandonan el plasma la mayor parte de los iones pesados y partículas  $\alpha$  que lo pueblan.

Para una serie de parámetros del plasma dada, la energía total depositada en el divertor es constante, aunque se pueden variar los valores de pico cambiando el ángulo de incidencia de las líneas de campo sobre la placa. La figura 9.58 muestra la distribución de energía depositada en función de la coordenada espacial en torno al pico mayor, correspondiente a un ángulo de inclinación de 15<sup>°</sup>. Esta distribución está trazada con un valor máximo de  $q_{max} = 10 MW/m^2$ . La familia de curvas correspondiente a otros valores de pico q puede obtenerse aplicando la transformación:

$$x = x_0 \frac{q_{max}}{q}$$

$$y = y_0 \frac{q}{q_{max}}$$
(9.1)

donde  $x_0$  e  $y_0$  son los puntos correspondientes a la curvas con  $q_{max} = 10 MW/m^2$ .



Figura 9.57: ITER: Detalle de la región del divertor.



Figura9.58: ITER: Distribución normalizada a 10 MW/m2 del flujo térmico en el pico mayor sobre el divertor.

Nótese que el origen de coordenadas espaciales en la dirección poloidal se toma en el punto de intersección de la separatriz con la placa divertora.

La propuesta de diseño de punto de nulo oscilante consiste en actuar, mediante unos devanados magnéticos especialmente diseñados para este propósito, sobre el punto de nulo, haciéndole girar en torno a su punto estático. La amplitud de este movimiento es naturalmente proporcional a la intensidad de corriente que circule por la bobina y se pretende obtener una frecuencia optimizada para reducir la carga térmica sobre el componente y distribuirla más uniformemente en torno al punto crítico. Los estudios preliminares conducidos por el NET-Team en este sentido apuntan la posibilidad de hacer rotar el punto de nulo con una frecuencia de 0.3 Hz y una amplitud  $d_r = 30 mm$ . Este valor, debido a la inclinación de 15<sup>o</sup> entre la separatriz exterior y la superficie divertora, se transforma en una amplitud de ~ 0.116 m sobre la placa (Vieider [163]), como se muestra en la figura 9.59. El efecto de esta oscilación de la curva de deposición de energía sobre la respuesta térmica del componente ha sido estudiada, en el marco del proyecto INTOR, por Mattas et al. [92], en régimen estático, adoptando una distribución de flujo menos concentrado en torno al pico. Nuestro propósito en esta



Figura 9.59: ITER: Oscilación del punto de nulo estándar.

sección es analizar de forma detallada los transitorios de puesta en funcionamiento de la mecanismo de punto de nulo oscilante, así como los accidentes que involucran una pérdida de este mecanismo ('Loss of Sweeping Accident', LOSA), para varias frecuencias y varios valores de pico.

La figura 9.60 muestra la sección de la placa divertora analizada. Propuestas por el NET-Team, han sido adoptadas dos geometrías de base, que difieren sólamente en la densidad de tubos por metro de longitud en la dirección de la anchura de la placa divertora (Federici [48]). El diámetro interno de los tubos es de 10 mm, y su espesor de 1 mm. Por su interior circula agua a presión p = 35 bar y temperatura  $t = 80 \,{}^{\circ}C$ . La curva de variación del coeficiente de película en el tubo en función de la temperatura de pared ha sido obtenida experimentalmente en Sandia National Laboratories por Koski [80], teniendo en cuenta la presencia de la cinta diametral para aumentar la turbulencia. La longitud total de la sección analizada (línea BUP) es de 9 mm (malla F11) y de 12 mm (malla F12). El espesor mínimo de grafito en la parte posterior es de 4 mm. El espesor efectivo de la protección (distancia P2-P3) debe ser determinado de modo que se obtenga una temperatura máxima en régimen pulsado estándar ( $q_{max} = 15 MW/m^2$ , f = 0.3 Hz,  $d_r = 30 mm$ ) en torno a los  $1273 \,{}^{\circ}K$ , para evitar tasas de erosión del material demasiado elevadas.

Los resultados del análisis preliminar que se llevó a cabo para determinar el espesor de grafito CFC-SEP óptimo se muestran en la figura 9.61, donde se representa gráficamente la temperatura máxima en régimen pulsado frente al espesor de CFC-SEP. Se observa que la temperatura máxima depende más del espesor de grafito que de la densidad de tubos en la dirección toroidal. A partir de los resultados obtenidos, parece que el valor óptimo del espesor de la protección se sitúa en torno a los 16 mm, valor que se adopta como referencia para todo el análisis posterior.

Para mostrar la eficacia de esta técnica, se llevaron a cabo dos cálculos simulando la puesta en marcha del mecanismo de oscilación del punto de nulo, correspondientes a las geometrías F11 y F12, respectivamente. El análisis se realiza en la dirección *poloidal* para estudiar la distribución de temperaturas a lo largo del canal de refrigeración y sobre la superficie del grafito expuesta al plasma. Se analizó una sección del divertor de 0.7m de longitud, centrada sobre el pico mayor de flujo térmico (que coincide con el punto x = 0.2m). Para tener en cuenta la discontinuidad física de las placas de grafito en la dirección paralela al flujo de refrigerante y evitar resultados físicamente no significativos por la difusión del pico de calor, se adoptó una conductividad térmica muy reducida en esta dirección, tomando el 10 % del valor de la conductividad en la dirección perpendicular al flujo.

Como se señaló en capítulos precedentes, el flujo de calor a través del espacio ocupado por el grafito entre dos tubos se tiene en consideración por superposición de los elementos cuadrangulares de acoplamiento térmico convectivo entre la pared y el refrigerante (que tienen en consideración el perímetro mojado real de los tubos) con otros elementos triangulares conductivos, afectados de un factor de escala que considera la fracción de longitud ocupada por el grafito entre tubos sobre el plano ecuatorial de los mismos. Así, para la geometría F11, hay alrededor de 52 tubos por unidad de longitud en dirección toroidal, mientras que para la geometría F12 este número es de 40. Esta técnica de cálculo permite reducir con buenos resultados los análisis tridimensionales (excesivamente complicados en casos como éste en los que se debe reducir en número de Péclet hasta valores aceptables) a casos simplificados bidimensionales.

Las figuras 9.62 y 9.63 muestran una representación tridimensional del campo de



Figura 9.60: ITER-Punto Nulo Oscilante. Mallas de elementos finitos utilizadas en el análisis.


Figura 9.61: ITER-Punto Nulo Oscilante. Determinación del espesor de grafito óptimo.

temperaturas obtenido con punto de nulo estático, para los casos F11 y F12, respectivamente. Las correspondientes temperaturas máximas alcanzadas sobre el pico son  $1840^{0}K$  y  $1910^{0}K$ .

En el instante t = 0 s, la curva de flujo térmico comienza a oscilar por efecto del campo magnético periódico, com amplitud 0.116 m y frecuencia 0.3 Hz. La figura 9.64 muestra el transitorio térmico para los puntos A ( $\Box$ ) y B ( $\Delta$ ) de la figura 9.59, sobre la superficie exterior del grafito, con coordenadas espaciales x = 0.2 m y x = 0.316 m, correspondientes a la geometría F11. La figura 9.65 es equivalente, pero corresponde a la geometría F12. En ambos casos la temperatura máxima que alcanza el grafito en su punto más desfavorable es alrededor de  $1300 \, {}^{0}K$ , en excelente concordancia con los resultados obtenidos mediante el análisis bidimensional en el plano transversal con las mallas de elementos finitos de la figura 9.60, que serán presentados más adelante. Nótese que el punto A presenta dos máximos relativos por ciclo, mientras que el punto B muestra sólo uno.

Las figuras 9.66 y 9.67 muestran el transitorio sobre la superficie exterior del grafito, para los casos F11 y F12, respectivamente. Se aprecia que el pico de temperaturas inicial en torno a los  $1800^{\circ}K$  desaparece, siendo sustituido por dos picos de valor inferior, centrados sobre los valores extremos del recorrido de la curva de flujo.

Las figuras 9.68 y 9.69 corresponden al transitorio sobre la temperatura del refrigerante para los casos F11 y F12. Se comprueba una vez más que el comportamiento



Figura 9.62: ITER: Campo de temperaturas en la dirección poloidal (F11).



Figura 9.63: ITER: Campo de temperaturas en la dirección poloidal (F12).



Figura9.64: ITER: Transitorio de inicio de la oscilación del punto de nulo. Puntos A y B (F11).



Figura 9.65: ITER: Transitorio de inicio de la oscilación del punto de nulo. Puntos A y B (F12).



Figura9.66: ITER: Transitorio sobre la superficie de CFC-SEP en el inicio de la oscilación del punto de nulo (F11).



Figura 9.67: ITER: Transitorio sobre la superficie de CFC-SEP en el inicio de la oscilación del punto de nulo (F12).





térmico del componente es relativamente poco sensible a la densidad de tubos por unidad de profundidad en el plano de cálculo analizado.

Como segundo paso en este estudio, se escogen las mallas de elementos finitos mostradas en la figura 9.60 y se analiza el campo de temperaturas, con las dos geometrías propuestas, en esta sección transversal en los puntos A (x = 0.2m) y B (x = 0.316m) para analizar el accidente (que denominaremos LOSA 1) en cual se pierde la oscilación del punto de nulo debido a un fallo en el devanado correspondiente (este transitiorio es prácticamente el inverso del que se ha presentado anteriormente). Se seleccionan los puntos P1 (marcador +) y P3 (marcador ×) de la figura 9.60 como nodos representativos para el análisis térmico.

El flujo térmico efectivo en función del tiempo para los puntos A y B se muestra en la figura 9.70.

Las figuras 9.71-9.74 muestran el transitorio térmico sobre estos puntos, correspondiendo la 9.71 a la sección A con la geometría F11, la 9.72 a la sección B con la misma geometría, la 9.73 a la sección A con la geometría F12 y finalmente la 9.74 al punto B con la malla de elementos finitos F12.



Figura 9.69: ITER: Transitorio sobre el refrigerante en el inicio de la oscilación del punto de nulo (F12).



Figura 9.70: ITER: Flujos térmicos efectivos sobre los puntos A y B debidos a la pulsación del punto de nulo.



Figura 9.71: ITER: LOSA 1. Sección A. Malla F11.

Comparando estos transitorios con los mostrados en las figuras 9.64 y 9.65 se comprueba que el análisis en la dirección poloidal da resultados prácticamente idénticos, validando así la hipótesis de 'cuasi-bidimensionalidad' formulada. Las consecuencias de este accidente no son muy graves, ya que en el régimen permanente alcanzado al final no se supera la temperatura crítica ni del grafito CFC-SEP ni del MoRe, aunque se deben esperar tasas de erosión del material bastante considerables.

La siguiente serie de cálculos (LOSA 2) considera un accidente de tipo LOSA acompañado de un incremento en el valor de pico de la curva de flujo térmico hasta alcanzar  $q_{max} = 30 MW/m^2$ . Se supone que el accidente se desarrolla en dos etapas, en la primera de las cuales el valor de pico aumenta hasta los  $30 MW/m^2$  citados, manteniendose el régimen pulsado, que se pierde finalmente en la segunda fase. Los resultados se muestran en las figuras 9.75 y 9.76, correspondientes a las secciones en los puntos A y B, respectivamente, donde se aprecian claramente las dos fases estudiadas. La geometría tipo corresponde a la malla F11.

La temperatura final del grafito se aproxima a los  $4800^{\circ}K$ , bastante por encima de la temperatura de sublimación, lo cual demuestra que con el valor de pico considerado un accidente de tipo LOSA resulta fatal para el componente a muy breve término.





Figura 9.75: ITER: LOSA 2. Sección A. Malla F11.



Figura 9.76: ITER: LOSA 2. Sección B. Malla F11.

La tercera y última secuencia accidental estudiada (LOSA 3) involucra una reducción en la frecuencia de oscilación del punto de nulo. Se analiza un cambio de 0.3 Hz a 0.1 Hz antes de la pérdida definitiva de la pulsación, sin cambio en el valor de pico del flujo térmico, que se mantiene en  $15 MW/m^2$ , tomando como referencia la sección A, con las dos geometrías estándar F11 y F12. Los resultados se muestran en las figuras 9.77 y 9.78. Se observa que el cambio de frecuencia produce sólo ciclos más largos, con un incremento medio en las temperaturas de pico de tan sólo ~  $250^{\circ}K$ (de  $1200^{\circ}K$  a  $1350^{\circ}K$ . Cuando se pierde definitivamente la oscilación, el valor final alcanzado corresponde al caso LOSA 1.

Como conclusión de este estudio puede afirmarse que la adopción de un mecanismo de oscilación para el punto de nulo aporta notables ventajas sobre el comportamiento térmico del divertor. Sin embargo, la secuencia accidental en la cual se pierde este funcionamiento pulsado puede tener consecuencias graves para la integridad del componente, siendo probablemete necesario desarrollar un sistema de detección y actuación automático capaz de extinguir la reacción de fusión nuclear si tal suceso se produce. El estudio detallado de las frecuencias admisibles, así como la evaluación de las conse-



cuencias termomecánicas y la resistencia a la fatiga del material son importantes áreas para futuros análisis.

## Capítulo 10 Conclusiones.

Entre las fuentes de energía alternativas que se desarrollan en la actualidad, la fusión termonuclear parece ofrecer garantías de seguridad y minimización del impacto ambiental. A pesar de que el diseño de un reactor comercial de fusión aparece todavía bastante lejano en el horizonte de la actual tecnología, parece pertinente la inclusión de aspectos de seguridad en el proceso de concepción y diseño de cualquier máquina de estas características.

Este trabajo ha sido un intento de aproximación a la evaluación de las consecuencias de uno de los accidentes más temidos por el equipo de proyecto del reactor europeo de fusión por confinamiento magnético NET, es decir la disfunción del sistema de refrigeración de los componentes directamente enfrentados con el plasma. Los diseños de referencia fueron el propio proyecto NET, promovido por la Comisión de las Comunidades Europeas en colaboración con otros paises, en sus diferentes etapas de desarrollo, y el reactor internacional ITER, auspiciado por la Agencia Internacional de la Energía Atómica (IAEA).

Debido a las particulares características del sistema que debe ser analizado, la puesta a punto de un modelo de cálculo capaz de analizar el acoplamiento entre los diferentes mecanismos de transporte de energía asociados al problema, lo suficientemente rápido y robusto como para permitir extensos estudios paramétricos con esfuerzo computacional mínimo ha constituido la primera parte del trabajo.

Desde este punto de vista *computacional*, las aportaciones fundamentales de esta tesis pueden resumirse como sigue:

a) Las consecuencias numéricas que se derivan del acoplamiento entre la aproxi-

mación estándar de elementos finitos con el balance de energía debido a la radiación a través de cavidades internas ha sido analizado con detalle. La destrucción del carácter simétrico y definido positivo de las matrices que discretizan el fenómeno, debido a la aproximación de 'macroelementos radiantes', similar al método de elementos de contorno, acarrea ciertas consecuencias sobre los métodos de resolución del problema no lineal que han sido estudiados. Se ha derivado la expresión de la matriz de precondicionamiento jacobiana óptima para acelerar la convergencia del proceso iterativo asociado.

b) Una extensa experimentación numérica ha contribuido a identificar la familia de métodos óptima para la resolución de el problema considerado. Se analizaron en profundidad las prestaciones de los diferentes métodos secantes de aproximación a la matriz jacobiana, habiéndose encontrado que se método quasi-Newton de rango 1 (método de Broyden) aparece como el más adecuado para el tratamiento de los casos estudiados. Por otra parte se ha puesto de manifiesto el compromiso entre el número de iteraciones requerido y el número de factorizaciones de la matriz de precondicionamiento efectuado, insistiendo en el hecho que la combinación adecuada de estos factores depende fundamentalmente del número de grados de libertad del problema que se estudia y debe, por lo tanto ser decidido por el analista.

c) Basada en la combinación de los métodos secantes con los métodos de continuación, se ha propuesto una nueva técnica de selección automática del paso de tiempo. En lugar de controlar el paso de tiempo a través de consideraciones espectrales, el uso de algoritmos de integración incondicionalmente estables permite el uso de pasos de tiempo mayores, haciendo así posible el análisis de problemas rígidos en la variable temporal (con constantes de tiempo que difieren de orden de magnitud) de modo rápido y computacionalmente económico. El error en la integración temporal se estima a cada paso de tiempo mediante un análisis a posteriori. Esta medida es útil para realizar un control sobre la longitud del arco descrito por el campo escalar discretizado, asegurando así un error de integración distribuido uniformemente durante todo el intervalo temporal que se analiza.

Entre las áreas de desarrollo futuro que se pueden afrontar a partir del trabajo presentado en este tesis, se puede destacar la combinación de los algoritmos utilizados con técnicas de partición implícita-explícita, óptimas para su implementación sobre ordenadores con procesadores paralelos, así como la obtención de un pequeño sistema experto que sea capaz de reconocer, en función del tamaño del problema, el grado de no linealidad del mismo, la distribución espacial de la las zonas críticas y estimaciones de error de integración temporal más sofisticadas, el método más adecuado para la resolución del problema, con niveles de exactitud libremente fijados por el usuario.

El método de longitud de arco, del cual se ha presentado en esta tesis una aplicación original fuera del dominio disciplinar en el cual fué concebido (la mecánica estructural), se presenta como una metodología prometedera aplicable a otros campos de la simulación numérica tratados mediante elementos finitos, como la mecánica de fluídos o en general, problemas de campos en régimen transitorio.

Con respecto a la parte de aportación tecnológica de esta tesis, los análisis realizados han puesto de manifiesto que, en relación a la carga térmica provocada por el calor residual en las estructuras tras un accidente de pérdida de refrigerante, mínimas medidas de diseño permiten el funcionamiento eficaz de los mecanismos pasivos de remoción del calor previstos, la radiación térmica entre superficies directamente enfrentadas y la convección natural en los tubos refigerantes en el caso de un accidente de pérdida de flujo, sin rotura de los circuitos involucrados. Ambos fenómenos han sido analizados en profundidad, encontrándose una perfecta adecuación entre la eficacia a corto plazo de la circulación natural residual del refrigerante (debida a la diferencia relativa de densidades en la ramas fría y caliente del circuito), y la eficacia a largo plazo de la radiación térmica como mecanismo difusor de la energía almacenada en los componentes mal refrigerados hacia las partes externas del reactor. Incluso en el caso de total y completa desaparición del refrigerante y condiciones de reactor adiabático, la temperatura del reactor se uniformiza con relativa rapidez, si se asegura la extinción del plasma en tiempos relativamente breves, alcanzándose la temperatura de fusión de los componentes críticos (las capas interiores de la envoltura reproductora externa) tan sólo varios días después de la iniciación del accidente.

El componente más sensible a la secuencia accidental considerada es, con gran diferencia, el divertor. Este elemento es el encargado de recibir el intenso flujo de calor debido al bombardeo de partículas cargadas emergentes del plasma en ignición. Este

intenso flujo térmico provoca tasas de erosión considerables, que son mayores cuanto mayor es la temperatura nominal de funcionamiento. Se hace necesario, por lo tanto, encontrar un compromiso entre el diseño de un espesor grande, que protege de modo más eficaz el resto del reactor y aumenta la vida del componente, y la elección de un espesor pequeño, que limita el valor de la temperatura máxima alcanzada en la superficie expuesta al plasma, obteniendo así tasas de erosión inferiores. Se ha realizado, siguiendo en todo momento las indicaciones del equipo de proyecto del reactor NET, un esfuerzo en la dirección de definir tanto los materiales más adecuados como la disposición de los mismos para optimizar el funcionamiento nominal del componente, tomando como reactor de referencia ITER. Las consecuencias de un accidente de pérdida de refrigerante han sido estudiadas con detalle. El parámetro crítico para asegurar la supervivencia del componente a una eventualidad de este tipo resulta ser el tiempo medio de extinción del plasma. Dependiendo del diseño y de los materiales considerados, el valor mínimo de este parámetro que permite asegurar que el accidente no acarrea mayores consecuencias se sitúa en torno a los 5 - 10 s. El análisis de seguridad paralelo que se ha llevado a cabo muestra la limitada efectividad de la disposición de 2 circuitos de refrigeración independientes, cada uno de los cuales encargado de eliminar el 50% de la potencia total depositada en el componente.

Durante la elaboración de esta memoria, la principal dificultad encontrada en relación a sus aspectos tecnológicos y de diseño ha consistido en la permanente revisión del diseño de referencia del reactor. La aplicación del concepto de seguridad intrínseca, que conlleva la necesidad de aplicar el estudio de seguridad desde las más tempranas etapas del diseño, acarrea necesariamente una realimentación entre diseñadores y analistas de seguridad que dificulta la concepción de un proyecto básico. Además, la tecnología de reactores de fusión, como cualquier otra nueva técnica, requiere el desarrollo de nuevos materiales, cuyas propiedades y características no son bien establecidas sino tras un cierto periodo de validación, introduciendo así una fuente adicional de incertidumbre. A la espera de que la física del plasma proporcione evidencias sobre la posibilidad de mantener en ignición de modo continuado un reactor de este tipo, con posibilidad de explotación económica de la energía generada, parece evidente que el tipo de accidente más temible en una instalación de este tipo es precisamente el analizado en esta memoria. Los resultados sobre las consecuencias de los transitorios térmicos accidentales de pérdida de refrigerante para un reactor específico podrán ser determinados mucho más exactamente cuando se disponga de un diseño global definitivo, contribuyendo así a hacer más viable esta prometedora nueva fuente de energía.

## Bibliografía

- [1] Abdou, M. et al., "Blanket Comparison and Selection Study", ANL/FPP-83-1, Argonne National Laboratories (1983).
- [2] Andritsos, F., "Use of P-Thermal Code for Modelling the ITER Divertor Plate under LOCA Conditions", Tech. Note No. I.90.25, JRC Ispra (1990).
- [3] ANSYS, Finite Element Engineering Analysis System, User's Manual. Swanson Analysis Systems, Inc., Houston, Texas (USA).
- [4] Aguirre-Ramírez, G. and Oden, J. T., "Finite Element Tecnique Applied to Heat Conduction in Solids with Temperature Dependent Thermal Conductivity", Int. J. Num. Meth. Eng., 7, 345-355 (1973).
- [5] Alarcón, E. y Reyero, P., "Guía de Introducción al Método de los Elementos de Contorno", ETS Ingenieros Industriales (Universidad Politécnica de Madrid) (1983).
- [6] Amodeo, R. J. and Ghoniem, N. M., "Development of Design Equations for Ferritic Alloys in Fusion Reactors". Nuclear Eng. and Design/Fusion, 2, p.97 (1985).
- [7] Baker, C. C. et al., "STARFIRE: A Commercial Tokamak Fusion Power Plant Study". Argonne National Laboratory, ANL/FPP-80-1 (1980).
- [8] Bathe, K. J. and Cimento, A. P., "Some Practical Procedures for the Solution of Nonlinear Finite Element Equations", Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng., 22, 59-85 (1980).
- [9] Bathe, K. J., Finite Element Procedures in Engineering Analysis. Prentice-Hall (1982).
- [10] Blink, J. A. and Lasche, G. P., "The Influence of Steel Type on the Activation and Decay of Fusion Reactor First Walls". Nuclear Technology/Fusion, 4, p.1146 (1983).
- [11] Bowers, D. A. and Haines, J. R., "Response of Fusion Reactor First Walls to Major Plasma Disruptions". J. Nuclear Materials, 103 & 104, 81-86 (1981).
- [12] Brodlie, K. W. et al., "Rank-One and Rank-Two Corrections to Positive Definite Matrices Expressed in Product Form". J. Inst. Maths. Appl., 11, 73-82 (1973).
- [13] Brebbia, C. A., The Boundary Element Method for Engineers. Pentech Press (1978).

- [14] Broyden, C. G., "A Class of Methods for Solving Nonlinear Simultaneous Equations". Math. Comp., 19, 577-593 (1965).
- [15] Brussino, G. and Sonnad, V., "A Comparison of Direct and Preconditioned Iterative Techniques for Sparse, Unsymmetric systems of Linear Equations", Int. J. Num. Meth. Eng., 28, 801-815 (1989).
- [16] Cardella, A. et al., "The Divertor System Design for ITER", ITER Internal Note, IL/PC/89/E-11 (1989).
- [17] Cardella, A. (NET Team), comunicación personal (1989).
- [18] Carslaw, H. S. and Jaeger, J. C., *Heat Conduction in Solids*. Oxford University Press (1959).
- [19] Casini, G. et al., "Environmental Aspects of Fusion Reactors", Tech. Note No. I.04.B1.85.156, JRC Ispra (1985).
- [20] Casini, G. and Farfaletti-Casali, F., "Engineering Solutions for Components Facing the Plasma in Experimental Power Fusion Reactors". Nuclear Eng. and Design/Fusion, 3, 399-408 (1986).
- [21] EDF, CEA, FRAMATOME., "CATHARE. Dossier d'exploitation. D4.1. Equipe Mixte. Note SETH/LEML/86-36, Grenoble (1986).
- [22] Cha, Y. S. et al., "Design of Self-Cooled Liquid-Metal Blankets for Tokamaks and Tandem Mirror Reactors", Fusion Technology, 8, 90-113 (1985).
- [23] Chazalon, M. et al., "Blanket Testing in NET", Proc. 15th Symposium on Fusion Technology, ed. A. M. van Ingen, A. Nijsen-Vis and H. T. Klippel, Utrecht (The Netherlands), 115-124 (1988).
- [24] Checchi, E., "Metodi di Approssimazione Numerica per Fenomeni Ottici Radiativi", Tesi di Laurea, Facoltà di Scienze. Università degli studi di Milano (1989).
- [25] Chin, J. H. and Frank, D. R., "Engineering Finite Element Analysis of Conduction, Convection and Radiation", chapter 10 in Numerical Methods in Heat Transfer, Vol. 3, ed. R. W. Lewis. John Wiley & Sons (1984).
- [26] Christie, I. et al., "Finite Element Methods for Second Order Differential Equations with Significant First Derivatives", Int. J. Num. Meth. Eng., 10, 1389-1396 (1976).
- [27] Ciarlet, P. G., Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation. Masson (1983).
- [28] Comini, G. et al., "Finite Element Solution of Nonlinear Heat Conduction Problems with Special Reference to Phase Change", Int. J. Num. Meth. Eng., 8, 613-624 (1974).
- [29] Conn, R. W. and Johnson, A. W., "Minimizing Radioactivity and Other Features of Elemental and Isotopic Tailoring for Fusion Reactors", Nuclear Technology, 41, p.1146 (1978).

- [30] Crisfield, M. A., "Incremental Iterative Solution Procedures for Nonlinear Structural Analysis", Paper 3.1 of Numerical Methods for Nonlinear Problems: Vol. 1. Ed. by C. Taylor, E. Hinton and D. R. J. Owen, Pineridge Press, Swansea (U. K.) (1980).
- [31] Crisfield, M. A., "An Arc-Length Method Including Line Searches and Accelerations", Int. J. Num. Meth. Eng., 19, 1269-1289 (1979).
- [32] Crivelli, L. A. and Idelsohn, S. R., "A Temperature-Based Finite Element Solution for Phase Change Problems", Int. J. Num. Meth. Eng., 23, 99-119 (1986).
- [33] Crocker, J. G. and Holland D. F., "Safety and Environmental Issues of Fusion Reactors", Proc. of the IEEE, 69, 968-976 (1981).
- [34] Crutzen, Y. R. et al., "Electromagnetics Effects on the NET First Wall Caused by a Plasma Disruption Event", Proc. 14th SOFT, Avignon (France) (1988).
- [35] Currie, I. G. and Martin W. W., "Temperature Calculations for Shell Enclosures Subjected to Thermal Radiation", Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng., 21, 75-90 (1980).
- [36] Davidon, W. C., "Variable Metric Method for Minimization", Rep. ANL-5990 Rev, Argonne National Laboratories, Illinois (1959).
- [37] Dennis, J. E. and Moré, J. J., "Quasi-Newton Methods, Motivation and Theory", SIAM Review., 19, 46-89 (1977).
- [38] Dewell, L. and Edlund, O., "Environmental Radiation Doses from Tritium Releases - Fusion Reactor Safety". Report of a Technical Committee Meeting on Fusion Reactor Safety. IAEA-TECDOC-440 Culham (1986).
- [39] Dolan, T. J., Fusion Research. Pergamon Press (1982).
- [40] Donéa, J., "On the Accuracy of Finite Element Solutions to the Transient Heat Conduction Equation", Int. J. Num. Meth. Eng., 8, 103-110 (1973).
- [41] Donéa, J. and Laval H., "Nodal Partition of Explicit Finite Element Methods for Unsteady Diffusion Problems", Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng., 68, 189-204 (1988).
- [42] Douglas, J. and Dupont, T., "Galerkin Methods for Parabolic Equations", SIAM J. Num. Anal., 7, 575-626 (1970).
- [43] Douglas, J. and Dupont, T., "Galerkin Methods for Parabolic Equations with Nonlinear Boundary Conditions", Numer. Math., 20, 213-237 (1973).
- [44] Drevot, M., "CAD Thermal and Thermomechanical Analysis: The Tool for HER-MES", Proc. 6th International Conference on Numerical Methods in Heat Transfer, ed. by R. W. Lewis and K. Morgan, Swansea (U. K.), 820-834 (1989).
- [45] Dupont, T. et al., "Three Level Galerkin Methods for Parabolic Equations", SIAM J. Num. Anal., 11, 392-410 (1974).
- [46] Emery, A. F., "Instructions Manual for the Program SHAPEFACTOR", Sandia National Laboratories, SAND80-8027 (1980).

- [47] Engelman, M. S. et al., "The Application of Quasi-Newton Methods in Fluid Mechanics", Int. J. Num. Meth. Eng., 17, 707-718 (1981).
- [48] Federici, G. (NET Team), comunicación personal (1989).
- [49] Felippa, C. A., "Penalty Spring Stabilization of Augmented Jacobians", J. Appl. Mechanics., 54, 730-733 (1987).
- [50] Fenoglio, F., "Studi per la Refigerazione Naturale di un Reattore a Fusione in Condizioni Accidentali", Tesi di Laurea, Facoltà di Ingenieria. Politecnico di Torino (1988).
- [51] Fenoglio, F. et al., "Conditions for the Passive Removal of Residual Power from a Fusion Reactor", Fusion Eng. and Design, 11, 455-466 (1989).
- [52] Fetter, S., "A Calculational Methodology for Comparing the Accident, Occupational and Waste Disposal Hazards of Fusion Reactor Designs", Fusion Technology, 8, 1359 (1985).
- [53] Fiacco, A. V. and McCormick, G. P., Nonlinear Programming: Sequential Unconstrained Minimization Techniques. John Wiley & Sons (1968).
- [54] Fletcher, C. A. J., Computational Techniques for Fluid Dynamics (I). Fundamentals and General Techniques. Springer Verlag (1988).
- [55] Fletcher, R. and Powell, M. J. D., "A Rapidly Convergent Descent Method for Minimization", Comput. J., 6, 163-168 (1963).
- [56] Fletcher, R. and Reeves, C. M., "Function Minimization by Conjugate Gradients", Comput. J., 7, 149-154 (1964).
- [57] François, Y., "On the NET Cooling System Assumptions for Safety Analysis", NET Internal Note, NET/88/IN-027 (1988).
- [58] Godunov, S. K. and Ryabenski, V. S., The Theory of Difference Schemas. North-Holland (Amsterdam) (1964).
- [59] Gulden, W. and Raeder, J., "Safety Aspects of the Next European Torus", Fusion Technology, 14, No. 1 (1988).
- [60] Hashizume, H. et al., "Thermomechanical Behaviour of the First Wall Subjected to Plasma Disruption". Fusion Eng. and Design, 5, 141-154 (1987).
- [61] Hassanein, A. M. et al., "Surface Melting and Evaporation During Disruptions in Magnetic Fusion Reactors". Nuclear Eng. and Design/Fusion, 1, 307-324 (1984).
- [62] Hestenes, M. R. and Stiefel, E., "Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems", Nat. Bur. of Standards Journal of Research, 49, 409-436 (1952).
- [63] Hogge, M., "Secant versus Tangent Methods in Nonlinear Heat Transfer Analysis", Int. J. Num. Meth. Eng., 16, 51-64 (1980).
- [64] Hogge, M., "A Comparison of Two- and Three-Level Integration Schemes for Nonlinear Heat Conduction", chapter 4 in Numerical Methods in Heat Transfer, Vol. 1, ed. R. W. Lewis, K. Morgan and O. C. Zienkiewicz. John Wiley & Sons (1981).

- [65] Holdren, J. P. and Fetter, S., "Contribution of Activation Products to Fusion Accident Risk: Part II. Effects of Alternative Materials and Designs". Nuclear Technology/Fusion, 4, 599-617 (1983).
- [66] Hopkirk, R. J. et al., "Analysis of Heat Transfer in Complex Geometries due to Combined Conduction, Radiation and Natural Convection", chapter 12 in Numerical Methods in Heat Transfer, Vol. 2, ed. R. W. Lewis, K. Morgan and B. A. Schrefler. John Wiley & Sons (1983).
- [67] Hottel, H. C. and Sarofim, A. F., Radiative Transfer. McGraw-Hill (1967).
- [68] Householder, A. S., Principles of Numerical Analysis. McGraw-Hill Book Co. (1953).
- [69] Hsu, M. B. and Nickell R. E., "Coupled Convective and Conductive Heat Transfer by Finite Element Methods", in *Finite Element Methods in Flow Problems*, ed. J. T. Oden, O. C. Zienkiewicz, R. H. Gallagher, C. Taylor. UAH Press, University of Alabama, Huntsville, pp 427-449 (1974).
- [70] Hughes, T. J. R., "Unconditionally Stable Algorithms for Nonlinear Heat Conduction", Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng., 10, 135-139 (1977).
- [71] Isaacson, E. and Keller, H. B., Analysis of Numerical Methods. John Wiley & Sons (1966).
- [72] ITER Conceptual Design Interim Report. International Atomic Energy Agency. Vienna, Austria (1989).
- [73] ITER-TEAM Divertor Engineering Design. Summary of June-October 1989 Working Session. Max Planck Institüt für Plasmaphysik. Garching bei München (RFA) (1989).
- [74] Janssens, W., "Optimization Design Study of a Divertor Element for a Tokamak-Type Fusion Reactor", JRC Internal Report, JRC Ispra (1988).
- [75] Jensen, M. K. and Bensler, H. P., "Saturated Forced-Convective Boiling Heat Transfer with Twisted Tape Insert", ASME Journal of Heat Transfer, 108, -(1986).
- [76] Jones, A. V. and Rocco, P., "Air Ingress Accidents in Tokamaks", Proc. 15th SOFT, Utrecht (The Netherlands), 1731-1739 (1988).
- [77] Klippel, H. T., "Analysis of Thermal-Hydraulic Transients of the Water-Cooled Eutectic LiPb Blanket of NET", Fusion Eng. and Design, 6, 79-93 (1988).
- [78] Klippel, H. T., "Thermal Behaviour of Bare and Coated First Walls Under Severe Plasma Disruption Conditions", Fusion Eng. and Design, 9, 49-54 (1989).
- [79] Kolar, R. and Kamel, H. A., "On Some Efficient Solution Algorithms for Nonlinear Finite Element Analysis", Proc. Europe-US Symposium on Finite Element Methods for Nonlinear Problems, ed. P. G. Bergan, K. J. Bathe and W. Wunderlich, Trondheim (Norway), 425-445 (1985).
- [80] Koski, J. A., comunicación personal. Sandia National Laboratories. Fusion Technology Division 6428. PO Box 5800 Albuquerque NM (USA) (1989).

- [81] Larsen, M. E. and Howell J. R., "The Exchange Factor Method: An Alternative Basis for Zonal Analysis of Radiating Enclosures", ASME Journal of Heat Transfer, 107, 936-942 (1984).
- [82] Lees, M., "A Linear Three Level Difference Scheme for Quasi Linear Parabolic Equations", Maths. Comp, 20, 516-622 (1966).
- [83] Liu, W. K. et al., "Implementation of Mixed-Time Partition Algorithms for Nonlinear Thermal Analysis of Structures", Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng., 48, 254-263 (1985).
- [84] Logan, B. G. et al., "MARS Mirror Advanced Reactor Study. Final Report". UCRL Report No 53840 (1984).
- [85] Najambadi, F. et al., "The TITAN Reversed Field Pinch Fusion Reactor Study. Scoping Phase Report", UCLA-PPG-1100 (1983).
- [86] Narasimhan, S. P. et al., "Mixed Explicit-Implicit Iterative Finite Element Scheme for Diffusion-Type Problems. II: Solution Strategy and Examples", Comp. Meth. Appl. Mech. Eng., 52, 325-344 (1977).
- [87] Nickell, R. E. and Hibbit, H. D., "Thermal and Mechanical Analysis of Welded Structures", Nuclear Eng. and Design, 32, 110-120 (1975).
- [88] McCracken, G. M. et al., "Erosion and Deposition Processes in Tokamaks", Proc. 15th Symposium on Fusion Technology, ed. A. M. van Ingen, A. Nijsen-Vis and H. T. Klippel, Utrecht (The Netherlands), 151-166 (1988).
- [89] Malinovic, B. and Kazimi, M. S., "Passive Heat Removal in Liquid-Metal Cooled Reactors", Fusion Technology, 10, 1205-1210 (1986).
- [90] Massidda, J. E. and Kazimi, M. S., "Thermal Design Considerations for Passive Safety of Fusion Reactors", PFC/RR-87-18. Massachusetts Institute of Technology (1987).
- [91] Matera, R., "AISI 316 Reference Book", Tech. Note No. I.07.b1.84.62, JRC Ispra (1984).
- [92] Mattas, R. F. et al., "Divertor Engineeering Studies for the International Tokamak Reactor", Fusion Technology, 10, 364-381 (1986).
- [93] Matthies, H. and Strang, G., "The Solution of Nonlinear Finite Elements Equations", Int. J. Num. Meth. Eng., 14, 1613-1626 (1979).
- [94] Mazille, F. and Djerassi, H., "Analysis of LOCA/LOFA Risks for the Water Cooled First Wall of a NET Type Fusion Reactor", Proc. 15th SOFT, Utrecht (The Netherlands), 1740-1744 (1988).
- [95] Mitalas, G. P. and Stephenson, D. G., "FORTRAN IV Programs to Calculate Radiant Interchange Factors", National Research Council of Canada, Division of Building Research, Ottawa (Canada), DBR-25 (1966).
- [96] Moons, F. et al., "Divertor Plate Concept with Carbon Based Armour for NET", Proc. 15th SOFT, Utrecht (The Netherlands), 859-865 (1988).

- [97] Morizumi, S. J., "Analytical Determination of Shape Factors from a Surface Element to an Axisymmetric Surface", AIAA Journal, 2, 2028-2030 (1964).
- [98] Myers, G. E., "The Critical Time Step for Finite Element Solutions of Two Dimensional Heat Conduction Transients", ASME Journal of Heat Transfer, 100, 120-127 (1978).
- [99] Oden, J. T., Finite Elements of Nonlinear Continua. McGraw-Hill Book Company (New York). (1972).
- [100] Orivuori, S., "Efficient Method for Solution of Nonlinear Heat Conduction Problems", Int. J. Num. Meth. Eng., 14, 1461-1476 (1979).
- [101] Ortega, J. M. and Rheinboldt, W., Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables, Academic Press, New York (1970).
- [102] Osnes, D., "A Method for Efficiently Incorporating Radiative Boundaries in Finite Element Programs", en Numerical Methods in Thermal Problems, Vol. III, ed. by R. W. Lewis and J. A. Johnson and W. R. Smith, Pineridge Press, 36-46 (1983).
- [103] Park, K. C. and Underwood, P. G., "A Variable Step Central Difference Iterative Finite Element Scheme - Part I Theoretical Aspects", ASME paper, presented in Proc. Pressure Vessels and Piping Conference, San Francisco, CA (1979).
- [104] Paterno, G., "High Temperature Superconducting Materials and Their Prospects for Large, High Field Magnetic Coils", Proc. 15th Symposium on Fusion Technology, ed. A. M. van Ingen, A. Nijsen-Vis and H. T. Klippel, Utrecht (The Netherlands), 181-188 (1988).
- [105] PDA Engineering. P-Thermal and P-Viewfactor Users Manual. Santa Ana, California (USA) (1988).
- [106] PDA Engineering. PATRAN II User's Guide, Vol. I and II. Santa Ana, California (USA) (1987).
- [107] Pegon, P., "Contribution à l'étude de l'hystérésis élastoplastique", Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble (1988).
- [108] Pegon, P. and Guelin, P., "Implicit Finite Strain Analysis in Convected Frames", Proc. 5th International Symposium on Numerical Methods in Engineering, ed. by R. Gruber, J. Periaux and R. P. Shaw, Lausanne (Switzerland), 165-172 (1989).
- [109] Piet, S. J. et al., "Potential Consequences of Tokamak Fusion Reactor Accidents: The Materials Impact", PFC/RR-82-18. Massachusetts Institute of Technology (1982).
- [110] Polak, E. et Ribière, G., "Sur la convergence de la méthode des gradients conjugués", Revue Française d'Informatique et Recherche Opérationelle, 16, R1 (1969).
- [111] Polak, E., Computational Methods in Optimization. Academic Press (New York). (1971).
- [112] Ponti, C., "Calculation of Radioactive Decay Chains Produced by Neutron Irradiation", EUR 9389EN Commission of the European Communities (1984).

- [113] Ponti, C., "Activation Calculations for NET-DN", Tech. Note No. I.87.116, JRC Ispra (1987).
- [114] Ponti, C., "Activation Calculations for NET-Shielding Blanket", Tech. Note No. I.88.73, JRC Ispra (1987).
- [115] Press, W. H. et al., Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing. Cambridge University Press. (1986).
- [116] Puccinelli, E. F., "View Factor Computer Program (Program VIEW) User's Manual", Goddard Space Fligth Center, Greenbelt, MD, X-324-73-272 (1973).
- [117] Raeder, J., "On NET Afterheat Under Loss of Active Cooling Conditions -Transient Analysis Including the TF Coils as Heat Sinks", NET Internal Note, NET/88/IN-016 (1988).
- [118] Raeder, J. and Gulden, W., "NET Safety Analyses and the European Safety and Environmental Programme", Proc. 15th Symposium on Fusion Technology, ed. A. M. van Ingen, A. Nijsen-Vis and H. T. Klippel, Utrecht (The Netherlands), 63-84 (1988).
- [119] Ramm, E., "Strategies for Tracing Non Linear Responses Near Limit Points", pp. 68-89 in Non Linear Finite Element Analysis in Structural Mechanics, ed. W. Wunderlich, E. Stein and K. J. Bathe, Springer Verlag, New York (1981).
- [120] Rao, S. S., The Finite Element Method in Engineering. Pergamon Press (1982).
- [121] RELAP 5/MOD 2 Code Manual, vol. I, II, Idaho National Engineering Laboratory. EEG-SAAM-6377, April 1984.
- [122] Renda, V. and Papa, L., "Mechanical Analysis of a Model of the Breeding Blanket of NET in Faulted Conditions", Nuclear Eng. and Design/Fusion, 3, 363-372 (1986).
- [123] Renda, V. and Soria A., "General Safety Guidelines for Fusion Plant Design", Tech. Note No. I.87.40, JRC Ispra (1987).
- [124] Renda, V. et al., "Thermal Effects of Residual Power on Plasma Facing Components of NET", Fusion Eng. and Design, 6, 269-279 (1988).
- [125] Richtmyer, R. D. and Morton, K. W., Difference Methods for Initial Value Problems. Interscience Publishers (1967).
- [126] Riks, E., "An Incremental Approach to the Solution of Snapping and Buckling Problems", Int. Journal Solid Struct., 15, 529-551 (1979).
- [127] Roache, P. J., Computational Fluid Dynamics. Hermosa Publishers (Alburquerque, NM) (1972).
- [128] Rohsenow, W. M. and Hartnet, J. P. (eds), Handbook of Heat Transfer, McGraw-Hill Publishing Co, New York (1975).
- [129] Roth, P. A. and Chow, H., "Analysis of a Liquid Metal Cooled Blanket Using ATHENA", Fusion Technology, 8, 581-585 (1985).

- [130] Roth, P. A. and Herring, J. S., "A Code for the Analysis of Transients in Fusion Reactors", Proc. 9th Symposium on Engineering Problems in Fusion Research, IEEE, 1779-1782 (1981).
- [131] Roux, J., "Cours sur les méthodes de Newton", Eléctricité de France. Note EDF-IMA HI/3826-02 (1981).
- [132] Roux, J., "De la méthode de Newton à la méthode BFGS", Eléctricité de France. Note EDF-IMA HI/3948-02 (première partie), EDF-IMA HI/4101-07 (seconde partie), EDF-IMA HI/4383-07 (troisième partie) (1983).
- [133] Sanz, J. and Perlado, J. M., "Transmutation in Martensitic Reduced Activation Alloys Based on DIN 1.4914 Martensitic Steel", Proc. 15th SOFT, Utrecht (The Netherlands), 1002-1008 (1988).
- [134] Scaffidi-Argentina, F. et al., "Thermomechanical and Electromagnetic Analysis of a New Divertor Concept for the ITER Reactor", Tech. Note No. I.89.74, JRC Ispra (1989).
- [135] Scaffidi-Argentina, F. and Piazza G., "Investigations into the Use of Beryllium for Plasma Facing Components", Tech. Note No. I.89.116, JRC Ispra (1989).
- [136] Shapiro, A. B., "FACET: A Radiation View Factor Computer Code for Axisymmetric, 2D Planar and 3D Geometries with Shadowing", Methods Development Group. Mech. Eng. Dept. Lawrence Livermore Laboratories (1984).
- [137] Shapiro, A. B., "Computer Implementation, Accuracy and Timing of Radiation View Factor Algorithms", ASME Journal of Heat Transfer, 107, 730-732 (1985).
- [138] Sherman, A. H., "On the Newton-Iterative Methods for the Solution of Nonlinear Equations", SIAM J. Num. Anal., 15, 775-771 (1978).
- [139] Sherman, J. and Morrison, W. J., "Adjustement of an Inverse Matrix Corresponding to Changes in the Elementes ogf a Given Column or a Given Row of the Original Matrix", Ann. Math. Statist., no. 20, 621 (1949).
- [140] Siegel, R. and Howell, J. R., Thermal Radiation Heat Transfer. John Wiley & Sons (1985).
- [141] Skeie, G. and Felippa C. A., "A Local Hyperellyptic Constraint for Nonlinear Analysis", Proc. 3rd International Conference on Numerical Methods in Engineering: Theory and Applications, ed. by G. N. Pande and J. Middleton, Swansea (U. K.), 13-27 (1990).
- [142] Soria, A. and Pegon, P., "On the Performance of Quasi-Newton Iterative Methods to Solve the Nonlinear Heat Diffusion Equation", Proc. 6th International Conference on Numerical Methods in Heat Transfer, ed. by R. W. Lewis and K. Morgan, Swansea (U. K.), 1120-1130 (1989).
- [143] Soria, A. and Pegon, P., "An Arc-Length-Based Time Stepping Algorithm to Analyze Thermal Transients", Proc. 1st International Conference on Advanced Computational Methods in Heat Transfer, ed. by L. C. Wrobel, C. A. Brebbia and A. J. Nowak. Southampton (U. K.), Vol 1, 357-367 (1990).

- [144] Soria, A. et al., "Progress in the Studies of Passive Heat Removal in the Next European Torus under Accident Contiditions", Fusion Technology, 16, 474-490 (1989).
- [145] Soria, A. et al., "Thermal Analysis of a Tokamak Divertor Plate After a Sudden Coolant Dry-Out", submitted to Fusion Eng. and Design (1989).
- [146] Spalding, D. B., "A Novel Finite Difference Formulation for Differential Expressions Involving both First and Second Derivatives", Int. J. Num. Meth. Eng., 4, 551-559 (1972).
- [147] Sparrow, E. M., "A New and Simpler Formulation for Radiative Angle Factors" ASME Journal of Heat Transfer, series C, 85, 81-88 (1963).
- [148] Sparrow, E. M. and Cess, R. D., Radiation Heat Transfer. Brooks/Cole Publishing Co. (1966).
- [149] Stelzer, J. F. and Welzel, R., "Experiences in Nonlinear Analysis of Temperature Fields with Finite Elements", Int. J. Num. Meth. Eng., 24, 59-73 (1987).
- [150] Stelzer, J. F. and Welzel, R., "Treating Exceptionally Nonlinear Temperature Fields", Int. J. Num. Meth. Eng., 25, 571-580 (1988).
- [151] Stoer, J., Einführung in die Numerische Mathematik. Springer Verlag. (1972).
- [152] Storti, M. et al., "An Efficient Tangent Scheme for Solving Phase Change Problems", Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng., 66, 65-86 (1986).
- [153] Sze, D. K. et al., "Fusion Blanket Inherent Safety Assessment", Fusion Technology, 10, 1197-1204 (1986).
- [154] Taghavi, K. et al., "Special Features of First Wall Heat Transfer in Liquid Metal Fusion Reactor Blankets", Fusion Technology, 12, 104-112 (1986).
- [155] Thornton, E. A., "Application of Upwind Convective Finite Elements to Practical Conduction/Forced Convection Thermal Analysis", Proc. 1st International Conference on Numerical Methods in Heat Transfer, ed. R. W. Lewis and K. Morgan, Pineridge Press, Swansea (U. K.), 402-411 (1979).
- [156] Thornton, E. A. and Wieting, A. R., "A Finite Element Thermal Analysis Procedure for Several Temperature Dependent Parameters", ASME Journal of Heat Transfer, 100, 551-553 (1978).
- [157] Thornton, E. A. and Wieting, A. R., "Finite Element Methodology for Transient Conduction-Forced Convection Thermal Analysis", AIAA Paper 79-1100 (1979).
- [158] Toschi, R., "NET and the European Fusion Technology Programme", Proc. 15th SOFT, Utrecht (The Netherlands), 47-62 (1988).
- [159] Varga, R. S., Matrix Iterative Analysis. Prentice-Hall Series in Automatic Computation (1962).
- [160] Verschuur, K. A. and Cornelissen, P., "Specifications for Activation Calculations on Shielding Blanket and Divertor Concepts to be Performed by JRC Ispra", NET Internal Note, NET/87/IN-012 (1987).

- [161] Vetter, J. E., "Breeding Blanket Development for NET", Proc. 15th Symposium on Fusion Technology, ed. A. M. van Ingen, A. Nijsen-Vis and H. T. Klippel, Utrecht (The Netherlands), 101-114 (1988).
- [162] Vieider, G. et al., "Progress in the Development of a First Wall for NET", Fusion Eng. and Design, 9, 25-34 (1989).
- [163] Vieider, G. (NET Team), comunicación personal (1990).
- [164] Wait, R. and Mitchell, A. R., Finite Element Analysis and Applications. John Wiley & Sons (1985).
- [165] Wempner, G. A., "Discrete Approximations Related to Non Linear Theories of Solids", Int. J. Solids Struct., 7, 1581-1599 (1971).
- [166] White, R. E., An Introduction to the Finite Element Method with Applications to Nonlinear Problems. John Wiley & Sons (1985).
- [167] Wieting, A. R. and Thornton, E. A., "Finite Element Thermal Analysis of Convectively Cooled Aircraft Structures", chapter 20 in Numerical Methods in Heat Transfer, Vol. 1, ed. R. W. Lewis, K. Morgan and O. C. Zienkiewicz. John Wiley & Sons (1981).
- [168] Wilson, E. L. and Nickell R. E., "Application of the Finite Element Method to the Heat Conduction Analysis", Nuclear Eng. and Design, 4, 276-286 (1966).
- [169] Wilson, E. L. et al., "Finite Element Analysis of Linear and Nonlinear Heat Transfer", Nuclear Eng. and Design, 29, 110-124 (1974).
- [170] Winget, J. M. and Hughes, T. J. R., "Solution Algorithms for Nonlinear Heat Conduction Analysis Employing Element by Element Iterative Strategies", Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng., 52, 711-815 (1985).
- [171] Winter, G., "Diferentes Algoritmos de Resolución de Problemas No Lineales de Transferencia de Calor", en Seminario de Análisis Numérico, ed. F. Michavila. ETS Ingenieros de Minas. Universidad Politécnica de Madrid (1984/85).
- [172] Wolf, H. et al., "Thermal and Stress Analysis of Composite Nuclear Fuel Rods by Numerical Methods", chapter 8 in Numerical Methods in Heat Transfer, Vol. 1, ed. R. W. Lewis, K. Morgan and O. C. Zienkiewicz. John Wiley & Sons (1981).
- [173] Wong, R. L., "User's Manual for CNVUFAC The General Dynamics Heat Transfer View Factor Program", University of California, Lawrence Livermore Laboratory, UCID-17275 (1976).
- [174] Wood, W. L., "On the Zienkiewicz 3- and 4- Time Level Schemes Applied to the Numerical Integration of Parabolic Equations", Int. J. Num. Meth. Eng., 12, 1717-1726 (1978).
- [175] Zienkiewicz, O. C. and Parekh, C. J., "Transient Field Problems: Two Dimensional and Three Dimeensional Analysis by Isoparametric Finite Elements", Int. J. Num. Meth. Eng., 2, 61-71 (1970).
- [176] Zienkiewicz, O. C. and Heinrich J. C., "The Finite Element Method and Convection Problems in Fluid Mechanics", in *Finite Element Methods in Flow Problems*, Vol. 3, ed. R. H. Gallagher et al. John Wiley & Sons, pp 1-22 (1978).

- [177] Zienkiewicz, O. C., The Finite Element Method. McGraw-Hill (1982).
- [178] Zolti, E., "Material Data for Thermal and Mechanical Analysis of Plasma Facing Components of NET", NET Internal Note, NET/89/IN-012 (1989).
- [179] Zucchetti, M. and Zublena, M., "A Study on the Prospects for Development of a New Low Activity Austenitic Stainless Steel for Fusion Applications", Proc. 15th SOFT, Utrecht (The Netherlands), 991-998 (1988).

## BIOGRAFIA

El doctorando nació en Albacete el 4 de Julio de 1961, donde cursó los estudios primarios y de enseñanza media. En Alicante completó el Curso de Orientación Universitaria en la rama de ciencias con calificación de matrícula de honor.

En 1979 ingresó en la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Valencia, donde finalizó los estudios correspondientes a la especialidad Técnicas Energéticas en 1985 con nota media de 6.9. En 1986 defendió su proyecto fin de carrera que obtuvo la calificación de matrícula de honor.

En 1985 recibió una ayuda a la investigación por parte del Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas dependiente del Ministerio de Industria para asistir a un curso sobre Análisis Probabilistico del Riesgo aplicado a la Industria Nuclear, auspiciado por UNESA, US Department of Energy y Sandia National Laboratories (USA). En 1986 comenzó sus estudios de doctorado en el Departamento de Ingenieria Nuclear de la ETSII de Madrid.

A principios de 1987 obtuvo una beca de doctorado otorgada por el Centro Común de Investigación de la Comisión de las Comunidades Europeas, con sede en Ispra (Italia), donde ha desarrollado, en el marco del Programa Europeo de Fusión Termonuclear Controlada y en colaboración con el Instituto de Fusión Nuclear de la Universidad Politécnica de Madrid, el trabajo de investigación cuyo resultado es esta tesis doctoral.

Desde Agosto de 1990, el doctorando desempeña las funciones de agente cientificotécnico para la Comisión de las Comunidades Europeas en el instituto de investigación mencionado más arriba.

## **RELACION DE PUBLICACIONES**

- V. Renda, A. Soria, L. Papa, "Thermal Effects of Residual Power on Plasma Facing Components of NET", Fusion Eng. and Design, 6, 269-279 (1988).

F. Fenoglio, V. Renda, L. Papa, A. Soria, "Conditions for the Passive Removal of Residual Power from a Fusion Reactor", Fusion Eng. and Design, 11, 455-466 (1989).
A. Soria, V. Renda, L. Papa, F. Fenoglio, "Progress in the Studies of Passive Heat Removal in the Next European Torus under Accident Contiditions", Fusion Technol-

ogy, 16, 474-490 (1989).

-A. Soria, P. Pegon, "On the Performance of Quasi-Newton Iterative Methods to Solve the Nonlinear Heat Diffusion Equation", Proc. 6th International Conference on Numerical Methods in Heat Transfer, ed. by R. W. Lewis and K. Morgan, Swansea (U. K.), 1120-1130 (1989).

- A. Soria, P. Pegon, "An Arc-Length-Based Time Stepping Algorithm to Analyze Thermal Transients", Proc. 1st International Conference on Advanced Computational Methods in Heat Transfer, ed. by L. C. Wrobel, C. A. Brebbia and A. J. Nowak, Southampton (U. K.), Vol. 1, 357-367 (1990).

- A. Soria, V. Renda, L. Papa, "Thermal Analysis of a Tokamak Divertor Plate After a Sudden Coolant Dry-Out", aceptado para publicación en Fusion Eng. and Design (1990).

- A. Soria, P. Pegon, "Quasi-Newton Iterative Strategies Applied to the Heat Diffusion Equation", aceptado para publicación en Int. J. for Num. Meth. Eng. (1990)

- V. Renda, A. Soria, L. Papa, P. Rocco, "Non Linear Thermal Transient Analysis of a Divertor Plate for ITER". Proc. 16th Symposium on Fusion Technology. London (U. K.) (1990).