

CNEA-NT 13/77

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

EL METODO NUMERICO DE ELEMENTOS FINITOS Y SU APLICACION
A PROBLEMAS DE FISICA DEL CONTINUO. DESARROLLO ADQUIRIDO
Y TRABAJOS REALIZADOS EN EL CENTRO ATOMICO BARILOCHE

Fernando G. Basombrío y Gustavo Sánchez.

Centro de Cómputos
Centro Atómico Bariloche
Comisión Nacional de Energía Atómica

San Carlos de Bariloche
Abril de 1977

El presente informe tiene por objeto la divulgación en la C.N.E.A. del desarrollo alcanzado en el Centro de Cómputos del Centro Atómico Bariloche (C.A.B.) respecto al método matemático de elementos finitos, y su aplicación a problemas de Mecánica Estructural y de Física del Continuo. Se da una síntesis retrospectiva de cada uno de los trabajos realizados, y una somera descripción de los que se encuentran en ejecución.

La finalidad de esto es ofrecer a eventuales usuarios potenciales del C.A.B., y de la C.N.E.A. en general, las herramientas de cálculo desarrolladas en la mencionada línea en este Centro de Cómputos, y la posibilidad de encarar nuevos problemas análogos a los aquí bosquejados.

A. SINTESIS PREVIA

Dentro de un plan de colaboración ya existente, entre el Departamento de Combustibles Nucleares de la Comisión Nacional de Energía Atómica y este Centro de Cómputos, surge hacia el mes de Julio de 1975 la propuesta de encarar por técnicas matemático numéricas, problemas bidimensionales de mecánica estructural de las vainas de elementos combustibles tipo Central Nuclear Atucha (C. N. A.). En una primera etapa la idea fue analizar tales problemas en el rango elástico del material, y en sucesivas etapas posteriores incorporar los efectos de la plasticidad y viscoelasticidad. Se convino en que el método numérico realmente indicado da das las características de tales problemas es el de elementos fi nitos.

El primer informe producido, en Noviembre del mismo año, da cuenta de un estudio elástico de la concentración de tensiones o originado por la presencia de los patines en la citada vaina. Se utiliza el código VARORT, un programa de elementos triangulares con polinomios de primer grado, que es esencialmente el que aparece en el libro sobre el tema de O. Zienkiewicz, edición 1967.

A partir de Febrero de 1976 comienzan a desarrollarse en es te Centro de Cómputos programas generales, dentro de este mismo método destinados a resolver problemas de elasticidad y termoe-
lasticidad para simetría plana y de revolución. Dichos programas, que reemplazan y superan en sus posibilidades al código VARORT, constituyen el llamado sistema ELASTE^F.

Pocos meses después se completa el sistema de códigos CUARM, programas generales cuyo objetivo es resolver para sistemas de simetría plana y de revolución, la ecuación cuasiarmónica lineal y no lineal. Dicha ecuación, generalización de la de Poisson para coeficientes variables, describe como es sabido innumerables fenómenos físicos: conducción de calor estacionaria, campos eléctricos y magnéticos, problemas hidrodinámicos, etc.

Estas herramientas de cálculo permitieron hasta la fecha,

Abril de 1977, la resolución de diversos problemas de relevancia tecnológica, originados en dicho Departamento de Combustibles Nucleares, en el Departamento de Materiales de la C.N.E.A., y en el C.A.B.:

- * Análisis termoelásticos de concentración de tensiones en vainas de elementos combustibles tipo C.N.A. en la zona de la soldadura con el tapón inferior y en la zona de los patines, aisladas y en contacto con el separador.

- * Estudio de la distribución de la temperatura en barras combustibles tipo C.N.A. en la zona de los patines.

- * Estudio de los efectos térmicos locales que producen partículas de PuO_2 en el interior de barras combustibles tipos C.N.A. y MZFR con plutonio.

- * Un modelo para la descripción de un proceso de refusión por arco bajo vacío destinado a la producción de Zircaloy-4.

- * Estudio de la transferencia de calor en dispositivos experimentales.

- * Contribuciones al diseño de dispositivos electrónicos para desviar partículas cargadas, etc.

La resolución de estos problemas dió lugar a la presentación de nueve trabajos: informes internos, notas técnicas y publicaciones.

Ultimamente se completó la puesta a punto y pruebas del código CTR, programa general de cálculo que resuelve la ecuación cuasiarmónica con derivada temporal. Constituye una generalización de los códigos del sistema CUARM para problemas no estacionarios con simetría plana y de revolución. Actualmente se trabaja en las primeras aplicaciones de este código, y en su extensión al caso no lineal.

Se encuentra además en etapa de prueba, un nuevo código (llamado PLASTEFl) cuyo propósito es resolver problemas elastoplásticos bidimensionales en sistemas de simetría plana y de revolución, basado en el criterio de fluencia de von Mises y en el método incremental de "tensiones iniciales". Permite simular el comporta-

miento de materiales con funciones arbitrarias de endurecimiento por deformación, y condiciones de contorno de muy amplia variedad.

Actualmente se están aplicando los códigos mencionados para la resolución de los siguientes problemas:

- * Estudio de un modelo simplificado para la descripción del mecanismo de "blistering" en metales irradiados con iones livianos.
- * Un análisis termoelástico con dependencia temporal de hornos con simetría axial luego del apagado, con la finalidad de optimizar las dimensiones del aislante.
- * Estudio de la distribución espacial del campo eléctrico y cálculo de trayectorias de partículas cargadas en un dispositivo experimental.
- * Análisis de la variación temporal y espacial de la temperatura en un sistema para la realización de experimentos de Resonancia Paramagnética Electrónica con dependencia de la temperatura.

El equipo humano a cuyo cargo están estas tareas pertenece a este Centro de Cómputos y por tal motivo la línea de desarrollo aquí descrita no constituye su único objetivo. Se presta además apoyo matemático-numérico para problemas de diversa índole originados en este centro de investigaciones.

B. TRABAJOS REALIZADOS

Se presenta a continuación una síntesis de los mismos ordenada cronológicamente.

B.1.

Título: Estudio elástico de tensiones y deformaciones en zona de patines de la vaina "Atucha", a temperatura constante.

Autor: Fernando G. Basombrío

Divulgación: Informe Interno C.A.B.

Fecha: Noviembre de 1975.

Contenido: Se realiza un análisis bidimensional de la concentración de tensiones causada por la presencia del patín soldado a la vaina (ver figura 1), lo que origina una destrucción de la simetría de revolución de la misma y un debilitamiento local. Es un estudio típico en rango elástico que no considera los efectos termoelásticos. En figura 2 se muestra el recinto de cálculo. Código empleado: VARORT (Mencionado en A).

B.2.

Título: Cálculos elásticos en vainas para elementos combustibles tipo C.N.A. en la zona de los patines, a temperatura constante.

Autores: Gustavo Sánchez y Fernando G. Basombrío.

Divulgación: Informe Interno N°1/76-C.C. Centro de Cómputos. C.A.B. (C.N.E.A.).

Informe interno N°21-6/76-CC(C.A.B.) Dpto. de Combustibles Nucleares (C.N.E.A.).

Fecha: 23 de Abril de 1976.

Contenido: El presente trabajo apunta, como algunos de los que aquí se describen, al mejor conocimiento de la mecánica estructural de vainas a efectos de su eventual rediseño con vistas a optimizar el comportamiento global del reactor. En particular lo que aquí se estudia, contribuye a analizar la posibilidad de una reducción del espesor de vaina, teniendo en cuenta el debilita-

miento originado por la presencia de los patines.

Para la situación analizada en B.1. (figura 2), con las dimensiones reales de la vaina y también con espesores reducidos de ésta, mediante cálculos bidimensionales en el rango elástico y también con la aproximación de temperatura uniforme, se determina:

a) Las presiones internas sobre la vaina que anulan el juego entre los patines y los apoyos del separador, en función del valor inicial de este.

b) Las presiones internas para las que el material llega al límite de fluencia, según el criterio de fluencia de von Mises.

Estos resultados serán generalizados y mejorados en el trabajo indicado en B.6.

Código empleado: ELASTEF2 (ver sección C.1.2.).

B.3.

Título: Tensiones y deformaciones elásticas en la unión de la vaina combustible tipo C.N.A. con el tapón inferior.

Autores: Gustavo Sánchez y Fernando G. Basombrío.

Divulgación: Informe Interno N°2/76-C.C. Centro de Cómputos.C.A.B. (C.N.E.A.)

Informe Interno N°22-7/76-C.C.(C.A.B.).Dpto.de Combustibles Nucleares (C.N.E.A.)

Fecha: 19 de Mayo de 1976.

Contenido: Se realiza un cálculo bidimensional axisimétrico en el rango elástico y con la suposición de temperatura uniforme, de las tensiones y deformaciones locales en la unión de la vaina de elementos combustibles C.N.A. con su tapón inferior (figura 3). Se consideró la deformación elástica de dicho tapón, y a posteriori, se planteó la suposición de tapón indeformable (condición de contorno de empotramiento rígido para la vaina) a fin de comparar los resultados con soluciones analíticas ya conocidas basada en esta última hipótesis (ver figuras 4 y 5).

Código empleado: ELASTEF4 (ver Sección C.1.4.).

B.4.

Título: Cálculos termoelásticos en vainas para elementos combustibles tipo C.N.A. en la zona de los patines para diferentes espesores.

Autores: Fernando G. Basombrío y Gustavo Sánchez.

Colaboración computacional: Bibiana Cruz.

Divulgación: Informe Interno N°5/76-CC. Centro de Cómputos.C.A.B. (C.N.E.A.).

Informe Interno N°23-8/76-CC (C.A.B.). Dpto. de Combustibles Nucleares (C.N.E.A.).

Fecha: 21 de Junio de 1976.

Contenido: Para la misma situación considerada en B.2. (figura 2.), y para diversos niveles de potencia del reactor, se determina esta vez la distribución espacial de las tensiones termoelásticas provocadas sólo por los gradientes de temperatura dentro de la vaina, sin tener en cuenta las presiones a que está sometida.

Se resuelve primero a tal efecto la ecuación bidimensional de conducción del calor no lineal (con conductividad del material dependiente de la temperatura), y de la distribución espacial de la temperatura así obtenida, se determinan luego las tensiones y deformaciones termoelásticas.

Códigos empleados: NOLICUARM y ELASTE3 (ver secciones C.2.3. y C.1.3. respectivamente).

B.5.

Título: Análisis bidimensional de la distribución de la temperatura en una barra combustible C.N.A. en la zona de los patines.

Autores: Fernando G. Basombrío y Gustavo Sánchez.

Colaboración computacional: Bibiana Cruz.

Divulgación: CAB/1976/1.- Centro Atómico Bariloche (C.N.E.A.)

Fecha: Agosto de 1976.

Contenido: Se calcula aquí la distribución espacial de la temperatura y del flujo calórico (originado por el quemado del combustible nuclear a un dado nivel de potencia del reactor), en una sección

transversal de toda la barra combustible C.N.A. en la zona de los patines. Esto se realiza con el fin de determinar el efecto que sobre dicha distribución provoca la presencia de los mencionados patines. Se resuelve para ello la ecuación de conducción de calor bidimensional (simetría plana), estacionaria y no lineal en ese medio (ver figuras 6 y 7).

Se consideran para las pastillas del material combustible (UO_2) y para el material de la vaina (Zircaloy-4), conductividades dependientes de la temperatura, y la generación de calor se la supone proporcional al flujo neutrónico en cada punto.

Código usado: NOLICUARM (ver sección C.2.3.).

B.6.

Título: Análisis termoelástico de las vainas para elementos combustibles C.N.A. en la zona de los patines, en contacto con el separador.

Autores: Gustavo Sánchez y Fernando G. Basombrío.

Divulgación: CAB/1976/4. Centro Atómico Bariloche (C.N.E.A.). En impresión como publicación C.N.E.A.

Fecha: Noviembre de 1976.

Contenido: Este trabajo generaliza y completa a los indicados en B.2., B.4. y B.5. Se ha realizado un análisis termoelástico bidimensional de las vainas CNA en la zona de los patines, para la situación en que se anula el juego entre éstos y los apoyos del separador, ejerciendo dichos apoyos sobre los patines una reacción elástica opuesta a la dilatación de la vaina (ver figuras 2 y 8).

Se ha calculado, en función del juego inicial, la presión interior con la cual se llega al límite de fluencia del material para las dimensiones reales de la vaina y espesores reducidos de ésta, considerando una dada presión exterior y una distribución de la temperatura obtenida de manera análoga a la indicada en B.5. Se muestran los resultados principales en figuras 9 y 10.

Comparando los resultados obtenidos para cada una de las ubi-

caciones de las barras dentro del elemento combustible, con los que corresponden a un apoyo absolutamente rígido para los patines, se concluye que para los fines prácticos hubiese bastado esta última suposición, es decir, que no hubiese sido necesario considerar la deformación elástica del separador.

Las constantes térmicas y elásticas han sido consideradas dependientes de la temperatura.

Códigos empleados: ELASTE3 y NOLICUARM (ver secciones C.1.3. y C.2.3. respectivamente).

B.7.

Título: El método de elementos finitos aplicado a problemas de elasticidad plana. Estudio comparativo de distintos tipos de elementos. (Trabajo Especial de la licenciatura en física en el Instituto "Dr. José A. Balseiro"- CNEA).

Autor: Alberto Ernesto Castello

Trabajo dirigido por: Fernando G. Basombrío

Divulgación: Informe Interno.

Fecha: Diciembre de 1976.

Contenido: Descripción general sintética del método de "elementos finitos" y sus fundamentos, en su aplicación a problemas de elasticidad plana y descripción de una experiencia numérica básica destinada a comparar tipos de elementos más generales que los constituidos por triángulos simples con funciones aproximantes lineales (este tipo de elemento, que es el de aplicación más común, es el usado en los sistemas de programas ELASTE3, CUARM y CTR del Centro de Cómputos del CAB).

Los elementos en cuestión son de forma triangular y rectangular con funciones aproximantes de segundo grado.

El trabajo finaliza con un análisis comparativo de la eficiencia de los elementos que "compitieron" en la experiencia básica realizada y con las conclusiones que surgen de la misma.

B.8.

Título: Cálculos de los efectos térmicos locales que producen partículas de PuO_2 en barras combustibles tipo C.N.A.

Autor: Gustavo Sánchez y Fernando G. Basombrío.

Divulgación: CAB/1976/5.- Centro Atómico Bariloche (C.N.E.A.).

Fecha: Diciembre de 1976.

Contenido: Se ha realizado un estudio de las sobreelevaciones locales de temperatura que produce, dentro de una barra combustible tipo C.N.A., la presencia de pequeñas partículas (islas) de óxido de plutonio en el interior de las pastillas de óxido de uranio. Se resolvió al efecto la ecuación no lineal de conducción de calor (con conductividades dependientes de la temperatura), estacionaria y axisimétrica, para posiciones de la partícula dentro de la barra tales que se verificase dicho requerimiento de simetría: centrada en el eje de la barra, y adyacente o muy cerca de la superficie interior de la vaina. Se consideraron diversos tamaños de dichas partículas (ver figuras 11 a 14).

Código empleado: NOLICUARM (ver C.2.3.).

B.9.

Título: Modelo matemático estacionario para la refusión por arco bajo vacío. Su implementación por elementos finitos.

Autor: Gustavo Sánchez.

Divulgación: Informe Interno N°1/77-C.C. Centro de Cómputos.C.A.B. (C.N.E.A.).

Fecha: Enero de 1977.

Contenido: Se describe aquí un modelo matemático estacionario para el proceso de refusión de aleaciones por arco bajo vacío, su implementación por el método de elementos finitos, y su aplicación al procedimiento para la obtención de lingotes cilíndricos de Zircaloy-4 empleado en el Departamento de Materiales de la C.N.E.A. (figura 15). Se resolvió al efecto la ecuación de conducción de calor estacionaria, axisimétrica y no lineal, con conductividades

de los sólidos dependientes de la temperatura, conductividad del metal líquido variable, y teniendo en cuenta el calor de solidificación. En la figura 16 se muestra la red de elementos finitos.

Se obtuvieron las conformaciones de la interfase sólido-líquido del baño metálico para diversos valores de los parámetros más significativos, a fin de su posterior comparación con las determinadas experimentalmente, y el flujo de calor transversal en la lingotera en cada caso. En la figura 17 se muestran algunos de estos resultados.

Código empleado: NOLICUARM (ver C.2.3.), con modificaciones dadas por las características del modelo.

B.10.

Título: Aplicación del método de elementos finitos a la determinación de la distribución espacial de la temperatura en un dispositivo experimental.

Autores: G. Sánchez, F.G. Basombrío, B. Cruz y E. Mezzabolta.

Divulgación: CAB/1977/1. Centro Atómico Bariloche (C.N.E.A.).

Fecha: Febrero de 1977.

Contenido: En un dispositivo experimental para el estudio de efectos sobre distintos materiales producidos por radiación de neutrones, en función de la temperatura, (figura 18), por razones constructivas y de operación las termocuplas no están en contacto directo con las probetas bajo estudio. Por lo tanto, para la correcta interpretación de los resultados experimentales, es necesario conocer las relaciones entre los valores de la temperatura registrados con las termocuplas, y las que realmente tienen lugar en las probetas. El objeto de este trabajo es la determinación de dichas relaciones para diversos niveles de radiación, resolviendo la ecuación de conducción del calor (estacionaria y no lineal) en la totalidad de la zona de interés del dispositivo.

Aunque dicha zona no presenta una simetría como para ser representada exactamente en dos dimensiones, pudo simularse su geometría real mediante una adecuada combinación de aproximaciones

bidimensionales de simetría plana y axial separadamente (figuras 19 y 20 resp.).

Código empleado: NOLICUARM, en sus dos opciones para simetría plana y axial (ver C.2.3.).

C. PROGRAMAS DISPONIBLES

Se da a continuación un resumen de cada uno de los códigos de elementos finitos desarrollados e implementados en este Centro de Cómputos:

C.1. Sistema ELASTEF

Título: ELASTEF - Un sistema de códigos en FORTRAN IV para la resolución de problemas termoelásticos por el método de elementos finitos.

Autor: Gustavo Sánchez.

Estado: Programas terminados. Informe en preparación.

Generalidades:

El objetivo del sistema de códigos denominado ELASTEF es la resolución por el método de elementos finitos de problemas de elasticidad y termoelasticidad lineales en sistemas bidimensionales no homogéneos de simetría plana (tensiones o deformaciones planas) o axial, de sección arbitraria. Sobre la superficie exterior del sistema, puntos o porciones de ella pueden estar sujetos a condiciones de contorno de muy variada naturaleza:

- a) Fuerzas puntuales y/o cargas distribuidas.
- b) Desplazamientos nulos o de un determinado valor prefijado con respecto a cualquier dirección dada.
- c) Apoyos elásticos con coeficientes de rigidez dados según cualquier dirección prefijada.
- d) Combinaciones de a), b) ó c), para dos direcciones perpendiculares entre sí.

Con estas condiciones de contorno y una cierta distribución espacial de la temperatura (que previamente debe ser determinada), los programas calculan los desplazamientos del sistema respecto de ambas coordenadas.

A partir de estos, se obtienen las deformaciones y tensiones elásticas, y las tensiones equivalentes (de von Mises), en to

do el volumen del material.

El problema elástico o termoelástico original puede expresarse por un sistema elíptico de dos ecuaciones diferenciales de segundo orden (ecuaciones de Navier) que expresan las condiciones de equilibrio en términos de ambas componentes de los desplazamientos del sistema. Puede demostrarse a través del Teorema Fundamental del Cálculo Variacional, que las soluciones de dicho sistema hacen mínimo a un funcional asociado con ellas (que representa a la energía libre del sistema elástico). Determinando entonces este mínimo, pueden encontrarse las soluciones buscadas. Se emplea para ello un método de elementos finitos tipo nodal variacional (formulación de Ritz). Este consiste esencialmente en subdividir la estructura bajo estudio en un conjunto discreto de subdominios poligonales o "elementos finitos", cuyos vértices se denominan "puntos nodales", y hallar un mínimo aproximado del funcional dentro de un conjunto restringido de funciones (componentes de los desplazamientos), definidas en la estructura completa así subdividida. En cada elemento tales funciones estarán fijadas por sus valores en dichos puntos nodales. Este conjunto finito de parámetros es justamente respecto del cual se minimiza entonces el funcional, y ello conduce en definitiva a un sistema lineal de igual número de ecuaciones que de incógnitas:

$$K \cdot \underline{\delta} = \underline{F}_Q + \underline{F}_0$$

donde:

K es una matriz tipo banda simétrica y definida positiva (denominada matriz de rigidez total), cuyos elementos dependen de las coordenadas de todos los nodos, de la definición de los elementos, y de las constantes elásticas del material de cada elemento;

$\underline{\delta}$ es el vector incógnita, formado por ambas componentes de los desplazamientos de todos los nodos.

$\underline{F}_Q$ es un vector formado por ambas componentes de las cargas aplicadas en los nodos yacentes sobre la superficie externa; y

$\vec{F}_\theta$ es un vector análogo al anterior constituido por la fuerzas nodales equivalentes a las dilataciones térmicas del material.

El sistema de ecuaciones lineales se resuelve en cada programa del sistema ELASTE $\overline{F}$ mediante la factorización de Cholesky aplicado a matrices banda simétricas, calculando los productos internos de vectores mediante subrutinas que acumulan cada producto parcial en doble precisión, y devuelven el resultado final en precisión simple.

Estos programas emplean elementos finitos triangulares de espesor uniforme para sistemas de simetría plana, y elementos anulares de sección triangular para sistemas de simetría axial, donde la variación de los desplazamientos de los puntos interiores se aproxima por polinomios lineales. Cada uno de ellos está caracterizado por sendos valores constantes del módulo de Young, del factor de Poisson y de la temperatura.

Datos Fundamentales: Coordenadas de los nodos y definiciones de cada elemento en términos de la designación de los nodos que son sus vértices; Módulo de Young, Factor de Poisson y temperatura de cada elemento; descripción de las condiciones de contorno impuestas; cargas nodales.

Presentación de resultados: Opcionalmente se imprimen todos los datos; a continuación los desplazamientos de cada nodo y luego, para cada elemento, las tensiones según los ejes de coordenadas, las tensiones principales, la dirección de los ejes principales, y la tensión equivalente (de Von Mises). Finalmente, puede imprimirse si es solicitado, un gráfico del sistema considerado con curvas de nivel de alguna de las tensiones citadas.

Capacidad aproximada del código: Con una capacidad total de 110 Kb, con un semiancho de banda de la matriz K igual a 40, por ejemplo, pueden emplearse 230 nodos y 360 elementos.

Lenguaje: FORTRAN IV

Máquina para la que fue implementado: IBM 360/Mod. 44.

El sistema ELASTEF está integrado por los siguientes códigos, todos de simple precisión:

C.1.1. Código ELASTEF1.

Resuelve problemas de elasticidad en sistemas de simetría plana (tensiones o deformaciones planas), a temperatura uniforme.

C.1.2. Código ELASTEF2.

Análogo al ELASTEF1, calcula además para cada elemento la tensión equivalente según el criterio de fluencia de von Mises.

C.1.3. Código ELASTEF3.

Análogo al ELASTEF2, suma a los propósitos de éste el cálculo de las tensiones y deformaciones termoelásticas producidas por una dada distribución espacial de temperatura y permite además usar constantes elásticas dependientes de la temperatura. Esta debe conocerse de antemano, pudiéndosela determinar por ejemplo con el código CUARM (ver C.2.1.).

C.1.4. Código ELASTEF4.

Resuelve problemas de elasticidad en sistema de simetría axial, a temperatura uniforme, calculando además para cada elemento la tensión equivalente (de von Mises).

C.1.5. Código ELASTEF5.

Añade a los propósitos del ELASTEF4 los efectos térmicos, de manera similar al ELASTEF3. La distribución espacial de la temperatura puede calcularse previamente mediante el código AXICUARM (ver C.2.2.).

C.2. Sistema CUARM

Título: Resolución por elementos finitos de la ecuación cuasiarmónica bidimensional (Programas "CUARM", "AXICUARM", "NOLICUARM").

Autores: F.G. Basombrío, B. Cruz

Divulgación: Propuesto como "Publicación CNEA".

Fecha: Julio de 1976.

C.2.1. Código CUARM

Su objeto es obtener una solución numérica aproximada del siguiente problema (ecuación cuasiarmónica),

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(b \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(b \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = g(x, y)$$

donde la solución $\phi(x, y)$, buscada en una región Ω del plano, deberá tomar el valor prefijado de Dirichlet δ .

$$\phi|_{\Gamma^*} = \delta$$

en una parte Γ^* de la frontera Γ de Ω ; y en el resto Γ' de dicha frontera su derivada interior a Ω deberá cumplir la condición de Neumann

$$b \frac{\partial \phi}{\partial n} \Big|_{\Gamma'} = \gamma \quad n: \text{normal interior}$$

El coeficiente b puede ser función de " x " y de " y " debiendo estar sujeto en Ω a la condición

$$C \geq |b(x, y)| \geq c > 0$$

C, c : constantes

Es sabido que si en el conjunto de funciones definidas en Ω suficientemente regulares, que en Γ^* toman el valor de Dirichlet δ , existe una función ϕ que haga que el funcional (que en ciertos problemas físicos representa a la energía),

$$J(v) = \iint_{\Omega} \{b \left[\left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right] + 2gv\} dx dy + 2 \int_{\Gamma} \gamma v ds$$

ds: diferencial de arco sobre la frontera Γ

alcance un valor mínimo, entonces ϕ debe ser solución del problema previamente descrito.

El método de aproximación de elementos finitos consiste en este caso en hallar un mínimo aproximado en un conjunto restringido de funciones definidas en Ω por un número finito de parámetros.

Para ello se triangulariza el dominio original Ω ; las funciones antedichas son simplemente aquellas que en los nodos de la triangularización toman valores a determinar por la condición de mínimo, y dentro de cada triángulo (o elemento) varían linealmente (triángulos de Courant y polinomios de primer grado).

En definitiva el planteo del problema aproximado conduce a la resolución de un sistema lineal de ecuaciones algebraicas (condición de mínimo) de matriz simétrica y del tipo "banda" cuyas incógnitas son justamente los "valores nodales" que definen al mínimo así buscado.

Este no es ni más ni menos que el método de Ritz particularizado para las funciones antes citadas.

Los valores de "b" y de "g" pueden ser considerados dentro de cada triángulo, o bien con variación lineal y definidos por sus valores en los nodos, o bien simplemente constantes. Otro tanto puede decirse para el dato γ , dentro de cada lado de triángulo que constituya la frontera Γ' . En cambio el dato de Dirichlet siempre será dado por sus valores en los nodos que pertenecen a Γ^* , e interpolado linealmente entre estos.

El sistema de ecuaciones es resuelto por el algoritmo de Gauss.

Datos fundamentales: Coordenadas de los nodos de la red. Descripción de la red, dada por los nodos que corresponden a cada elemento. Valores de "b" y de "g" dados por nodo o bien por elemento. Valores de g dados por nodo. Valores de γ dados por nodo o bien por elemento.

Presentación de resultados: Para cada nodo se tabulan sus coordenadas y el valor de la incógnita ϕ . Para cada triángulo se tabulan las coordenadas de su centro de gravedad, y las componentes según x e y del campo $\vec{b} \text{ grad } \phi$. De ser requerido, se realiza con la impresora un mapa de líneas de nivel de la solución ϕ .

Capacidad aproximada del código: Para una ocupación total de memoria de casi 110 Kb, unos 1100 triángulos y 800 nodos. No requiere archivos adicionales.

Lenguaje del programa: FORTRAN IV

Máquina para la que fue implementado: IBM 360/ Mod. 44.

C.2.2. Código AXICUARM

Su objetivo es resolver la ecuación cuasiarmónica para el caso de simetría de revolución. Es totalmente similar al Código antes descrito y por lo tanto consignamos sólo sus diferencias fundamentales.

Problema a resolver:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(b \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(b \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + \frac{b}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} = g(r, z)$$

$$\phi \Big|_{\Gamma^*} = \delta \quad ; \quad b \frac{\partial \phi}{\partial n} \Big|_{\Gamma'} = \gamma$$

Funcional

$$J(v) = \iint_{\Omega} \left\{ b \left[\left(\frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] + 2gv \right\} r dr dz + 2 \int_{\Gamma} \gamma v r ds$$

C.2.3. Código NOLICUARM

Es una generalización simultánea de los dos códigos previos para abarcar además problemas no lineales, es decir, aquellos en que por lo pronto b pueda también depender de la solución ϕ .

El método iterativo empleado es el de más simple concepción. Se resuelve primero un problema con un valor de " b " adecuado en algún sentido. Obtenida entonces la solución " ϕ ", se recalcula " b " y se reinicia el proceso; y así sucesivamente. Las iteraciones concluyen cuando el reajuste porcentual de " b " (en valor absoluto) no excede en ningún punto nodal un valor " ϵ " máximo prefijado.

Se adoptó tal criterio con base física. El coeficiente " b " es un dato que suele obtenerse empíricamente o sea con un cierto margen de error. Se admite que el problema es estable, en el sentido de que pequeñas perturbaciones en " b " originarán pequeñas perturbaciones en " ϕ ". Consecuentemente se entiende que no merece la pena continuar el proceso iterativo cuando los ajustes porcentuales en " b " sean menores que una cierta cota máxima, relacionada con el error propio de " b ".

En problemas usuales se requieren pocas iteraciones (5 á 7) para reajustes menores del 1% en " b ".

El resto de las especificaciones son sin más las del código CUARM, sólo que en este caso se hace necesario proveer una subrutina adicional que suministre los valores de " b " para cada triángulo en función de " ϕ ".

C.3. Sistema CTR

Título: Ecuación cuasiarmónica con derivada temporal. Su resolución por el método de Faedo-Galerkin con elementos finitos. (Programas CTR y CTR 1).

Autores: F.G. Basombrío y B. Cruz

Divulgación: Propuesto como "Publicación externa"

Fecha: Marzo de 1977.

C.3.1. Código CTR:

Su objetivo es obtener una solución numérica aproximada del siguiente problema de evolución,

$$v \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(b \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(b \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = g(x, y, t)$$

donde la solución $\phi(x, y, t)$ buscada en una región Ω del plano y para $0 \leq t \leq T$ deberá satisfacer la condición inicial,

$$\phi(x, y, 0) = \psi(x, y)$$

la condición de contorno tipo Dirichlet

$$\phi \Big|_{\Gamma^*} = \delta$$

en una parte Γ^* de Γ ; y en el resto Γ' de dicha frontera su derivada interior a Ω verificará la condición de contorno tipo Neumann

$$b \frac{\partial \phi}{\partial n} \Big|_{\Gamma'} = \gamma$$

n : normal interior

A la par que g , tanto v como b , δ y γ pueden ser funciones del punto y del tiempo t . Además b en Ω ha de estar sujeto al requisito

$$C \geq |b(x, y, t)| \geq c > 0$$

C, c : constantes

Para el caso axisimétrico el problema es

$$v \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(b \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(b \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \frac{b}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} = g(r, z, t)$$

con similares condiciones, inicial, de Dirichlet y de Neumann.

Para este problema no existe un funcional natural cuyo mínimo corresponda a la solución como ocurre en el caso estacionario, ecuación cuasiarmónica común. El procedimiento general se encuadra matemáticamente en el método de Galerkin con la adaptación de Faedo.

Como es usual en problemas de evolución, la solución aproximada no es calculada globalmente en toda la región espacio-temporal de base Ω y altura T sino por pasos en el tiempo: se discretiza la variable t en intervalos Δt , y partiendo del dato inicial

y de las condiciones de contorno se calcula una aproximación de la solución para el instante $t + \Delta t$. Con esta y con las condiciones de contorno se construye a su vez una aproximación para $t + 2\Delta t$, y así sucesivamente hasta llegar al valor máximo $t = T$.

El espacio, parametrizado por las variables x, y (ó r, z), es discretizado por elementos finitos triangulares como se hiciera para los códigos CUARM. También aquí se usan polinomios de primer grado. De acuerdo a lo previamente dicho, la variable temporal t es discretizada por diferencias finitas.

Las ecuaciones de aproximación se discretizan en el tiempo con el esquema de Crank-Nicolson, que para evaluar la solución en el nivel n ($t = n\Delta t$) toma promedios entre los niveles $n-1$ y n . En cada paso se resuelve por el algoritmo de Gauss, un sistema lineal de ecuaciones algebraicas de matriz banda simétrica, que permite determinar los valores nodales del siguiente nivel. El método, implícito, es entonces incondicionalmente estable y si el problema original está bien planteado en el sentido de la teoría de ecuaciones en derivadas parciales, es también convergente.

Experimentos numéricos realizados con soluciones exactas generales y llevados hasta 110 ciclos en el tiempo para una red de 287 nodos y 512 elementos, han mostrado que el error de redondeo (con precisión simple) llega solamente a afectar la cuarta o quinta cifra de los resultados, mientras que los de discretización se acumulan alcanzando una magnitud del orden del 1%.

Por simplicidad los valores de v, b y g se toman constantes en cada triángulo para t fijo; los de γ , constantes en cada lado del triángulo que constituya la frontera Γ^* y g se da para cada nodo de Γ' interpolándose linealmente entre estos. También estos últimos pueden variar con t .

Datos fundamentales: Similares a los del sistema CUARM. La variante fundamental es la condición inicial ϕ , y el suministro de subrutinas que para cada nivel de tiempo dan los valores adecuados de v, b, g, δ, γ .

Presentación de resultados: Similar a la del sistema CUARM, pudiéndose obtener también resultados correspondientes a niveles intermedios de tiempo.

Capacidad aproximada del código: Similar a la del sistema CUARM.

Lenguaje del programa: FORTRAN IV

Máquina para la que fue implementado: IBM 360/Mod.44

C.3.2. Código CTR1

Es una adaptación del antes descrito para abarcar problemas no lineales, es decir aquellos para los que al menos v, b y g pueden también depender de la solución ϕ .

La modificación del programa se basa fundamentalmente en los lineamientos del código NOLICUARM: para cada paso de tiempo se calcula la solución ϕ^{n+1} del nivel siguiente usando los valores ten-

tativos de v , b y g evaluados para la solución ϕ^n del nivel previo conocido. Obtenido ese primer valor provisorio de ϕ^{n+1} se calculan para el mismo v, b y g . Se cotejan con los obtenidos antes, y si en ningún punto de la red la diferencia supera un máximo prefijado se interrumpe el proceso. Si esto no es el caso, con tales valores de v, b y g se recalcula ϕ^{n+1} y luego los nuevos v , b y g que se cotejan con los previos; y así sucesivamente hasta lograr la convergencia esperada.

Este procedimiento es rápidamente convergente en casos usuales. Para diferencias máximas del 1% o menos, pueden llegar a ser necesarias sólo dos o tres iteraciones. Pero esto es gravoso ya que el tiempo total de máquina ha de multiplicarse por un factor dos o tres.

El resto de las especificaciones es sin más el del código CTR, sólo que en este caso se hace necesario proveer una subrutina adicional que suministre los valores de v, b y g para cada triángulo en función del tiempo y de ϕ .

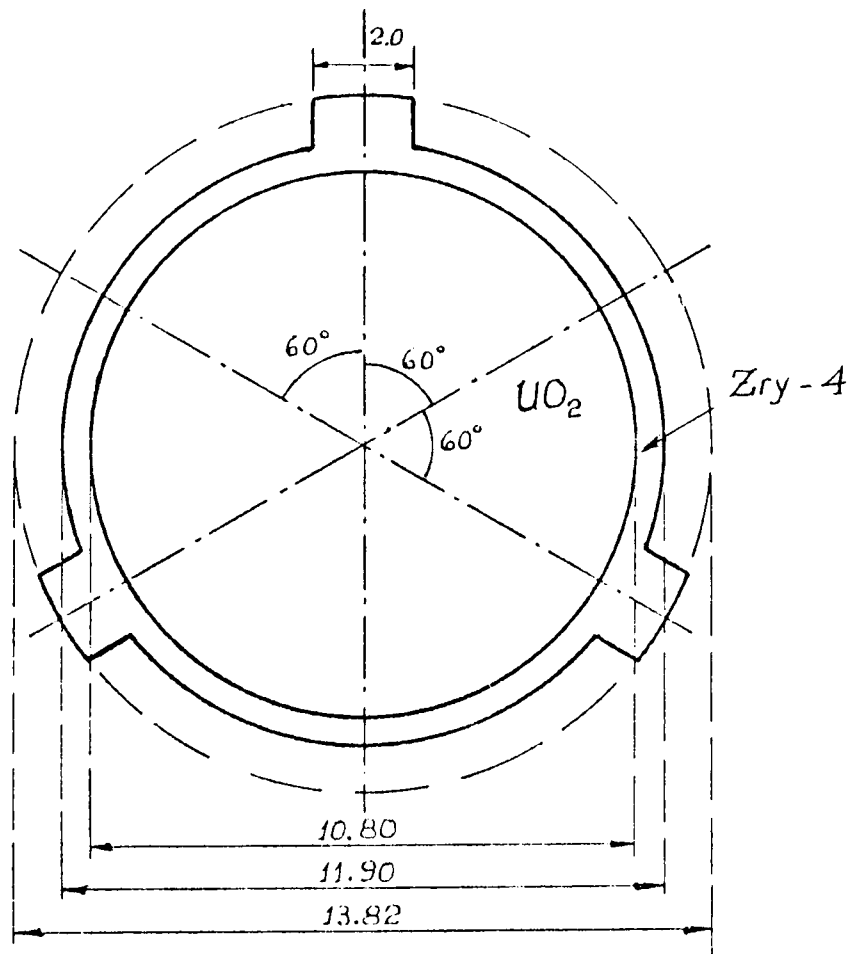


Figura 1.- Sección de una barra combustible de la C.N.A. en la zona de los patines (dimensiones en mm).

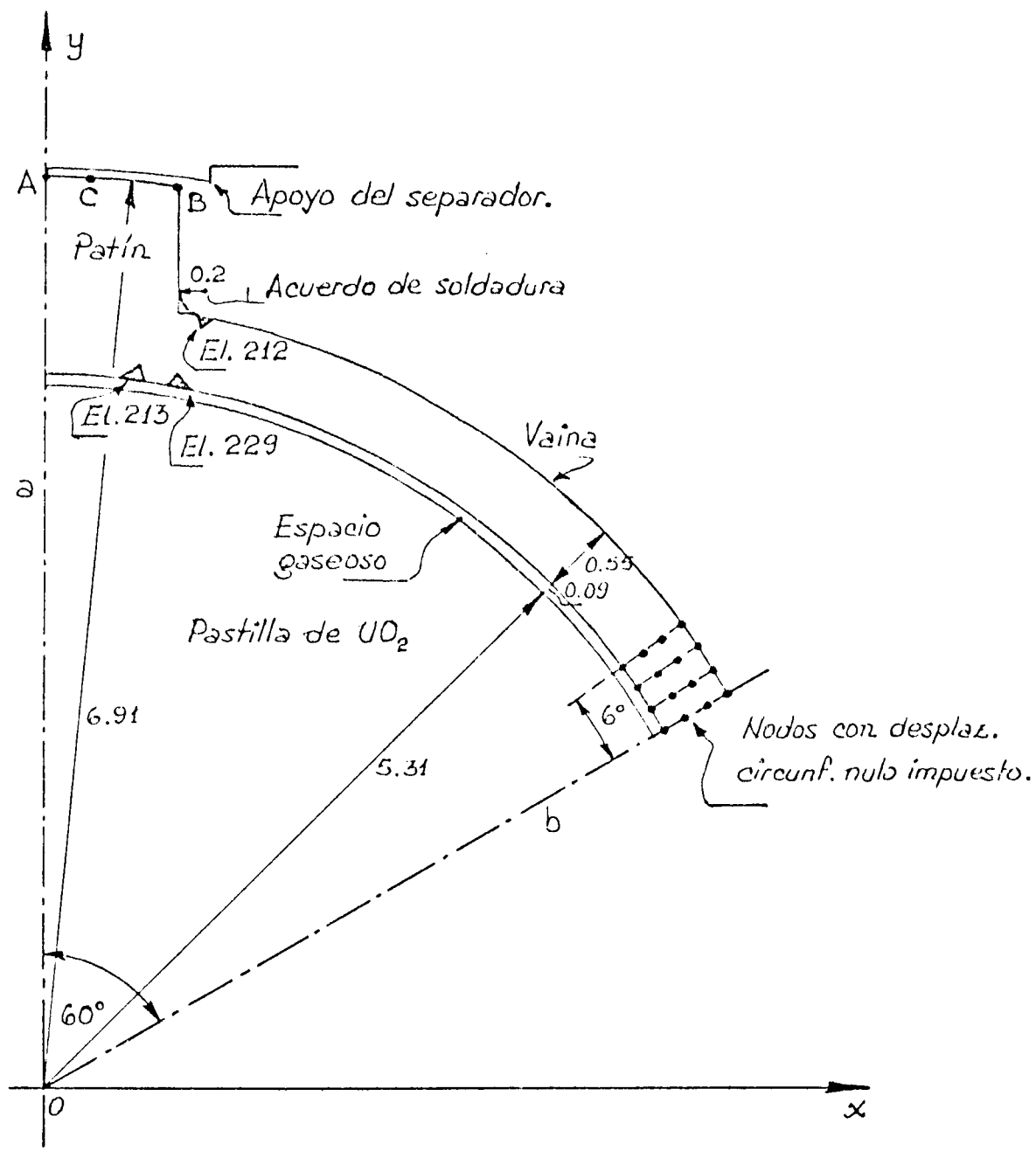


Figura 2.- Porción de la sección de la barra combustible mostrada en la figura 1, recinto de cálculo de los trabajos B.1, B.2, B.4, B.5 y B.6.

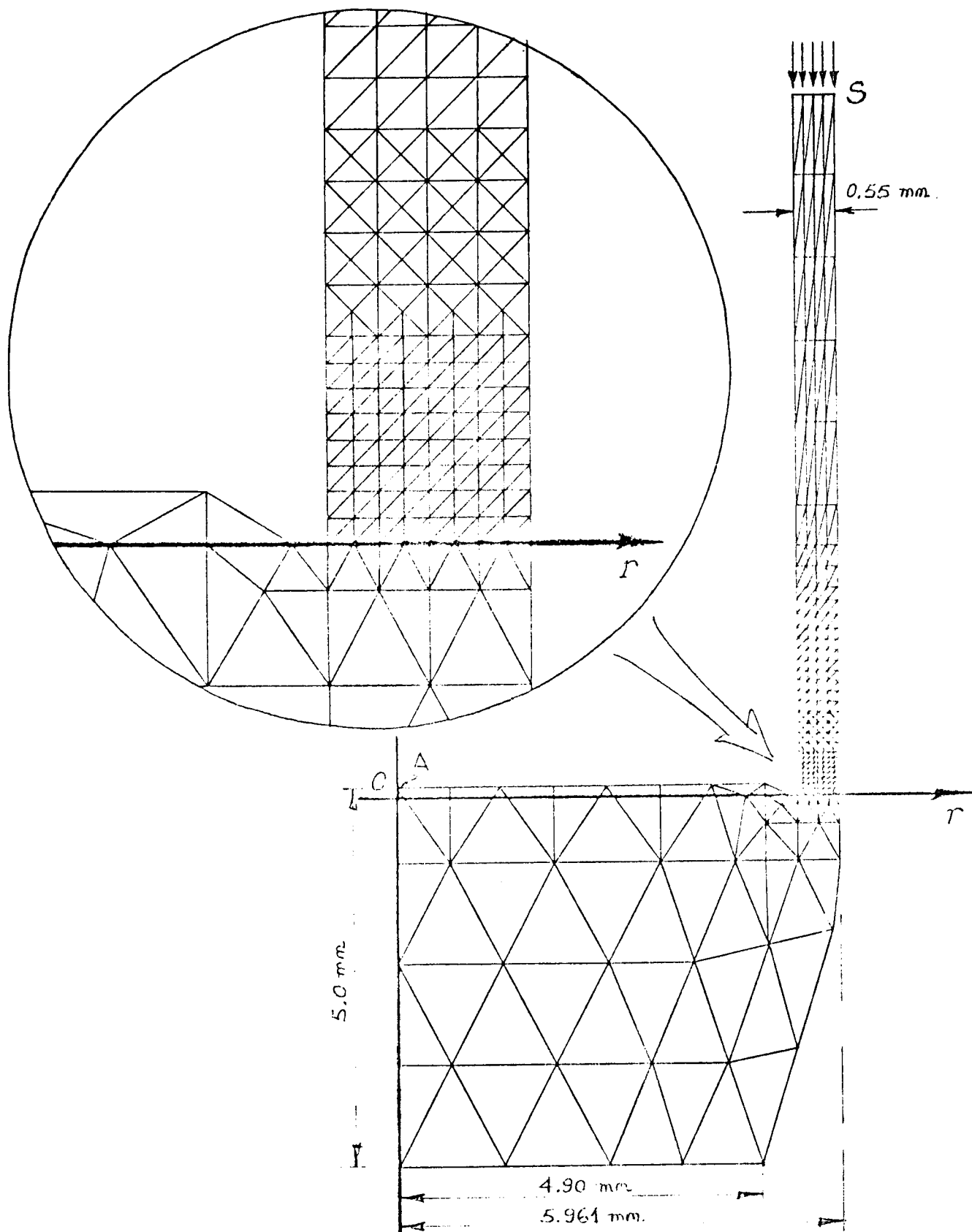


Figura 3.- Red de elementos finitos anulares para la barra combustible C.N.A. en la zona de su soldadura con el tapón inferior.

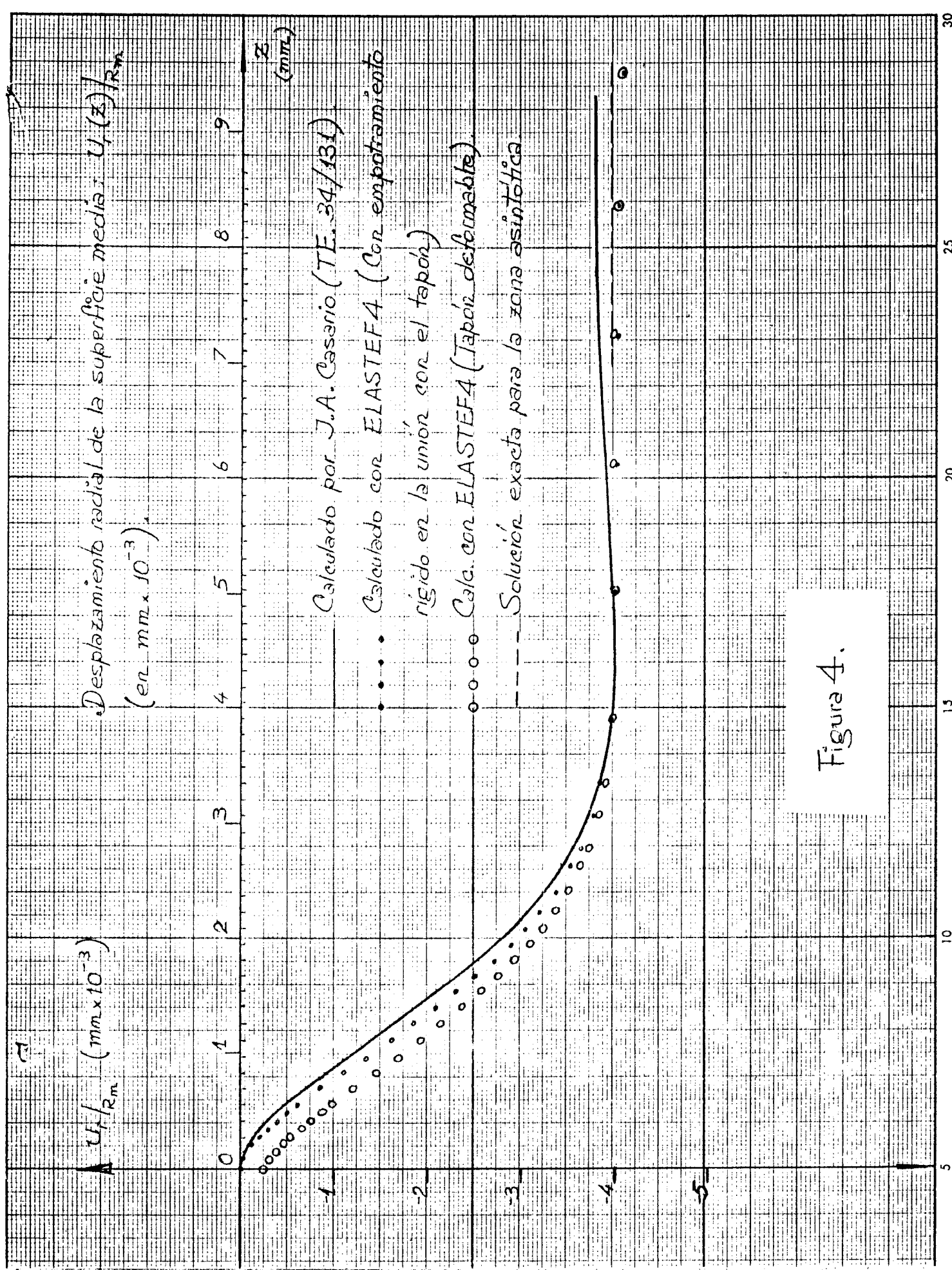


Figura 4.

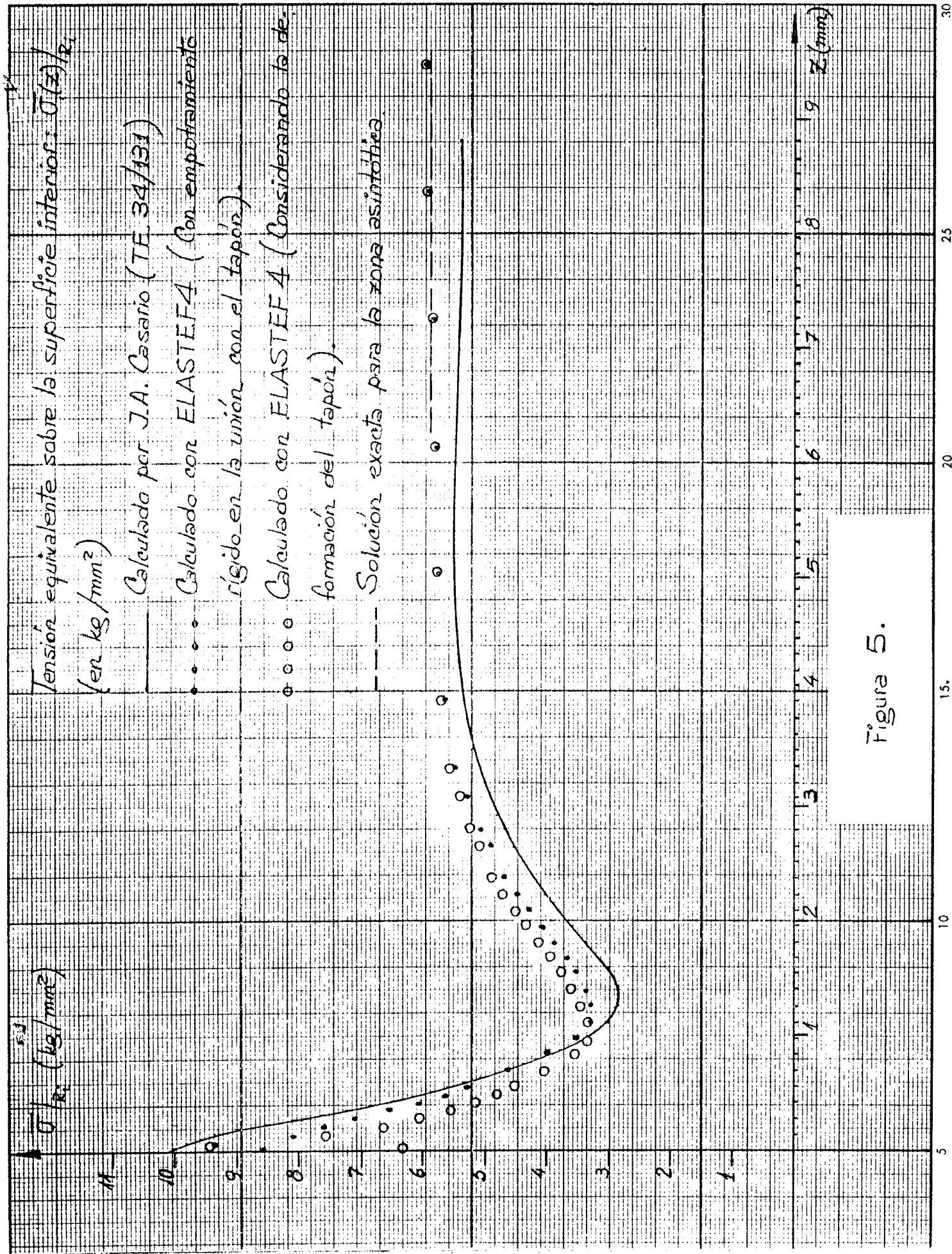


Figure 5.

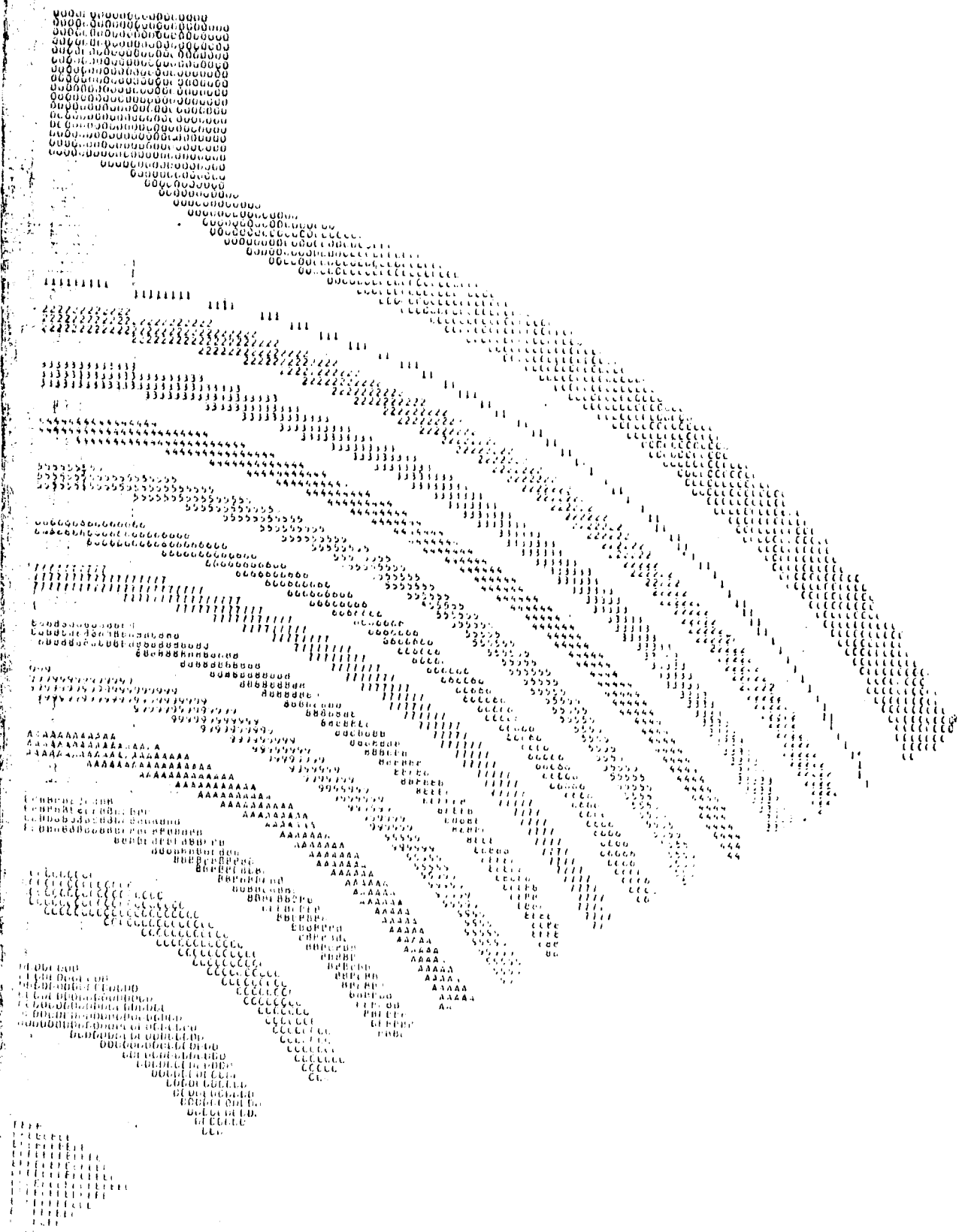


Figura 6.- Distribución espacial de la temperatura calculada en el recinto de la figura 2. Los bordes de cada franja son isotermas igualmente espaciadas.

//..

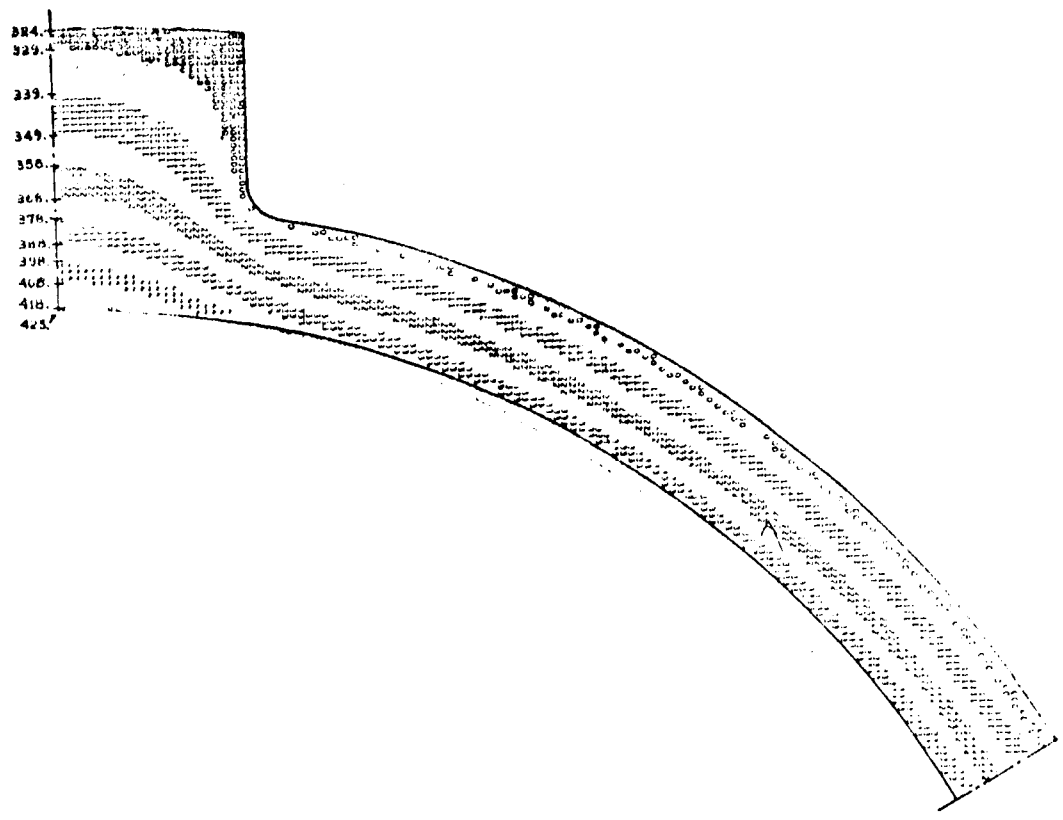


Figura 7.- Detalle de la distribución espacial de la temperatura de la figura 6 sólo en la vaina. Las cotas de las isotermas se dan en °C.

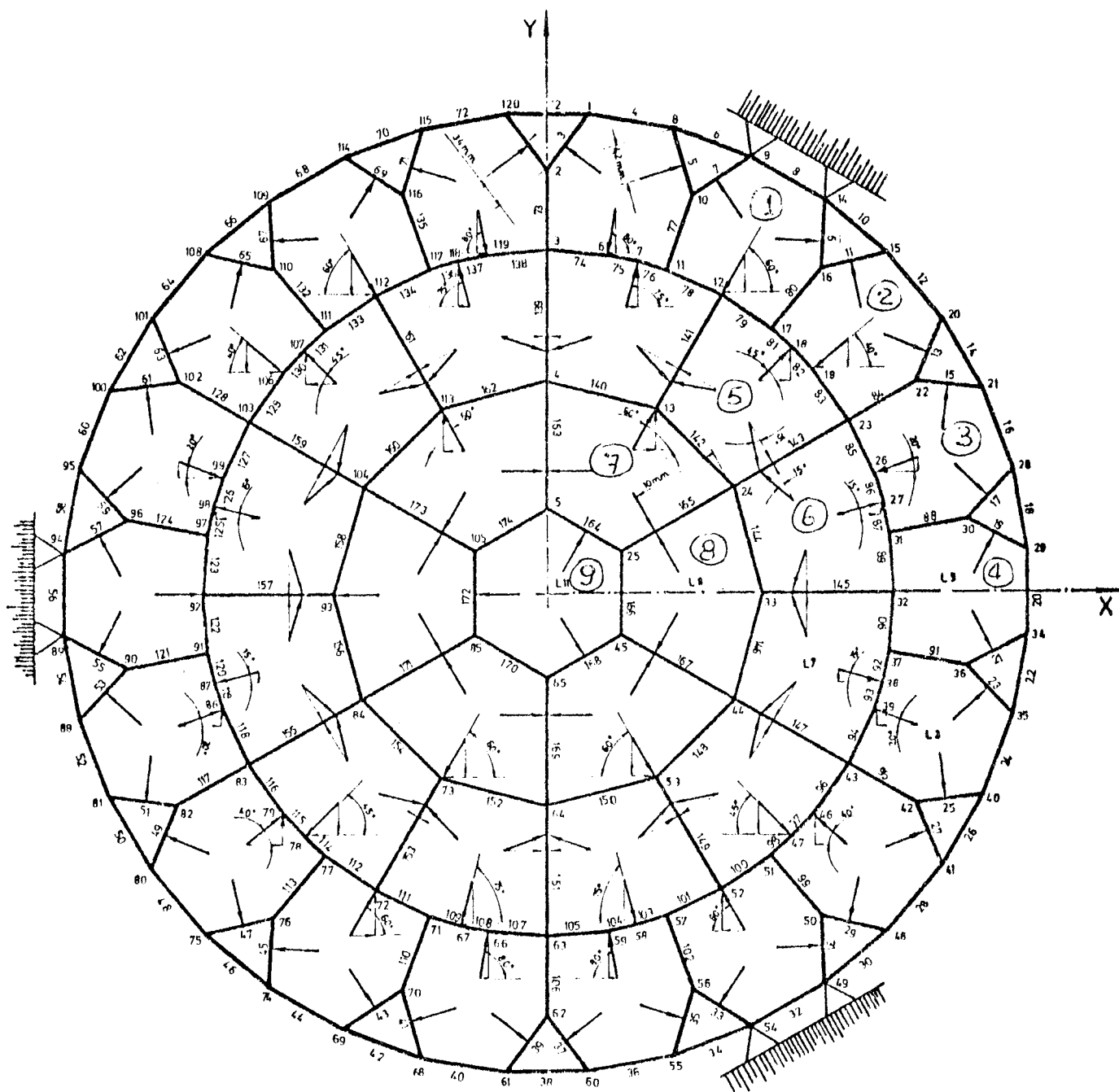


Figura 8.- Sección de un separador de un elemento combustible C.N.A.

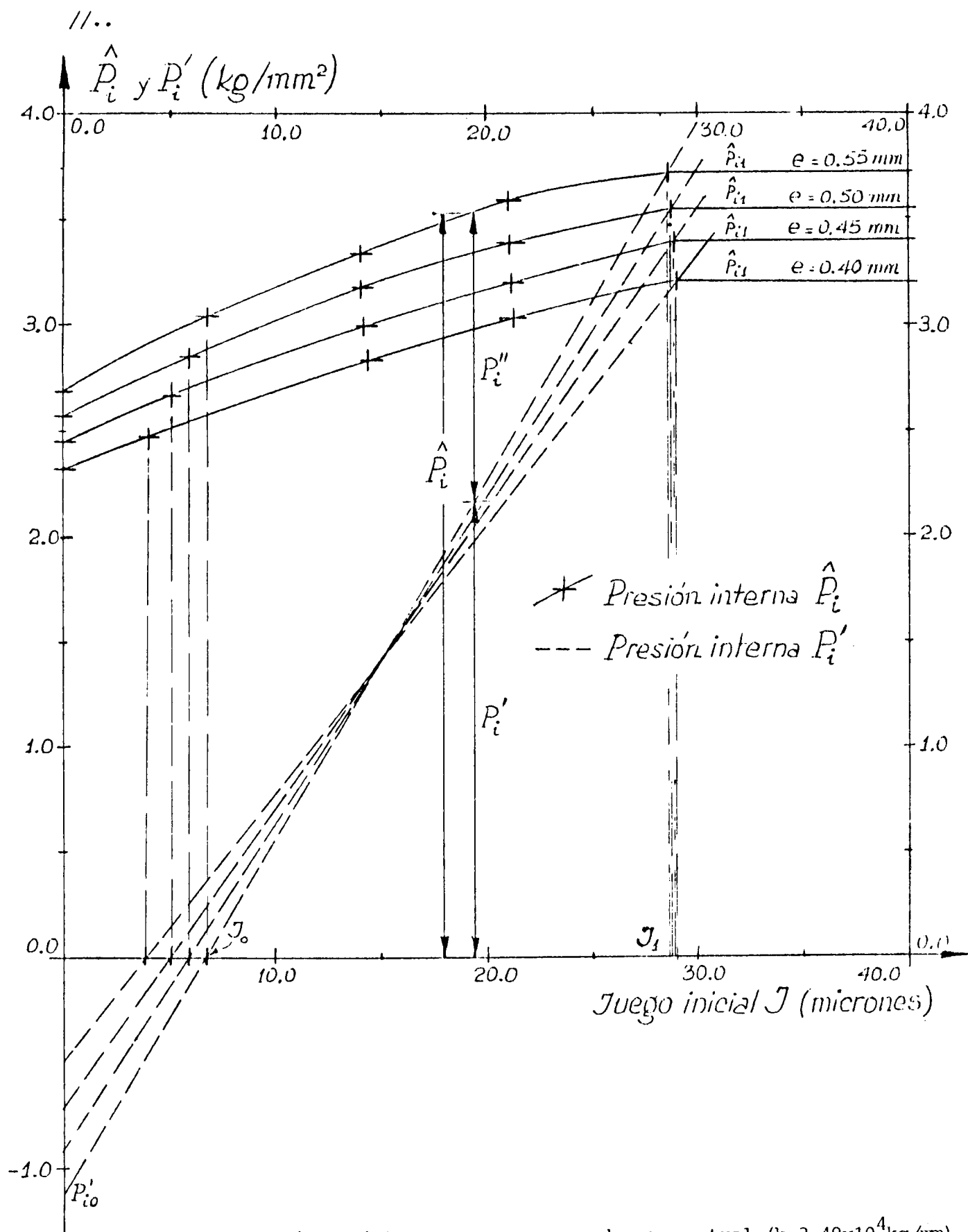


Figura 9.- Presiones internas que para una barra central ($k=3.49 \times 10^4 \text{ kg/mm}$) con un nivel de potencia de 687 w/cm , temperatura exterior de 324°C y presión externa de $1,2 \text{ kg/mm}^2$, hacen llegar al Zry-4 al límite de fluencia.

//..

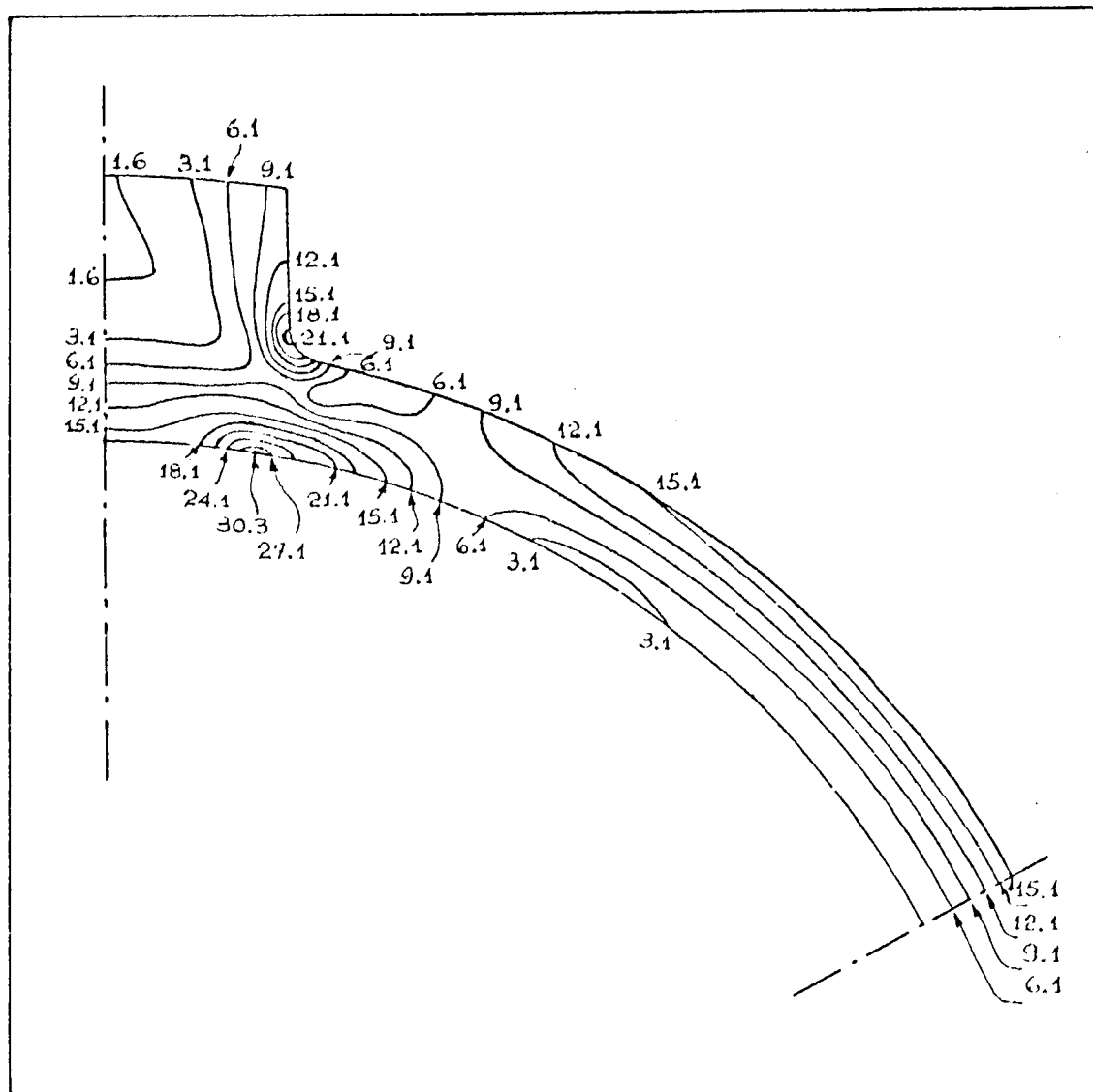


Figura 10.- Curvas de nivel de la tensión equivalente en un sector de la vaina central para el caso $J=0$ y $\underline{es}$ $\text{pesor} = 0.55$, consignado en el CUADRO III, cuando actúa una presión interna $\hat{p}_i$.

Eje de simetría de la zona A

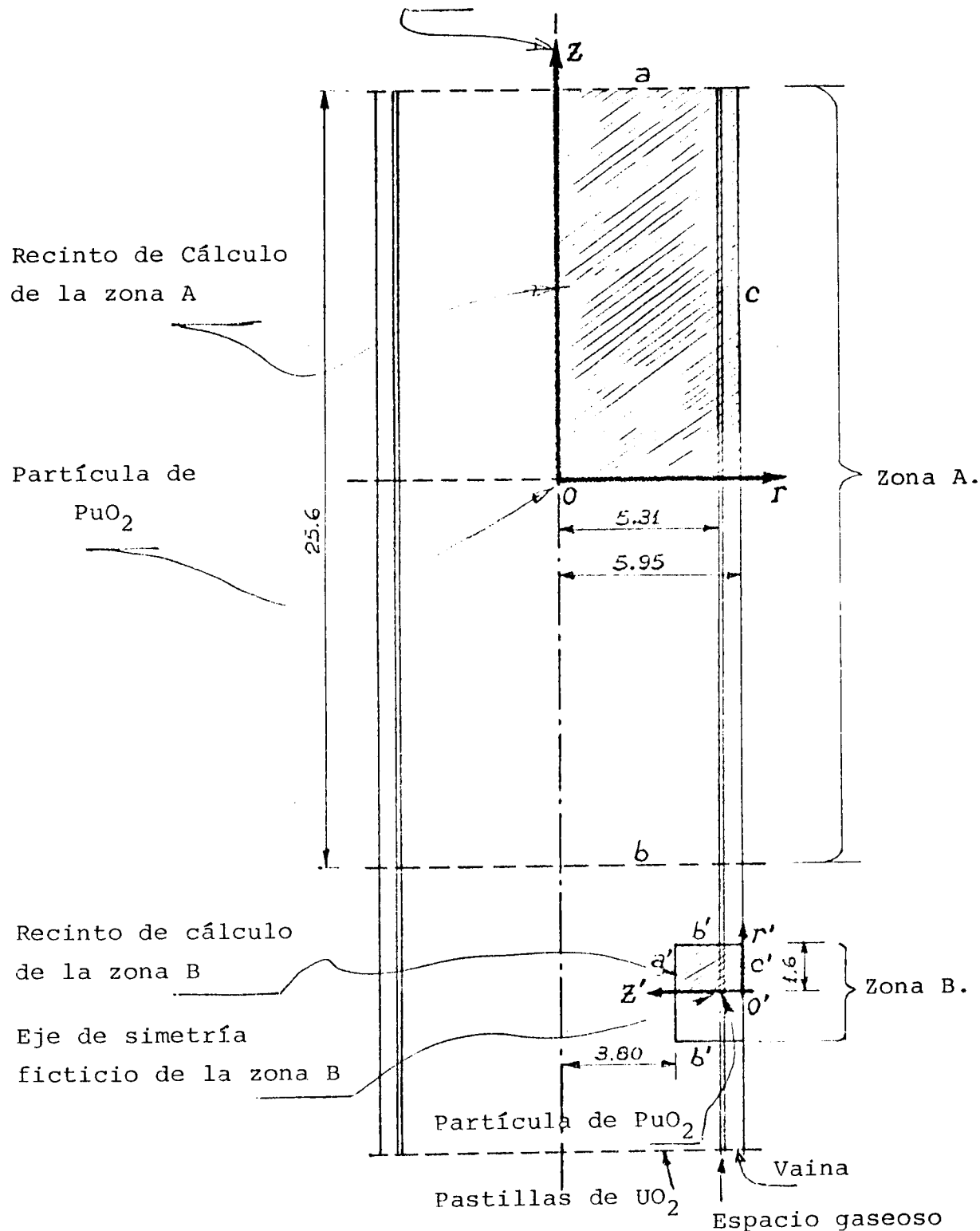


Figura 11.- Zonas A y B de la barra combustible C.N.A. con partículas de PuO_2 y ubicación de sus respectivos recintos de cálculo (cotas en mm).

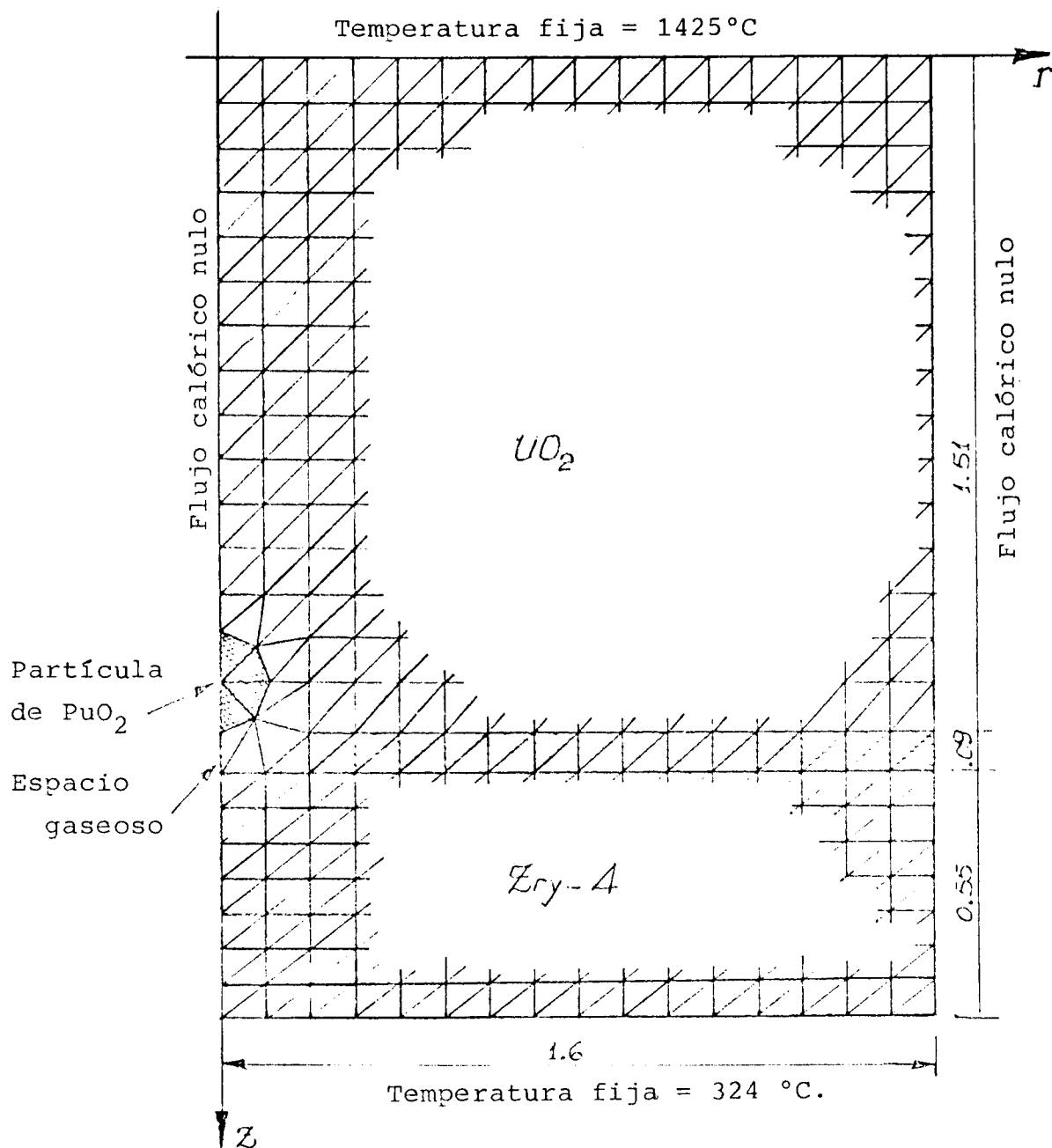


Figura 12.- Red de elementos finitos para la zona B (situación b; $\varnothing = 200 \mu$), del trabajo B.8. Sus cotas están en mm.

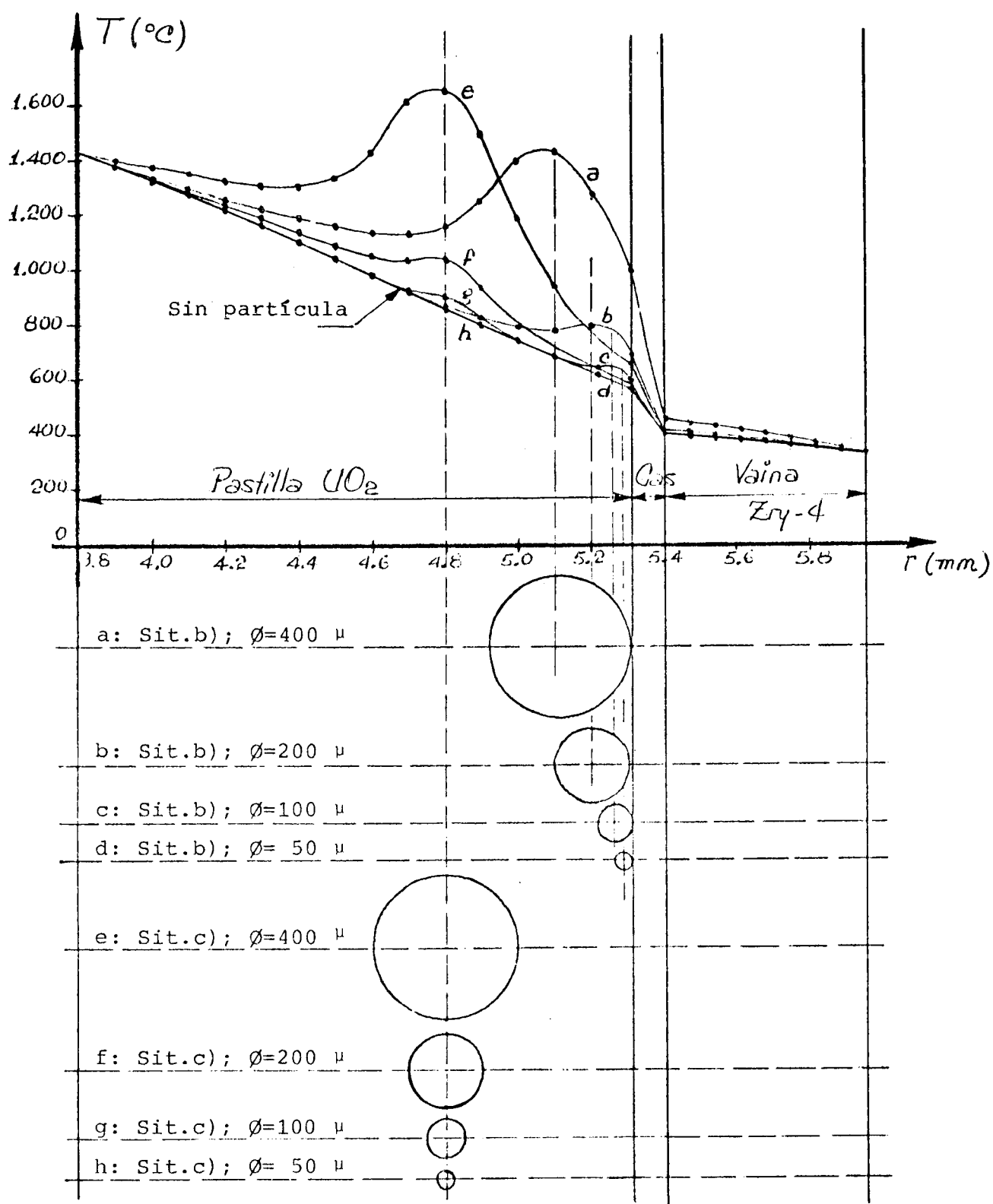


Figura 13.- Distribución radial de la temperatura para las situaciones b) y c) del trabajo B.8., sobre una recta perpendicular a la vaina que pasa por el centro de las partículas. Se indican las posiciones de ésta para cada caso.

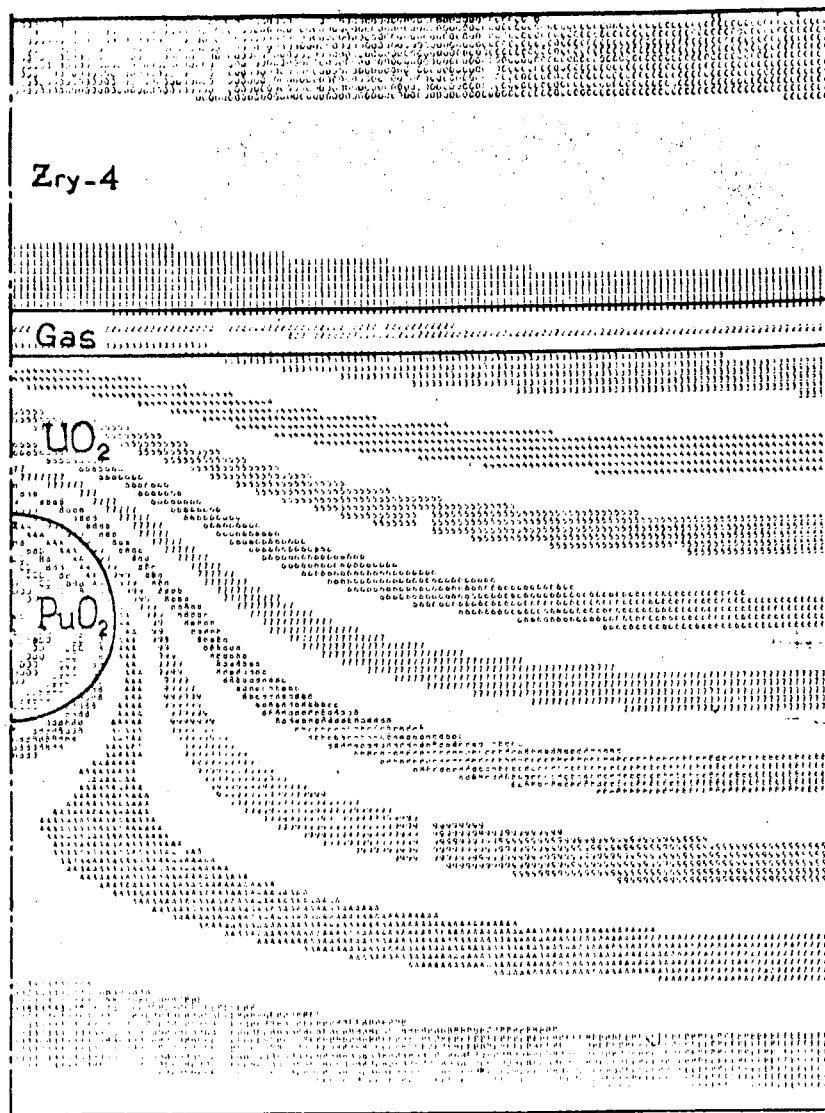


Figura 14.- Distribución espacial de la temperatura para la situación c) y $\varnothing=400\mu$, del trabajo B.8. Los límites de cada franja son isotermas equiespaciadas.

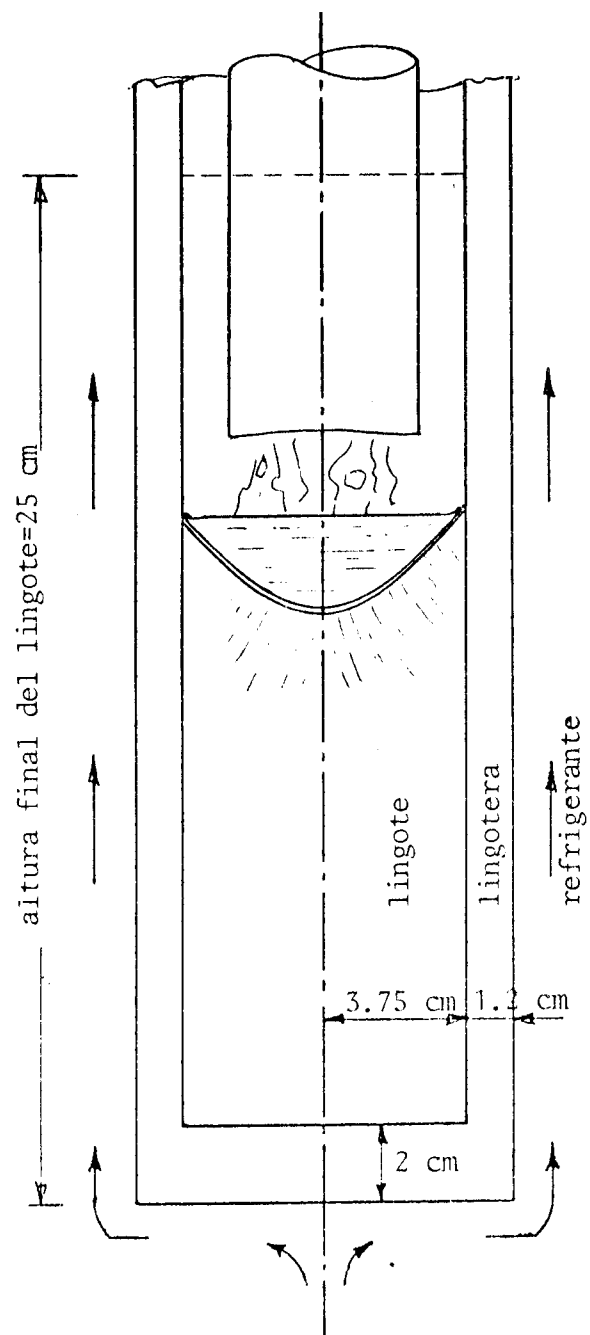


Figura 15.- Esquema del dispositivo de refusión por arco bajo vacío (trabajo B.9.).

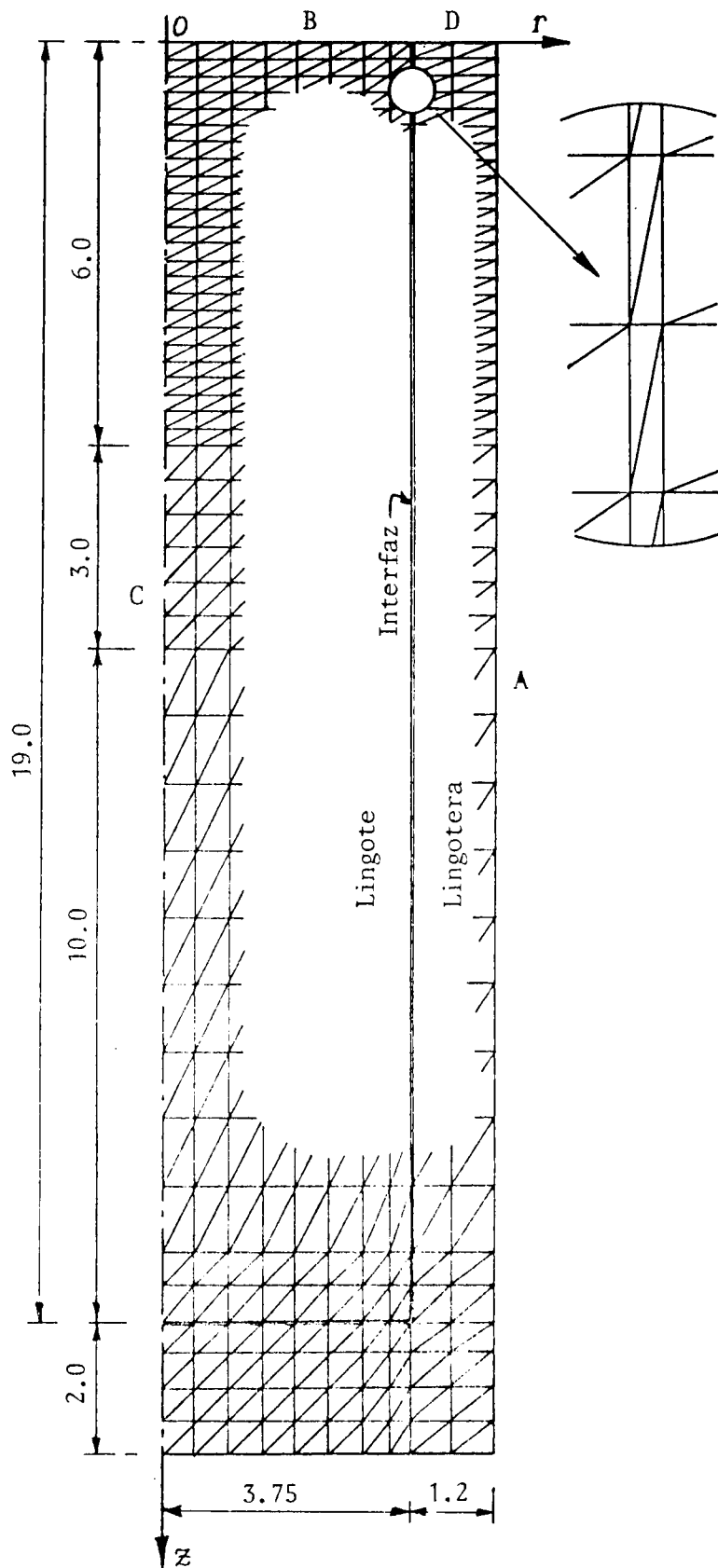


Figura 16.- Corte meridional de la red de elementos finitos anulares para el dispositivo de la figura 15.

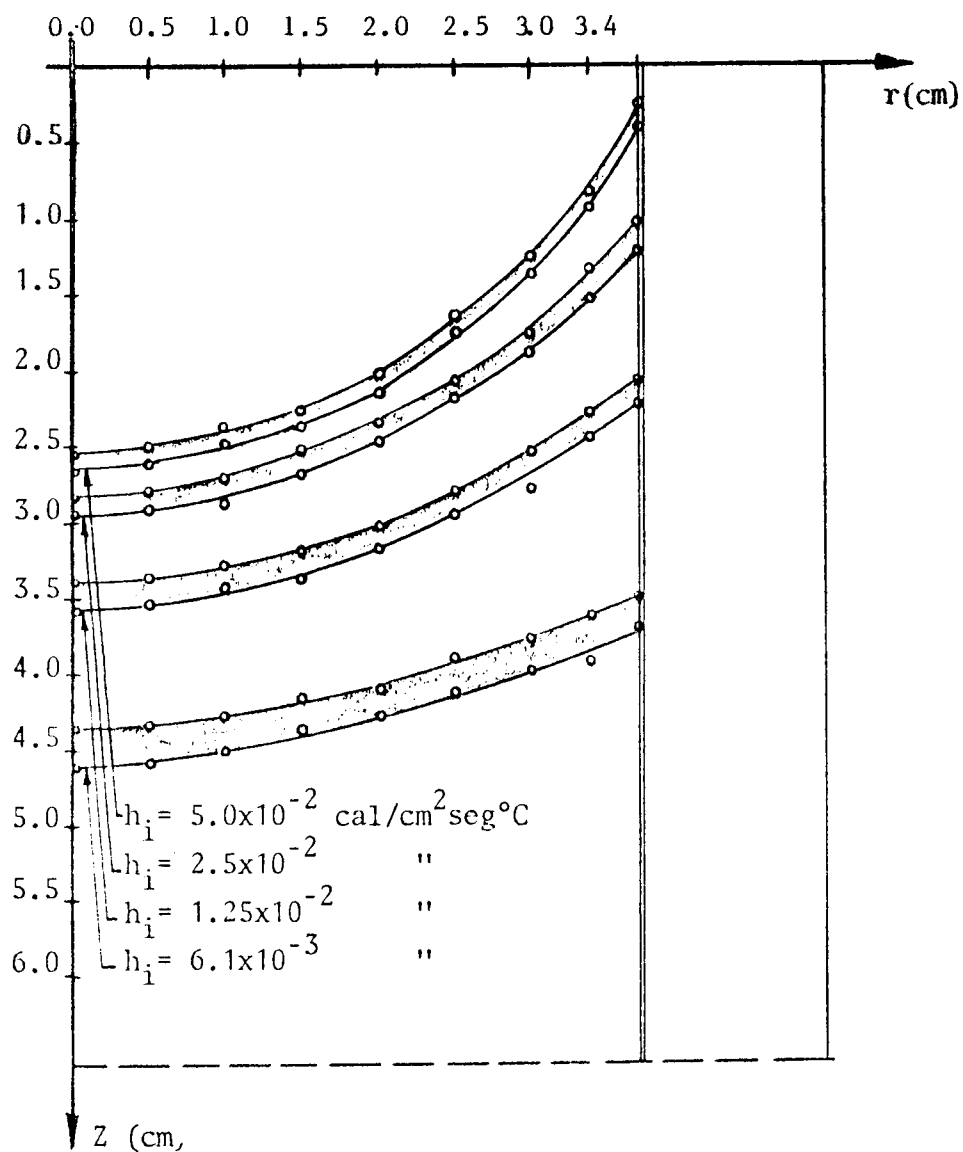


Figura 17.— Corte meridional de las superficies isotérmicas T_s y T_L para distintos valores de la resistencia metal-mol de (trabajo B.9.).

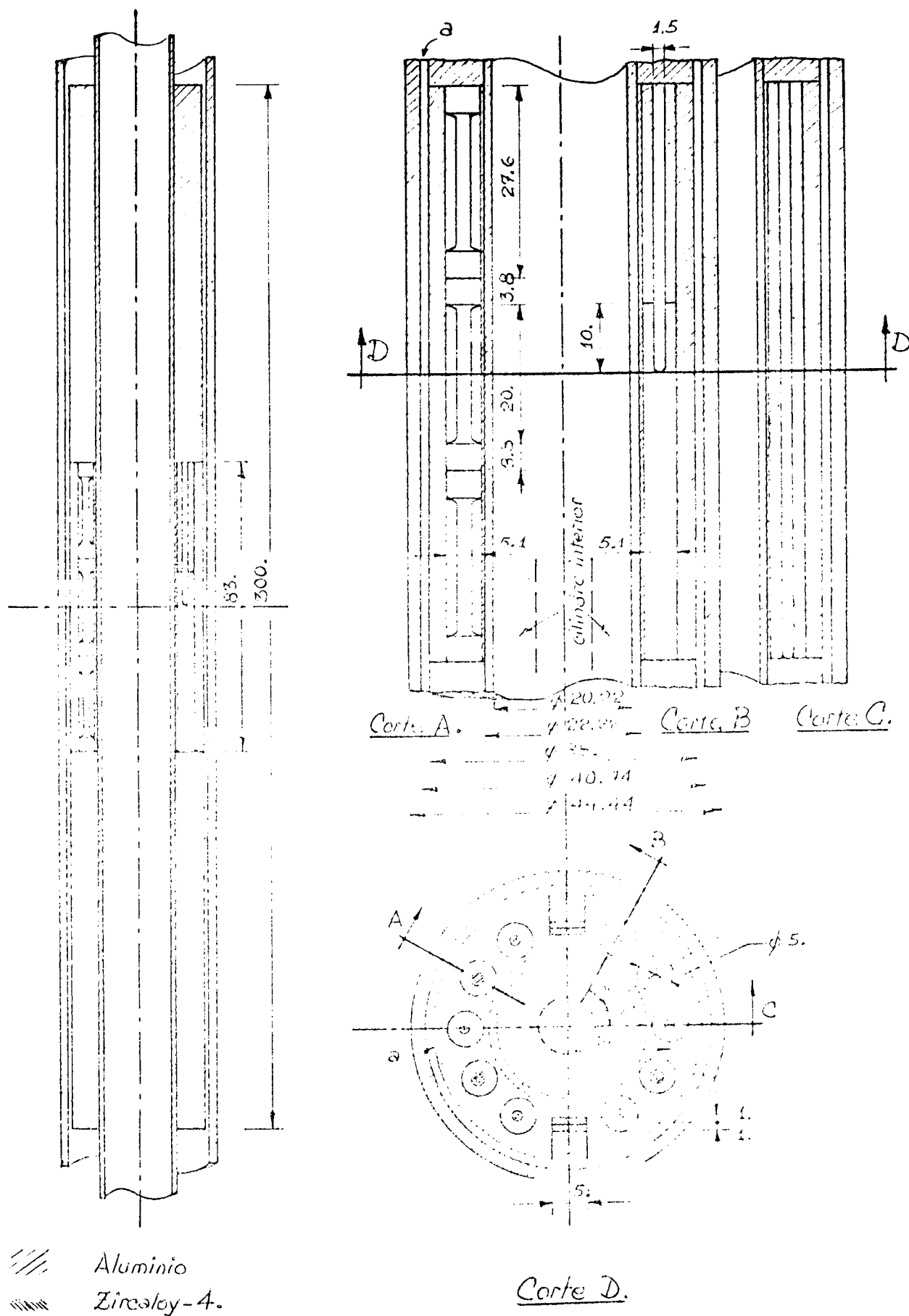


Figura 18.- Dispositivo experimental para el estudio de daños por irradiación de neutrones en metales (Trabajo B.10).

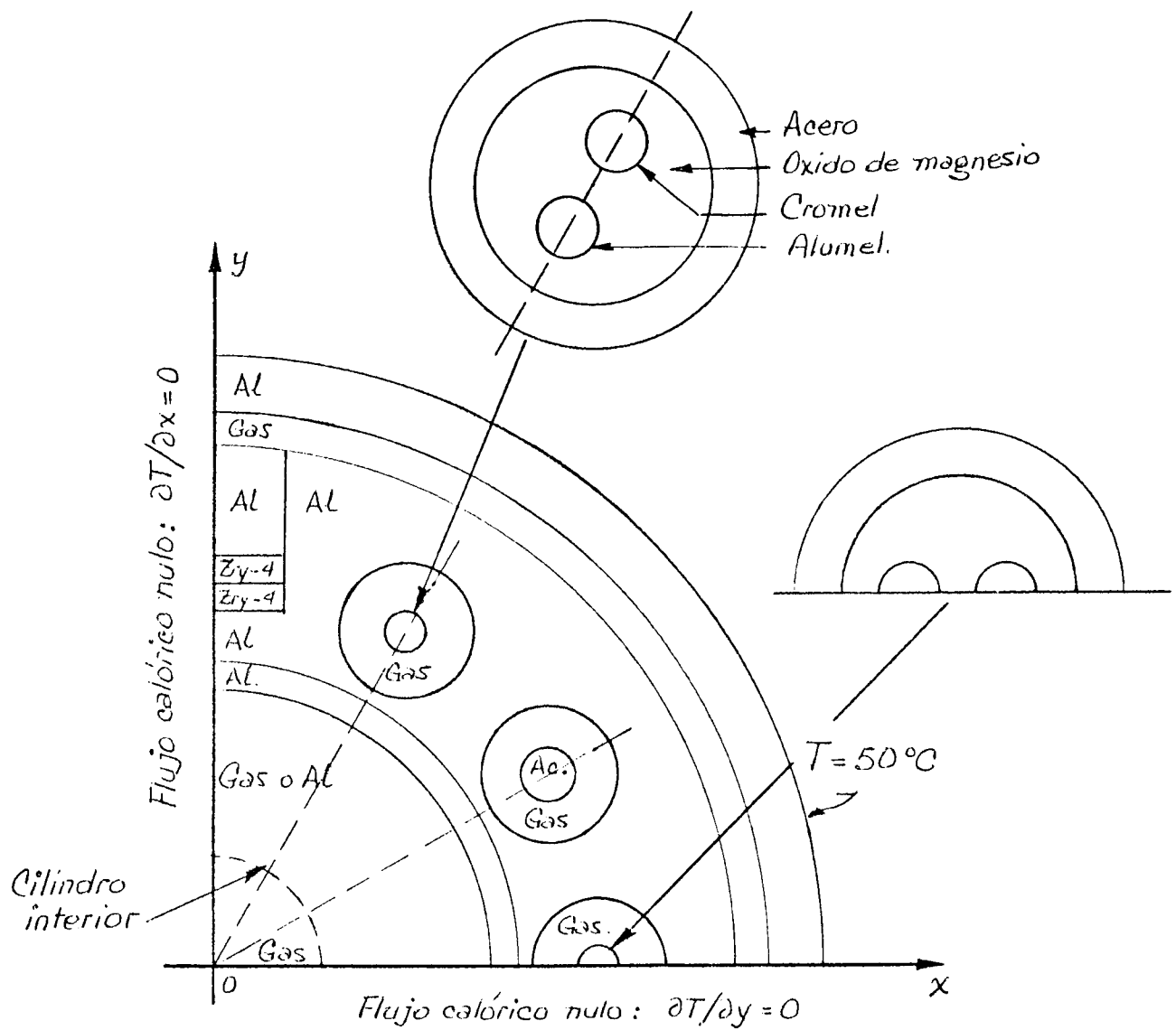
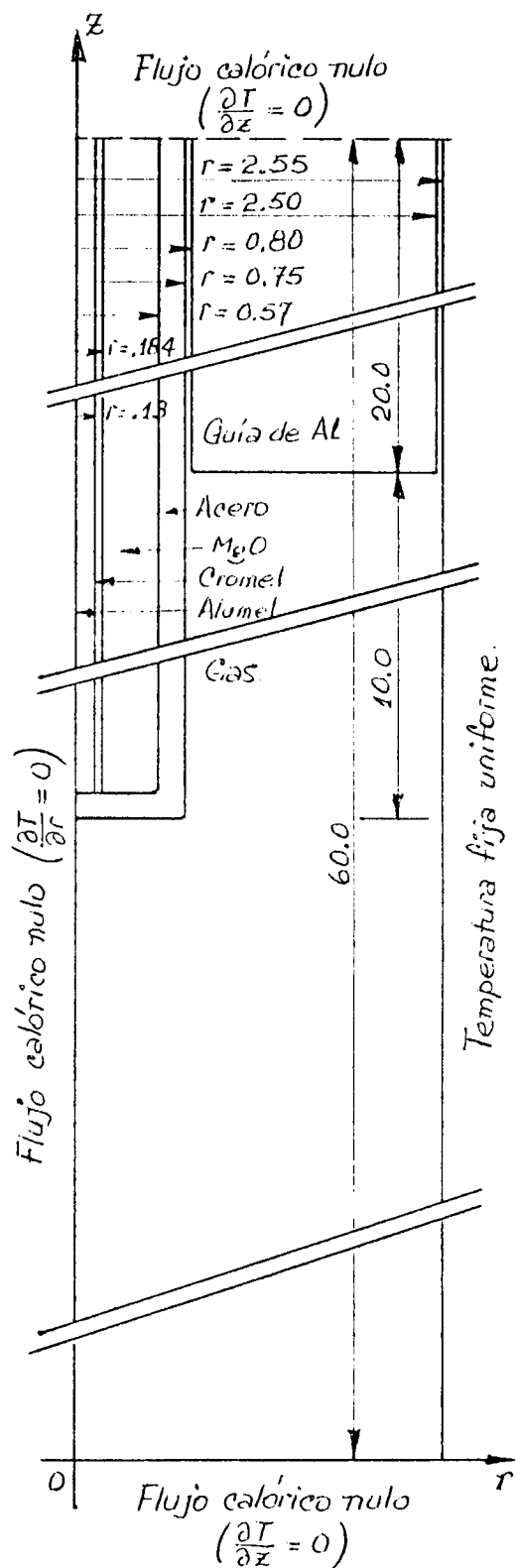
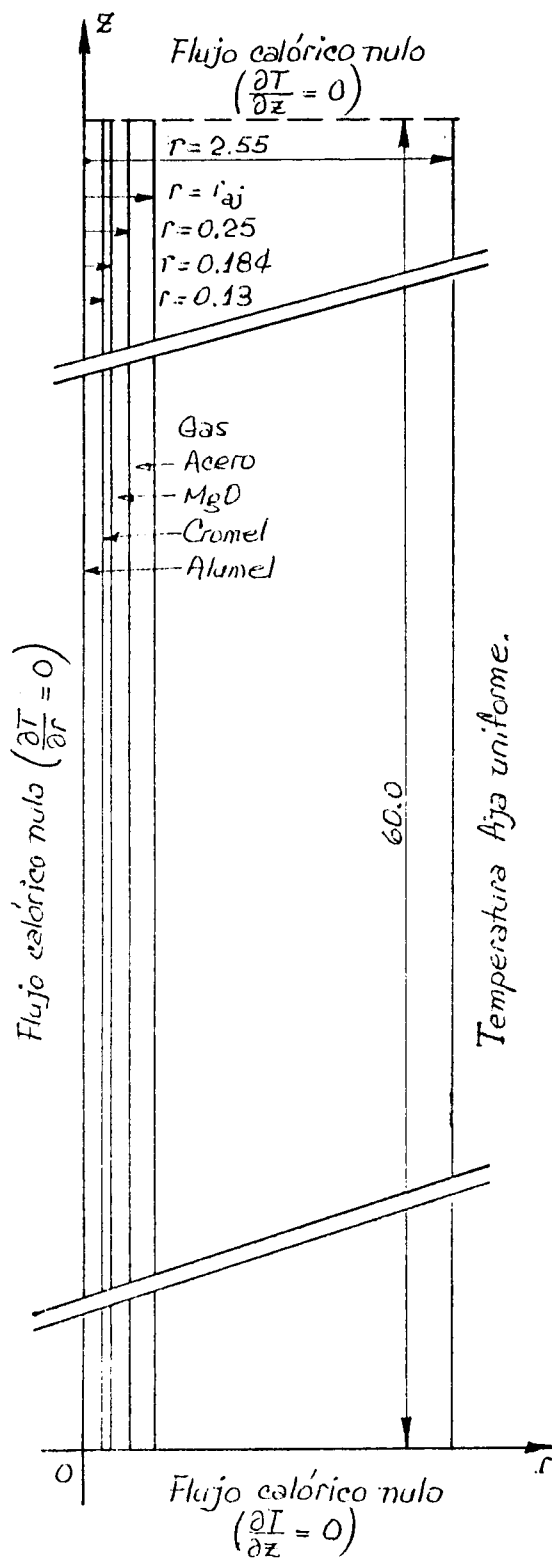


Figura 19.- Recinto de simetría plana para el cálculo de la distribución espacial de la temperatura en el dispositivo de la Figura 18.



a.



b.

Las cotas en mm.

Figura 20.- Aproximación cilíndrica para las termocupas del dispositivo de la Figura 18.-

