

OBSERVACIONES SOBRE UN MODELO ACOPLADO CONSTITUÍDO POR UNA E.D.P. PARABÓLICA SEMILINEAL Y UNA E.D.O. - LIBERACIÓN DE GAS DE FISIÓN EN LA IRRADIACIÓN DEL UO_2 .

Edgardo A. Moyano, Alberto F. Scarpettini
Centro Atómico Constituyentes - Comisión Nacional de Energía Atómica
Av. Gral. Paz 1499, (1650) San Martín, Prov. Buenos Aires, Argentina
e-mail: emoyano@cnea.gov.ar

RESUMEN

Un sistema acoplado de ecuaciones continuas de reacción-difusión con condiciones iniciales y de borde es discretizado por el método de las diferencias finitas.

En ciertos sistemas difusivos con concentraciones interactuantes, el efecto de la difusión de una de las ecuaciones es despreciable, y el sistema acoplado se reduce a una ecuación parabólica semilineal y una ecuación ordinaria.

El método de soluciones superiores-inferiores [1] para ecuaciones continuas es extendido a las soluciones numéricas. La idea es que usando la "solución superior o inferior" como la iteración inicial, uno puede obtener una sucesión monótona que converge a la única solución del problema.

ABSTRACT

A coupled system of reaction-diffusion continuous equations with boundary and initial conditions is discretized by finite difference method.

In certain diffusion systems with interacting concentrations, the effect of the diffusion of some equation is negligible, and the coupled system is reduced to a parabolic semilinear equation and an ordinary equation.

The method of upper-lower solutions [1] for continuous equations is extended for numerical solutions. The idea is that using the "upper or lower solution" as the initial iteration, one can obtain a monotone sequence that converges to the unique solution of the problem.

El presente trabajo tiene por objeto resolver numéricamente un modelo de reacción-difusión, propuesto por White y Tucker [2,3] para describir la liberación del gas de fisión en los reactores nucleares. Emplea una forma simplificada, que considera la difusión de átomos de Xe y Kr que se generan durante la irradiación del combustible UO_2 .

El modelo asume que el UO_2 es una colección de granos esféricos. Los gases de fisión producidos en un grano son transportados al borde de grano mediante la difusión atómica. Las burbujas de gas intragranular son consideradas como un lugar donde se atrapan átomos, y su tamaño y densidad son controlados por la temperatura del combustible. Estas burbujas intragranulares se consideran inmóviles en este modelo. Cuando el grano crece,

los átomos del gas de fisión dentro del grano son arrastrados por el movimiento del borde de grano. Los átomos liberados son acumulados en las burbujas del borde de grano, y su número está limitado por su capacidad de almacenamiento debido a que estas burbujas eventualmente se tocan y pierden su gas en el volumen libre del combustible. Cuando el número de átomos de gas en el borde alcanza su saturación, cualquier átomo que llegue al borde será liberado desde el combustible [4,5].

Todo el gas generado en un tiempo t , que no está en el borde de grano, es contenido dentro de él, tanto en solución como en burbujas intragranulares. La ecuación de difusión en una esfera de radio a , teniendo en cuenta que atrapa átomos, es descripta por Speight de la siguiente forma [3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c}{\partial r} \right) - g c + b' m + \beta \\ \frac{\partial m}{\partial t} &= g c - b' m \end{aligned} \quad (1)$$

donde c es la concentración de átomos de gas en solución, D es el coeficiente difusivo de un átomo de gas, g es la probabilidad de un átomo de gas en solución de ser capturado por una burbuja, b' es la probabilidad de un átomo de gas dentro de una burbuja de ser rediseuelto, m es la cantidad de gas por unidad de volumen en las burbujas, β es la razón de producción de gas por unidad de volumen, y r es el radio de la burbuja [5]. La segunda ecuación expresa el balance para el gas atrapado.

Este modelo pertenece a la categoría de sistemas parabólicos acoplados, y está compuesto por una ecuación diferencial parcial parabólica semilineal y una ecuación ordinaria, es decir, con operador difusivo nulo.

Esta difusión en una esfera se estudia como problema parabólico de condiciones iniciales $c_0(r)$ y $m_0(r)$ y condición de borde dada por:

$$\left. \frac{\partial c}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 ; \quad c(r=a) = 0 \quad (2)$$

Adimensionalizando el sistema:

$$x = \frac{r}{a} ; \quad \tau = \frac{Dt}{a^2} \quad (3)$$

y llamando:

$$G = \frac{g a^2}{D} ; \quad B = \frac{b' a^2}{D} ; \quad \beta' = \frac{\beta a^2}{D} \quad (4)$$

resulta el sistema acoplado:

$$\begin{aligned}\frac{\partial c}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \frac{\partial c}{\partial x} - Gc + Bm + \beta' \\ \frac{\partial m}{\partial \tau} &= Gc - Bm\end{aligned}\quad (5)$$

Mediante la transformación:

$$u = \frac{xc}{c_0} ; \quad v = \frac{xm}{c_0} ; \quad \alpha = \frac{\beta'}{c_0} \quad (6)$$

con $c_0 = c + m|_{r=0, t=0}$, resulta el sistema sin término convectivo:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - Gu + Bv + \alpha x \\ \frac{\partial v}{\partial \tau} &= Gu - Bv\end{aligned}\quad (7)$$

con las condiciones de borde:

$$u(x=0) = u(x=1) = 0 \quad (8)$$

y condiciones iniciales:

$$u(\tau=0) = u_0 x(1-x^2) \quad (9.a)$$

para la ecuación parabólica; y:

$$v(\tau=0) = v_0 x(1-x^2) \quad (9.b)$$

para la ecuación ordinaria.

El modelo fue propuesto inicialmente por Speight, y existen trabajos sobre su resolución, pero en el caso en que la segunda ecuación se independice del tiempo.

En el presente trabajo se intenta experimentar numéricamente sobre el sistema acoplado, observando los resultados desde un tiempo inicial hasta lograr el estado estacionario (soluciones u y v independientes del tiempo).

La teoría de las e.d.p. de reacción-difusión muestra la gran dependencia que existe entre los conceptos de existencia, unicidad, convergencia y zonas de invariancia, con las funciones de reacción o fuentes del problema. Y dentro de esas funciones de reacción, es también notable la dependencia de esos conceptos con los valores de los parámetros que en ellas intervienen [6,7].

El modelo que se estudia tiene por incógnitas dos funciones de concentración que se nombran con u y v . De modo que este trabajo intenta resolver numéricamente un modelo de concentraciones, constituido por una ecuación diferencial parcial parabólica, que se califica como semilineal, por ser lineal en el operador calor, y poseer además una función

$f(x, u, v)$, y una ecuación diferencial ordinaria de decaimiento. Ambas ecuaciones están acopladas a través de las concentraciones.

Toda la bibliografía físico-matemática que se ha podido consultar sobre este problema, muestra que ha sido tratado como una simple ecuación diferencial parcial parabólica: se considera muy breve el tiempo que tarda v en independizarse del tiempo, anulándose la reacción.

De modo que a fin de verificar estas conclusiones y de poder hacer observaciones sobre el modelo original, en el presente trabajo se ha tratado el problema no como una única e.d.p. parabólica, sino como un par de ecuaciones con reacción y acopladas, y poder graficar la evolución de la norma infinita de los perfiles que indican la cantidad de gas en las burbujas. Se trata de resolver un problema de condiciones iniciales y de borde con ecuaciones acopladas no lineales.

Afortunadamente las funciones f_1 y f_2 son globalmente lipschitzianas y las soluciones tienen las propiedades de suavidad semejantes a las de las funciones que componen las ecuaciones [8].

Llamando L_i al operador calor, se puede imaginar que se trata de un sistema parabólico con $L_2 = 0$. La expresión transformada de la ecuación parabólica presenta solo difusión, siendo más simple el esquema de cálculo para su resolución, evitándose así un término altamente convectivo.

Es importante mencionar dos propiedades de este modelo: una es la cuasi-monotonía de las funciones de reacción según se define más adelante, y la otra es la existencia de "soluciones superior e inferior" [1].

Se dice que el sistema (f_1, f_2) es cuasi-monótono no decreciente si $\partial f_1 / \partial v \geq 0$ y $\partial f_2 / \partial u \geq 0$. Además, (\tilde{u}, \tilde{v}) es una solución superior del problema

$$\begin{aligned} u_t - D u_{xx} &= f_1(u, v) \\ v_t &= f_2(u, v) \end{aligned} \quad (10)$$

si:

$$\begin{aligned} \tilde{u}_t - D \tilde{u}_{xx} &\geq f_1(\tilde{u}, \tilde{v}) \\ \tilde{v}_t &\geq f_2(\tilde{u}, \tilde{v}) \end{aligned} \quad (11.a)$$

así como (\hat{u}, \hat{v}) es solución inferior si:

$$\begin{aligned} \hat{u}_t - D \hat{u}_{xx} &\leq f_1(\hat{u}, \hat{v}) \\ \hat{v}_t &\leq f_2(\hat{u}, \hat{v}) \end{aligned} \quad (11.b)$$

Además se deben cumplir estas desigualdades en las condiciones de borde e iniciales (B es operador de borde):

$$\begin{aligned} B \tilde{u} &\geq B u \geq B \hat{u} \\ \tilde{u}(x, 0) &\geq u_0 \geq \hat{u}(x, 0) \end{aligned} \quad (12)$$

Como se afirma al principio, la función de reacción del sistema (f_1, f_2) , es lipschitziana, ya que suponiendo $u_1 \geq u_2$ y $v_1 \geq v_2$:

$$\begin{aligned} |f_1(u_1, v_1) - f_1(u_2, v_2)| &= |-Gu_1 + Bv_1 + \alpha x - (-Gu_2 + Bv_2 + \alpha x)| \\ &= |-G(u_1 - u_2) + B(v_1 - v_2)| \\ &\leq G|u_1 - u_2| + B|v_1 - v_2| \\ &\leq K_L \{|u_1 - u_2| + |v_1 - v_2|\} \end{aligned} \quad (13.a)$$

con $K_L = \max\{G, B\}$. Del mismo modo es:

$$\begin{aligned} |f_2(u_1, v_1) - f_2(u_2, v_2)| &= |Gu_1 - Bv_1 - (Gu_2 - Bv_2)| \\ &= |G(u_1 - u_2) - B(v_1 - v_2)| \\ &\leq G|u_1 - u_2| + B|v_1 - v_2| \\ &\leq K_L \{|u_1 - u_2| + |v_1 - v_2|\} \end{aligned} \quad (13.b)$$

El carácter lipschitziano de la fuente (f_1, f_2) permite afirmar que se cumplen las dos condiciones que se nombran a continuación [1]. Existen funciones $\underline{c}_i(x, t)$ y $\bar{c}_i(x, t)$, $i = 1, 2$ tales que se cumplen las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned} f_1(u_1, v_1) - f_1(u_2, v_1) &\leq \bar{c}_1(u_1 - u_2), & u_1 \geq u_2 \\ f_2(u_1, v_1) - f_2(u_1, v_2) &\leq \bar{c}_2(v_1 - v_2), & v_1 \geq v_2 \end{aligned} \quad (14.a)$$

y

$$\begin{aligned} f_1(u_1, v_1) - f_1(u_2, v_1) &\geq -\underline{c}_1(u_1 - u_2), & u_1 \geq u_2 \\ f_2(u_1, v_1) - f_2(u_1, v_2) &\geq -\underline{c}_2(v_1 - v_2), & v_1 \geq v_2 \end{aligned} \quad (14.b)$$

en la zona delimitada por (\bar{u}, \bar{v}) y (\hat{u}, \hat{v}) . Las condiciones (14.a) aseguran la existencia de solución (u, v) del sistema diferencial y las condiciones (14.b) la unicidad de la misma. La teoría de la resolución de sistemas acoplados de reacción-difusión supone que las funciones $\underline{c}_i(x, t)$ y $\bar{c}_i(x, t)$ son continuas Hölder en el dominio del plano (x, t) de interés (\bar{D}_T) , de modo tal que:

$$\begin{aligned} F_1(u, v) &= \underline{c}_1(x, t)u + f_1(u, v) \\ F_2(u, v) &= \underline{c}_2(x, t)v + f_2(u, v) \end{aligned} \quad (15)$$

resulten continuas Hölder en $\bar{D}_T \times \langle (\bar{u}, \bar{v}), (\hat{u}, \hat{v}) \rangle$ y monótonas no decrecientes (F_1 en u y F_2 en v).

Mediante esquemas en diferencias finitas implícitos, se discretizan las ecuaciones y las condiciones de borde. Discretizadas ambas ecuaciones, se suma $\underline{c}_n u_{i,j}$ a ambos miembros

de la ecuación y se elabora un proceso de forma tal de iterar, en cada nivel temporal, hasta que la norma infinita de la diferencia entre dos perfiles consecutivos sea menor que un ε prefijado.

Es así que de la expresión iterativa continua:

$$\begin{aligned} (u)_i^{(m)} - L_1 u^{(m)} + \underline{c}_1 u^{(m)} &= F_1(u^{(m-1)}, v^{(m-1)}) \\ (v)_i^{(m)} + \underline{c}_2 v^{(m)} &= F_2(u^{(m-1)}, v^{(m-1)}) \end{aligned} \quad (16)$$

se pasa a la discreta (siendo i subíndice espacial, j subíndice temporal y m subíndice de iteración):

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j+1}^{(m)} - u_{i,j}^{(m)}}{k} - \frac{u_{i-1,j+1}^{(m)} - 2u_{i,j+1}^{(m)} + u_{i+1,j+1}^{(m)}}{h^2} + \underline{c}_1 u_{i,j+1}^{(m)} &= \underline{c}_1 u_{i,j+1}^{(m-1)} + f_1(u_{i,j+1}^{(m-1)}, v_{i,j+1}^{(m-1)}) \\ \frac{v_{i,j+1}^{(m)} - v_{i,j}^{(m)}}{k} + \underline{c}_2 v_{i,j+1}^{(m)} &= \underline{c}_2 v_{i,j+1}^{(m-1)} + f_2(u_{i,j+1}^{(m-1)}, v_{i,j+1}^{(m-1)}) \end{aligned} \quad (17)$$

Lo mismo vale con \bar{c}_1 y \bar{c}_2 , para elaborar la sucesión decreciente de funciones ordenadas de grilla.

Se demuestra que los operadores que se generan en ambos casos (según se considere la función de reacción (f_1, f_2) en el tiempo actual o en el anterior) mantienen, en el continuo, la propiedad de existencia, positividad y monotonicidad.

El algoritmo genera sucesiones inferiores $\{\underline{u}_{i,j}\}$, $\{\underline{v}_{i,j}\}$ y superiores $\{\bar{u}_{i,j}\}$, $\{\bar{v}_{i,j}\}$ de funciones de grilla ordenadas y monótonas, que convergen superior e inferiormente, a la solución del sistema discretizado. Se demuestra que el sistema discretizado es numéricamente estable, que el sistema tipo Picard converge a la solución del sistema discretizado y que esta solución del sistema discretizado tiende a ser la solución del problema diferencial cuando el paso de malla tiende a cero.

Así como la teoría matemática de estos sistemas acoplados supone la existencia de lo que se ha llamado "solución superior e inferior" para cada ecuación, en forma numérica se fabrican funciones de grilla con esas características, es decir se calculan funciones que sean "soluciones superiores e inferiores de grilla" de los sistemas discretizados, reemplazando las fuentes por funciones lineales del tipo $C^{(1)}u + C^{(2)}$ por ejemplo, que "cubran" las fuentes discretizadas, es decir:

$$f_1(u_{i,j}, v_{i,j}) \leq C^{(1)} u_{i,j} + C^{(2)} \quad (18)$$

De modo que para alimentar el algoritmo iterativo con un perfil inicial superior, por ejemplo se resuelve el sistema:

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} - \frac{U_{i-1,j+1} - 2U_{i,j+1} + U_{i+1,j+1}}{h^2} = C^{(1)} U_{i,j} + C^{(2)} \quad (19.a)$$

y para obtener el perfil inferior discreto, el sistema:

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} - \frac{U_{i-1,j+1} - 2U_{i,j+1} + U_{i+1,j+1}}{h^2} + c_1 U_{i,j+1} = f_1(0, V_{i,j}) \quad (19.b)$$

La misma construcción vale para la e.d.o.

CONCLUSIONES

Las experiencias numéricas muestran que la solución del problema parabólico converge a la del elíptico cuando el tiempo tiende a infinito. Además, es sabido que el problema propuesto, con función de reacción (f_1, f_2) lipschitziana, tiene solución única.

En la figura 1 se observa la solución del problema elíptico, para el caso en que los coeficientes G y B son iguales. Las soluciones numéricas del problema parabólico convergen a esta curva.

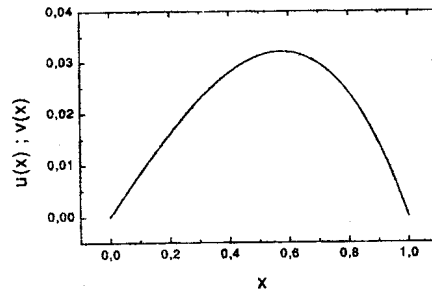


Figura 1: Solución del problema elíptico para $G = B = 1$; $\alpha = 0,5$.

En la figura 2 se observa la evolución en el tiempo, de la norma infinita de las soluciones $u(x, t)$, $v(x, t)$ del problema parabólico.

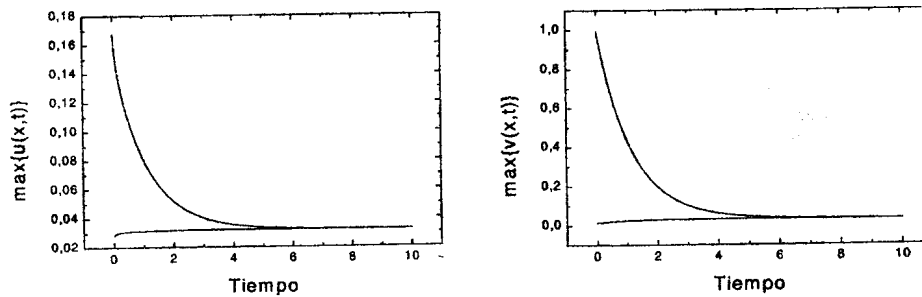


Figura 2: Evolución temporal de la norma infinita de la solución para $G = B = 1$; $\alpha = 0,5$.

REFERENCIAS

- [1] **C. V. Pao**, *Nonlinear Parabolic and Elliptic Equations*, Plenum Press, New York, 1992.
- [2] **R. J. White y M. O. Tucker**, *A New Fission-Gas Release Model*, J. Nuclear Mater. 118 (1983) 1-38.
- [3] **M. V. Speight**, *A Calculation on the Size Distribution of Intragranular Bubbles in Irradiated UO₂*, J. Nuclear Mater. 38 (1971) 236-238.
- [4] **D. R. Olander**, *Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements*, Technical Information Center, US Department of Energy, 1976.
- [5] **T. Nakajima y H. Saito**, *A Comparison between Fission Gas Release Data and FEMAXI-IV Code Calculations*, Nuclear Eng. And Design 101 (1987) 267-279.
- [6] **J. D. Logan**, *Nonlinear Partial Differential Equations*, J. Wiley, 1994.
- [7] **J. Smoller**, *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*, Springer-Verlag, 1994.
- [8] **O. A. Ladyzenskaja, V. A. Solonnikov y N. N. Ural'ceva**, *Linear and Quasi-linear Equations of Parabolic Type*, Translations of Mathematical Monographs, vol. 23, American Math. Society, 1988.