

# Modelización numérica de la movilización de partículas en gases.

Ramón A. Otón Martínez\*, Alejandro López Belchí, Francisco Vera García  
 Dpto. Ingeniería Térmica y de Fluidos. ETSII, Universidad Politécnica de Cartagena. C/ Doctor Fleming s/n.  
 30202. Cartagena, Murcia, España.  
 Tel.: +34 968 325 991, Fax: 34 968 325 999  
 E-mail: ramon.oton.martinez@gmail.com

**Resumen.** En el presente artículo se presenta una descripción de la problemática relacionada con la presencia de partículas de polvo en el proyecto internacional del reactor experimental de fusión nuclear, ITER, frente a posibles accidentes que podrían llegar a darse. Uno de estos sucesos hipotéticos consiste en la movilización y combustión de partículas por la presurización repentina del reactor. Para el análisis de este problema, como paso previo a la realización del proyecto, se describe el modelo matemático de mezclas altamente diluidas, que se ha planteado para la modelización numérica del problema y para su posterior resolución mediante diferentes esquemas de discretización.

## 1 Introducción

Frente al enorme incremento global en el consumo de energía, cada vez más, existe la necesidad de encontrar nuevas formas de producir energía limpia a gran escala. En este sentido, la fusión nuclear ofrece importantes ventajas: no emite dióxido de carbono, se considera que no contribuye en gran medida a la contaminación atmosférica, el combustible (hidrógeno) es el elemento más abundante del universo. Para lograr la viabilidad de la fusión nuclear como fuente de energía, existe un proyecto internacional de construcción de un reactor experimental termonuclear, el ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor), que estará situado en el sur de Francia. Se trata de un proyecto de gran complejidad debido, entre otros motivos, a las altas temperaturas alcanzadas en las reacciones de fusión (del orden de los 150 millones de grados), llevando a la materia al estado de plasma. La solución elegida para soportar tales condiciones es un reactor toroidal de confinamiento magnético (Tokamak).

La interacción del plasma con las paredes del reactor genera polvo, material desprendido de las superficies de la primera pared y del desviador debido a su erosión durante la operación. Se asume que existirá una cierta cantidad de polvo de berilio, tungsteno, acero y tritio que puede ser radiactivo, químicamente reactivo y tóxico.

Para garantizar la seguridad tanto en las fases de diseño como en la construcción y operación del reactor, se llevó a cabo un análisis exhaustivo de determinados acontecimientos de referencia para evaluar el potencial de exposición a las radiaciones de la población y la eficacia de la aplicación de los requisitos de seguridad en el diseño del ITER [1]. Entre las distintas condiciones que podrían desencadenar un accidente, nos centramos en aquellas que pueden provocar la movilización o la combustión de polvo de óxido de berilio y la producción de H<sub>2</sub>, como un escape en los canales de refrigeración o la ruptura de una válvula, produciendo

una pérdida del vacío existente en el interior del reactor y la movilización del polvo contenido.

Para estudiar las características de estos sucesos, resulta de gran importancia disponer de una herramienta fiable que permita analizar los problemas de movilización de polvo. Generalmente, el tipo de mezcla que se espera encontrar dentro de la cámara de vacío es polidispersa y se clasifica como mezcla altamente diluida (por lo que puede ser despreciada la interacción entre partículas). Se ha planteado un modelo físico apropiado para caracterizar este tipo de mezcla. Además, se han desarrollado diferentes esquemas numéricos para la resolución de los sistemas de ecuaciones resultantes: en el presente trabajo se exponen los esquemas del tipo AUSM+.

## 2 Sistema de Ecuaciones

El sistema de ecuaciones considerado que caracteriza la mezcla bifásica de partículas y gas es una versión simplificada del modelo de Baer-Nunziato. Consiste en un conjunto de tres ecuaciones de balance para masa, momento y energía para cada fase. El modelo estudiado en este trabajo es una versión modificada del desarrollado por Tu y Fletcher (1995). En los flujos de gases y partículas altamente diluidos asumimos que la interacción entre partículas es despreciable, por lo tanto:

- La fracción volumétrica de las partículas puede ser despreciada frente a la de gas y se asume  $\alpha_g \approx 1$ , siendo  $\alpha_g$  la fracción volumétrica de la fase gaseosa. Los efectos de la presión son despreciables en la fase sólida, de manera que la presión desaparece del sistema de ecuaciones de las partículas y ambos sistemas quedan acoplados solo por el término fuente.
- La fase sólida se considera incompresible y su sistema de ecuaciones se escribe en términos de la concentración de partículas  $\sigma = \alpha_p \rho_p$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \vec{u}_g) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \vec{u}_g) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \vec{u}_g \otimes \vec{u}_g + p\vec{I}) &= \rho_g \vec{g} - \vec{F}_{dg} \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g E_g) + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \vec{u}_g H_g) &= \rho_g \vec{u}_g \cdot \vec{g} - \vec{F}_{dg} \cdot \vec{u}_g - Q_g \\ \frac{\partial \sigma}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\sigma \vec{u}_p) &= S_{pm} \\ \frac{\partial}{\partial t} (\sigma \vec{u}_p) + \vec{\nabla} \cdot (\sigma \vec{u}_p \otimes \vec{u}_p) &= \sigma \vec{g} + \vec{F}_{dg} \\ \frac{\partial}{\partial t} (\sigma E_p) + \vec{\nabla} \cdot (\sigma \vec{u}_p E_p) &= \sigma \vec{u}_p \cdot \vec{g} + \vec{F}_{dg} \cdot \vec{u}_p + Q_g \\ \frac{\partial \rho_g k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g k \vec{u}_g) &= \vec{\nabla} \cdot (\alpha \mu_{gt} \vec{\nabla} k) + P_k - \rho_g \epsilon + S_k \\ \frac{\partial \rho_g \epsilon}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_g \epsilon \vec{u}_g) &= \vec{\nabla} \cdot (\alpha \mu_{gt} \vec{\nabla} \epsilon) + \frac{\epsilon}{k} (C_{\epsilon 1} P_k - C_{\epsilon 2} \rho_g \epsilon) + S_\epsilon \end{aligned}$$

donde  $\vec{g}$  es el vector gravedad,  $c_{pk}$  es el calor específico a volumen constante y la fase gaseosa se modela como gas perfecto,  $\rho_g = \frac{\gamma_g p}{(\gamma_g - 1) h_g}$ . Los términos a la izquierda representan los efectos de transporte. Los términos a la derecha incluyen los efectos difusivos debidos a la conducción de calor,  $Q_i$ , la viscosidad turbulenta, a la energía de disipación correspondiente, términos debidos a la transferencia de calor, masa y momento en la interfase, así como fuerzas másicas (gravedad) y fuentes externas de calor. La energía interna total de la fase  $k$  es  $E_k = e_k + |\vec{u}_p|^2/2$ . Una consecuencia directa de estas simplificaciones es que el subsistema correspondiente a las partículas es hiperbólico degenerado.

### 3 Esquema numérico

El anterior sistema de ecuaciones puede escribirse en forma vectorial como

$$U_t + \vec{\nabla} \cdot \mathcal{H}(U) = S(U)$$

Donde  $U$  es el vector de variables conservadas y

$\mathcal{H} = [F \ G \ H]$  el tensor de flujos.

$$U = \begin{bmatrix} \rho_g \\ \rho_g u_{g1} \\ \rho_g u_{g2} \\ \rho_g u_{g3} \\ \rho_g E_g \\ \rho_g k \\ \rho_g \epsilon \\ \sigma \\ \sigma u_{p1} \\ \sigma u_{p2} \\ \sigma u_{p3} \\ \sigma E_p \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho_g u_{g1} \\ \rho_g (u_{g1}^2 + p) \\ \rho_g u_{g2} u_{g1} \\ \rho_g u_{g3} u_{g1} \\ \rho_g H_g u_{g1} \\ \rho_g k u_{g1} \\ \rho_g \epsilon u_{g1} \\ \sigma u_{p1} \\ \sigma u_{p1}^2 \\ \sigma u_{p2} u_{p1} \\ \sigma u_{p3} u_{p1} \\ \sigma u_{p1} E_p \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} \rho_g u_{g2} \\ \rho_g u_{g1} u_{g2} \\ \rho_g u_{g2}^2 + p \\ \rho_g u_{g3} u_{g2} \\ \rho_g H_g u_{g2} \\ \rho_g k u_{g2} \\ \rho_g \epsilon u_{g2} \\ \sigma u_{p2} \\ \sigma u_{p1} u_{p2} \\ \sigma u_{p2}^2 \\ \sigma u_{p3} u_{p2} \\ \sigma u_{p2} E_p \end{bmatrix},$$

$$H = \begin{bmatrix} \rho_g u_{g3} \\ \rho_g u_{g1} u_{g3} \\ \rho_g u_{g2} u_{g3} \\ \rho_g u_{g3}^2 + p \\ \rho_g H_g u_{g3} \\ \rho_g k u_{g3} \\ \rho_g \epsilon u_{g3} \\ \sigma u_{p3} \\ \sigma u_{p1} u_{p3} \\ \sigma u_{p2} u_{p3} \\ \sigma u_{p3}^2 \\ \sigma u_{p3} E_p \end{bmatrix}, \quad S = \begin{bmatrix} 0 \\ \rho_g g_1 - F_{d1} \\ \rho_g g_2 - F_{d2} \\ \rho_g g_3 - F_{d3} \\ \rho_g \vec{u}_g \cdot \vec{g} - \vec{F}_d \cdot \vec{u}_p - Q \\ P_k - \rho_k k + S_k \\ \frac{\epsilon}{k} (C_{\epsilon 1} P_k - C_{\epsilon 2} \rho_g \epsilon) - R - S_\epsilon \\ S_{pm} \\ \sigma g_1 + F_{d1} + F_{lp1} + F_{wp1} \\ \sigma g_2 + F_{d2} + F_{lp2} + F_{wp2} \\ \sigma g_3 + F_{d3} + F_{lp3} + F_{wp3} \\ \sigma \vec{u}_p \cdot \vec{g} + \vec{F}_d \cdot \vec{u}_p + Q \end{bmatrix}$$

En este caso,  $S$  es el término fuente que engloba los efectos de la gravedad, la fricción interfacial y transmisión de calor.

Si se integra la parte homogénea del sistema obtenemos:

$$\frac{d}{dt} \iiint_{\Omega} U d\Omega + \iint_A \mathcal{H} \cdot \hat{n} dA = 0$$

donde  $A$  es la frontera de  $\Omega$  y  $\hat{n}$  es el vector normal a la superficie  $A$ . Tomando la primera integral como el ritmo de cambio de la media de las variables conservadas en cada volumen de control y considerando la frontera  $A$  formada por  $N$  superficies de tal modo que  $A = \bigcup_{s=1}^N A_s$ , la ecuación anterior puede ser escrita como

$$\frac{dU}{dt} + \frac{1}{|\Omega|} \sum_{s=1}^N \iint_{A_s} \mathcal{H} \cdot \hat{n} dA = 0$$

Discretizando la derivada temporal y aproximando las integrales de superficie del flujo por

$$\iint_{A_s} \mathcal{H} \cdot \hat{n} dA = T_s^{-1} F(T_s U) A_s$$

se obtiene un esquema de volúmenes finitos para múltiples dimensiones en mallas no estructuradas:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{\Delta t}{|\Omega|} \sum_{s=1}^N T_s^{-1} F(T_s U) A_s$$

### 3.1 Fase gaseosa

Pueden usarse diferentes esquemas numéricos para obtener los vectores de flujo numérico. Miura y Glass (1982) proponen el uso de métodos de elección aleatoria y asumir una distribución lineal en las condiciones iniciales para evitar múltiples soluciones. Otros usan métodos de tipo Godunov, como Klemens et ál. (2001). Por otro lado, los esquemas de tipo AUSM dan buen resultado al resolver las ecuaciones de Euler, por lo que suelen ser usados para la fase gaseosa, así como los de Roe y Van Leer-Hanel.

**3.1.1 Esquema AUSM+:** Al haber eliminado  $\alpha$  de las ecuaciones, el vector de flujos corresponde al flujo de Euler. Además, existe una interesante aproximación reformulada por Niu (2001) para superar ciertos problemas en partículas con bajas velocidades.

**3.1.2 Esquema de Roe [5]:** El flujo numérico se define como:

$$\hat{F}_{j+1/2} = \frac{1}{2} [F_j^n + F_{j+1}^n - |J_{j+1/2}| (U_{j+1}^n - U_j^n)]$$

siendo  $J$  la matriz jacobiana de  $F(U)$ .

### 3.2 Fase sólida

Dado el carácter hiperbólico degenerado de este subsistema de ecuaciones, se proponen dos opciones:

**3.2.1 Esquema de Rusanov:** El flujo numérico se calcula usando la siguiente expresión:

$$F_{i+1/2} = \frac{1}{2} [(F_L + F_R) - S^+(U_R - U_L)]$$

donde la velocidad  $S^+ = \max\{|u_{pL}|, |u_{pR}|\}$ .

**3.2.2 Esquema AUSM:** Como no hay término de presión, el flujo numérico es puramente convectivo, y se define a partir de la velocidad numérica de la partícula en la interfase

$$F_{j+1/2} = \dot{u}_{p1/2} \begin{cases} \psi_L & \text{si } \dot{m}_{p1/2} \geq 0, \\ \psi_R & \text{si } \dot{m}_{p1/2} < 0, \end{cases} \quad \psi = \begin{bmatrix} \sigma \\ \sigma u_{pn} \\ \sigma u_{pt1} \\ \sigma u_{pt2} \\ \sigma E_p \end{bmatrix}$$

donde  $\dot{u}_{p1/2} = \frac{1}{2(u_{pl}^+ + u_{pr}^-)}$  y  $u_p^\pm = 1/2(u_p^\pm + u_p^\pm)$ .

## 4 Resultados numéricos

### 4.1 Movilización debida a ondas de rarefacción

La mayoría de los problemas estudiados son 1D, pues permiten comprobar el comportamiento de los esquemas en presencia de discontinuidades o fuertes gradientes. El test que se presenta fue estudiado experimentalmente por Medvedev (1993). Simula la dispersión de una capa de polvo por la acción de una onda de rarefacción en un tubo de choque de 2m (Figura 1).

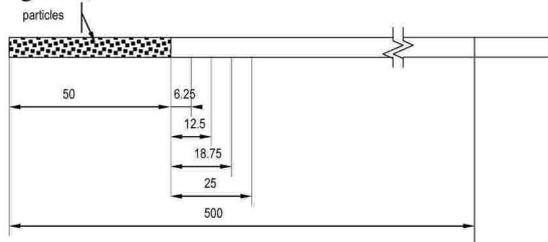


Figura 1 Geometría del test Medvedev. Unidades mm.

En la parte de alta presión (donde se sitúa el polvo) la presión es de 2bar y 1bar en el resto. En ambas partes  $T=25^\circ\text{C}$  y  $\rho_p=1300\text{kg/m}^3$ . El diámetro de las partículas es  $d_p=10^{-5}\text{m}$ .

Los resultados obtenidos usando el esquema AUSM se muestran (Figura 2) la distribución de la concentración de partículas en los instantes  $t=0,2,4,6,8$  y 10ms. Coinciden bastante bien con los resultados publicados por Klemens (2002).

### 4.1 Movilización en una sección 2D del ITER

Se ha realizado un estudio preliminar de una sección simplificada del ITER en 2D [4]. Se ha supuesto que la capa de polvo está depositada en la parte inferior de la superficie interior. Tras una brecha en el puerto ecuatorial el polvo es movilizado por la onda de choque que se produce. Los parámetros ambientales son  $p_0=10^5\text{Pa}$ ,  $T_0=298\text{K}$ ; para las partículas  $\rho_p=2267\text{kg/m}^3$ ,  $c_m=8.53\text{J}/(\text{molK})$ ,  $d_p=0.042 \cdot 10^{-6}\text{m}$ . La presión inicial en la cámara de vacío es  $p=5\text{Pa}$ .

Las simulaciones se han realizado mediante el código de elementos finitos CAST3M, del CEA (Commissariat à l'Énergie Atomique). La evolución de la concentración de partículas se muestra en la Figura 3.

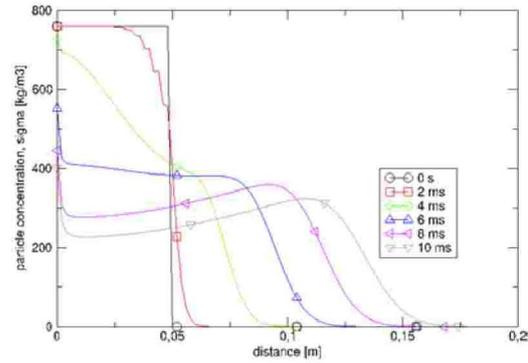


Figura 2 Distribución de la concentración de polvo en diferentes instantes en el tubo de choque (1D).

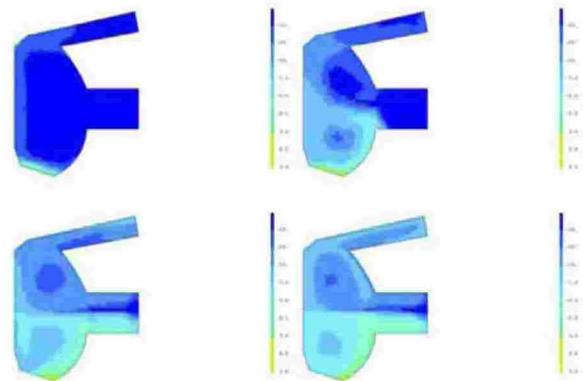


Figura 3 Concentración de partículas de polvo movilizadas.

## 5 Conclusiones

En el presente trabajo se ha descrito un modelo físico para mezclas de gases y partículas altamente diluidas, con el objeto de simular un episodio de presurización de la cámara de vacío del ITER. Además, se han presentado varios esquemas numéricos para la resolución del modelo. El código desarrollado se ha validado mediante un test en 1D, obteniendo buenos resultados. Asimismo, se ha realizado un estudio preliminar en 2D del caso del ITER.

## Referencias

- [1] ITER Technical basis. Plant description document. Ch. 5, Safety.
- [2] MEDVEDEV SP, GENG JH. Shock tube study of dust layer dispersion by rarefaction waves. *Fifth International Colloquium on Dust Explosions*, Pultusk, 1993.
- [3] KLEMENS R, KOSINSKI P. Mathematical modelling of dust layer dispersion due to rarefaction waves. *Archivum Combustionis* 22, 2002.
- [4] GARCÍA-CASCALES J.R., MULAS-PÉREZ J, PAILLÈRE H. Extension of some numerical schemes for the analysis of gas and particle mixtures. *Int. J. for Numerical Meth. in Fluids* 2008; 56:845-875.
- [5] TORO EF, Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. Springer, 1997.