

P R E S E N T A C I O N

Durante el segundo semestre de 1993, han tenido lugar la primera Asamblea General de SEMA y la primera Reunión de su Comité Ejecutivo, iniciándose así el normal funcionamiento de los órganos de gobierno de nuestra Sociedad. En el presente Boletín se ofrecen resúmenes informativos sobre ambas.

Una vez más hemos de expresar nuestra gratitud al Profesor J.L.Lions del Collège de France por su decisiva contribución al nivel científico de nuestro Boletín, en este caso, con la magnífica aportación que abre las páginas del mismo.

Fieles a la directriz que nos hemos marcado de recabar la colaboración de organismos extra-universitarios o de empresas que utilicen de modo habitual, técnicas de modelado, de simulación numérica y, en general, métodos de la Matemática Aplicada, incluimos en el presente número, una interesante contribución de L.M.Díaz de INESPAL METAL S.A. que, asimismo, agradecemos.

El Boletín contiene una información del Prof.J.I.Díaz sobre un programa de la European Science Foundation relativo al "Tratamiento matemático de problemas de frontera libre" y una nota sobre ECCOMAS, además de la sección -iniciada en el Boletín anterior- sobre Congresos y reuniones de próxima celebración, relacionados con nuestro ámbito de interés científico.

Por primera vez, aparecen también en el Boletín, varios resúmenes de tesis doctorales leídas por miembros de SEMA, durante el semestre que el presente número abarca. Animamos a quienes estén en las mismas condiciones a continuar este precedente y a todos los miembros de SEMA, a enviarnos cuantas sugerencias o informaciones estimen de interés para su publicación en el Boletín. Pueden hacerlas llegar a cualquier miembro del Comité Ejecutivo o a la dirección electrónica habilitada al efecto, que también incluimos.

Nuestros mejores deseos para todos los miembros de SEMA en estas próximas Fiestas y en el año nuevo.

Diciembre 1993

Contrôlabilité et Programmation Dynamique pour les Systèmes distribués.

J.L. Lions

Collège de France.

1 Introduction.

Considérons un système gouverné par une équation aux dérivées partielles (un système distribué). Soit y l'état de ce système. Il est donné par une équation écrite, formellement pour l'instant, sous la forme

$$(1.1) \quad \frac{\partial y}{\partial t} + \mathcal{A}(y) = \mathcal{B}v$$

où \mathcal{A} est un opérateur différentiel (linéaire ou non) et où v est le contrôle, \mathcal{B} étant un opérateur appliquant l'espace des contrôles dans l'espace des états.

Les conditions aux limites sont implicites dans (1.1), tout cela étant précisé dans la suite.

La condition initiale étant choisie:

$$(1.2) \quad y|_{t=0} = y^0$$

le problème (1.1), (1.2) est supposé admettre une solution unique (dans une classe fonctionnelle convenable). Soit donc $y(x, t; v)$ la solution, $x \in \Omega =$ ouvert, borné ou non, de \mathbb{R}^n , $t \in (0, T)$. On désigne par $y(t; v)$ la fonction $x \rightarrow y(x, t; v)$.

Le problème de contrôlabilité est alors le suivant. On se donne y^1 dans l'espace des états. On cherche v tel que $y(T; v) = y^1$ (resp. $y(T; v)$ arbitrairement "proche" de y^1 dans une topologie convenable). Si c'est possible on dit que le système est contrôlable (resp. approximativement contrôlable).

On se place ici dans le cadre de la contrôlabilité approchée. \square

Remarque 1.1

S'il n'y a pas unicité de la solution de (1.1), (1.2) (ou si l'unicité n'est pas connue, comme dans le cas des équations de Navier Stokes en dimension d'espace 3), on peut encore définir la contrôlabilité, exacte ou approchée, en remplaçant, dans les énoncés ci-dessus, "la" solution par "une" solution. \square

Remarque 1.2

Dans le cadre de la contrôlabilité approchée, on précise le problème de la façon suivante: On considère les contrôles v tels que

$$(1.3) \quad y(T; v) \in y^1 + \beta B$$

où β est > 0 arbitrairement positif donné, $B =$ boule unité d'un espace convenable. On prendra ici $B =$ boule unité de $L^q(\Omega)$.

Alors il existe (s'il y a contrôlabilité approchée) une infinité de contrôles v donnant lieu à (1.3). On cherche alors

$$(1.4) \quad \inf. \text{ norme de } v \text{ (dans un espace convenable)}$$

pour les v tels que (1.3) ait lieu. \square

Notre objet ici est d'étudier ce problème, sur quelques exemples, à partir de la programmation dynamique.

On va obtenir ainsi les équations de Hamilton-Jacobi-Bellman (H.J.B.) qui sont des équations aux dérivées partielles en dimension infinie. L'étude présentée ici est formelle mais conduit à des E.D.P. non linéaires en dimension infinie qui peuvent très probablement être justifiées par usage des "solutions de viscosité" (cf. M.G. CRANDALL et P.L. LIONS [1] [2]) et qui, dans les cas présentés ici, conduisent à des phénomènes qui semblent assez spécifiques à la dimension infinie. \square

Remarque 1.3

L'étude de la contrôlabilité peut être basée sur la méthode HUM (cf. J.L. LIONS [1] [2] [3]), au moins pour les cas linéaires. Tout cela a donné lieu à beaucoup de développements récents, dont une synthèse reste à faire. Pour les problèmes non linéaires, un très grand nombre de problèmes demeurent ouverts, avec une foule de questions très intéressantes qui y sont attachées,

dans des problèmes industriels (par ex. contrôle de la turbulence ou de la combustion) ou dans des problèmes de type environnement (contrôle de la pollution) ou climatologiques.

On se borne ici à deux références intéressantes en cours de publication C. FABRE, J.P. PUEL, E. ZUAZUA [1] [2], J.I. DIAZ [1] [2].

Une première synthèse des méthodes numériques est en préparation, R. GLOWINSKI et J.L. LIONS [1]. □

Remarque 1.4

Les premières indications sur les formules qui suivent ont été données au Technion, Haifa, début 1992 (conférences du Prix Harvey 1991). □

2 Problème linéaire. Contrôle distribué.

On reprend (1.1) dans le cas suivant:

$$(2.1) \quad \frac{\partial y}{\partial t} + Ay = v\chi_\theta \text{ dans } \Omega \times (0, T)$$

où A est un opérateur elliptique du 2^{ème} ordre, à coefficients pouvant dépendre de x et de t mais réguliers. Dans (2.1) χ_θ = fonction caractéristique d'un ouvert $\theta \subset \Omega$. Le contrôle v est "distribué" dans $\theta \times (0, T)$; on supposera que

$$(2.2) \quad v \in L^2(\theta \times (0, T)).$$

La condition aux limites est, pour fixer les idées

$$(2.3) \quad y = 0 \text{ sur } \Gamma \times (0, T), \Gamma = \partial\Omega.$$

La condition initiale est

$$(2.4) \quad y(0) = y^0, y^0 \in L^2(\Omega).$$

On sait (cf. J.L. LIONS [4]) que lorsque v parcourt $L^2(\theta \times (0, T))$, $y(T; v)$ parcourt un ensemble dense dans $L^2(\Omega)$. Il y a donc contrôlabilité approchée et l'on cherche alors

$$(2.5) \quad \inf \frac{1}{2} \iint_{\theta \times (0, T)} v^2 dx dt, \quad y(T) \in y^1 + \beta B,$$

où β est donné > 0 arbitrairement petit et où B est la boule unité de $L^2(\Omega)$.

□

On introduit maintenant la programmation dynamique.

On introduit le système analogue à (2.1) mais dans $\Omega \times (s, T)$, où $0 < s < T$. Donc

$$(2.6) \quad \begin{cases} \frac{\partial y}{\partial t} + Ay = v\chi_\theta \text{ dans } \Omega \times (s, T), \\ y(s) = f, f \in L^2(\Omega), y = 0 \text{ sur } \Gamma \times (s, T). \end{cases}$$

Il y a toujours contrôlabilité approchée, et donc

$$(2.7) \quad \inf \frac{1}{2} \iint_{\theta \times (s, T)} v^2 dx dt, y(T) \in y^1 + \beta B \text{ (} y \text{ solution de (2.6))}$$

admet une solution finie. On pose:

$$(2.8) \quad \Phi(f, s) = \inf \frac{1}{2} \iint_{\theta \times (s, T)} v^2 dx dt$$

la borne inférieure étant prise dans les conditions de (2.7).

On va maintenant obtenir l'équation H.J.B. satisfaite par $\Phi(f, s)$. □

Pendant l'intervalle $(s, s + \varepsilon)$ on prend

$$v(x, t) = w(x) \text{ indépendant de } t.$$

Si l'on part de $y(s) = f$, on arrive à l'instant $s + \varepsilon$ à un état "voisin" de

$$y(s) + \varepsilon \frac{\partial y}{\partial t} \Big|_{t=s} = f + \varepsilon w\chi_\theta - \varepsilon Af$$

en supposant f régulier ($f \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ avec les notations des espaces de SOBOLEV).

Le "principe d'Optimalité" donne alors

$$(2.9) \quad \Phi(f, s) = \inf_{w \in L^2(\theta)} \left[\frac{\varepsilon}{2} \int_\theta w^2 dx + \Phi(f + \varepsilon w\chi_\theta - \varepsilon Af, s + \varepsilon) \right] +$$

+ termes d'ordres supérieurs en ε (formellement).

Développant en série de Taylor dans (2.9) et faisant $\varepsilon \rightarrow 0$, on obtient

$$(2.10) \quad \frac{\partial \Phi}{\partial s} - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial f}, Af \right) + \inf_w \left[\frac{1}{2} \int_\theta \omega^2 dx + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial f}, \omega\chi_\theta \right) \right] = 0.$$

Dans (2.10) on pose

$$\left(\frac{\partial\Phi}{\partial f}, g\right) = \frac{d}{d\lambda}\Phi(f + \lambda g, s) |_{\lambda=0}.$$

Explicitement (2.10) donne

$$(2.11) \quad \frac{\partial\Phi}{\partial s} - \left(\frac{\partial\Phi}{\partial f}, Af\right) - \frac{1}{2} \int_{\theta} \left(\frac{\partial\Phi}{\partial f}\right)^2 dx = 0$$

le w optimum étant donné par

$$(2.12) \quad \omega = -\frac{1}{2} \frac{\partial\Phi}{\partial f} \chi_{\theta}, \text{ à l'instant } s.$$

La fonction Φ est définie dans $L^2(\Omega) \times (0, T)$, la condition "finale" étant donnée, i.e.

$\Phi(f, T)$ est donné.

Il faut préciser cela, qui est intéressant. On peut, dans un intervalle de temps arbitrairement court, amener $y(s) = f$ dans la boule $y^1 + \beta B$, i.e. avec s arbitrairement proche de T . Cela veut dire que

$$(2.13) \quad \Phi(f, s) < \infty \quad \forall f \in L^2(\Omega) \text{ et pour tout } s < T.$$

C'est différent si $s = T$, puisque alors ou bien f est déjà dans la boule $y^1 + \beta B$ ou bien, s'il n'y est pas, c'est impossible de l'y amener !! Cela veut dire (on peut facilement justifier ce point) que

$$(2.14) \quad \Phi(f, T) = \begin{cases} 0 & \text{si } f \in y^1 + \beta B \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

On conjecture que l'équation (2.11) avec la condition finale (2.14) (on intègre l'équation dans le sens rétrograde) admet une solution unique. \square

Remarque 2.1

La solution v optimale (solution de (2.5)) est donnée à l'instant s par (2.12).

\square

Remarque 2.2

Les conditions aux limites où la fonction inconnue prend la valeur $+\infty$ ne sont pas nouvelles. \square

Remarque 2.3

“Solution” pour (2.11) (2.14) est entendu au sens des solutions de viscosité de M. CRANDALL et P.L. LIONS [1], P.L. LIONS [1] [2]

Remarque 2.4

La résolution approchée de (2.11) (2.14), au sens de l'approximation numérique est une question ouverte. Nous espérons que des contributions ultérieures éclaireront cette question. \square

Remarque 2.5

On insiste sur le fait que ce qui précède est formel.

Pour d'autres situations on pourra consulter P. CANNARSA et G. DA PRATO [1], P.L. LIONS []. \square

3 Problème linéaire. Contrôle ponctuel.

On considère maintenant la situation analogue à la précédente mais où θ se réduit à un point, contrôle ponctuel, l'un des premiers travaux dans cette direction étant A. VALLE [1]. L'équation d'état est maintenant

$$(3.1) \quad \frac{\partial y}{\partial t} + Ay = v(t)\delta(x - b) \text{ dans } \Omega \times (0, T)$$

où b est donné dans Ω , avec

$$(3.2) \quad y = 0 \text{ sur } \Gamma \times (0, T)$$

et

$$(3.3) \quad y(x, 0) = y^0(x).$$

Dans (3.1) $v \in L^2(0, T)$. Il y a ici une petite variante technique. Si l'on suppose que la dimension d'espace est ≤ 3 (ce qui est le cas des applications) alors la solution $y(x, t; v)$ de (3.1)(3.2)(3.3) n'est pas continue de $[0, T] \rightarrow$

$L^2(\Omega)$, mais elle l'est de $[0, T] \rightarrow H^{-1}(\Omega)$ (espace dual de $H_0^1(\Omega)$). On cherchera donc v tel que

$$(3.4) \quad y(T; v) \in y^1 + \beta B_{-1}$$

où y^1 est donné dans $H^{-1}(\Omega)$ et où B_{-1} est la boule unité de $H^{-1}(\Omega)$. \square

Mais la densité de l'espace affine parcouru par $y(T; v)$ dans $H^{-1}(\Omega)$ dépend de la position de b dans Ω . Soit en effet $g \in H_0^1(\Omega)$ tel que

$$(3.5) \quad (y(T; v), g) = 0 \quad \forall v \in L^2(0, T)$$

(en faisant ici $y^0 = 0$).

On introduit ψ solution de

$$(3.6) \quad -\frac{\partial \psi}{\partial t} + A^* \psi = 0, \quad \psi(T) = g, \quad \psi = 0 \text{ sur } \Gamma \times (0, T),$$

où A^* est l'adjoint de A . Alors (3.5) equivaut à

$$(3.7) \quad \psi(b, t) = 0, \quad t \in (0, T).$$

(Notons que (3.7) a un sens. En effet si $g \in H_0^1(\Omega)$ alors, les coefficients de A étant assez réguliers, $\psi \in L^2(0, T; H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega))$, et $H^2(\Omega) \subset C^0(\bar{\Omega}) =$ fonctions continues dans $\bar{\Omega}$ lorsque $n \leq 3$).

Mais (3.7) entraîne en général, mais pas toujours, que $\psi \equiv 0$.

On dira que " b est stratégique" si (3.6) (3.7) entraînent $\psi \equiv 0$.

Example.

Si $A = A^*$ à coefficients indépendants de t et si Ω est borné, on introduit les fonctions propres

$$Aw_j = \lambda_j w_j, \quad w_j = 0 \text{ sur } \Gamma.$$

Alors b est stratégique si $w_j(b) \neq 0 \quad \forall j$. Il existe "beaucoup" de points stratégiques puisque les fonctions w_j sont -au moins si les coefficients sont analytiques- des fonctions analytiques réelles. \square

Si donc l'on suppose b stratégique, on introduit

$$(3.8) \quad \Phi(y^0, 0) = \inf \frac{1}{2} \int_0^T v^2 dt, \quad y(T; v) \in y^1 + \beta B_{-1}$$

et par analogie avec le $N^{\circ}2$,

$$(3.9) \quad \Phi(f, s) = \inf \frac{1}{2} \int_s^T v^2 dt, \quad y(T; v) \in y^1 + \beta B_{-1}$$

où dans (3.9) y est la solution de

$$(3.10) \quad \frac{\partial y}{\partial t} + Ay = v(t)\delta(x - b), \quad y(s) = f, \quad y = 0 \text{ sur } \Gamma \times (s, T).$$

Remarque 3.1

Si b est stratégique, la contrôlabilité approchée est vraie dans un intervalle de temps $(0, T)$ arbitrairement petit. Donc

$$(3.11) \quad \begin{cases} \text{si } b \text{ est stratégique, } \Phi(f, s) < \infty \quad \forall f \in L^2(\Omega) \text{ et} \\ \forall s < T \text{ (on peut d'ailleurs prendre } f \in H^{-1}(\Omega)). \end{cases}$$

Le résultat (3.11) n'est pas vrai si b n'est pas stratégique. \square

Équations de H.J.B.

Le même raisonnement qu'au N°2 conduit, formellement, à l'équation

$$(3.12) \quad \frac{\partial \Phi}{\partial s} - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial f}, Af\right) + \inf_{w \in \mathbb{R}} \left[\frac{1}{2}w^2 + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial f}, \delta(x - b)\right)w \right] = 0$$

soit encore

$$(3.13) \quad \frac{\partial \Phi}{\partial s} - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial f}, Af\right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial f}, \delta(x - b)\right)^2 = 0.$$

On ajoute la condition finale, analogue à (2.14)

$$(3.14) \quad \Phi(T, f) = \begin{cases} 0 & \text{si } f \in y^1 + \beta B_{-1}, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Remarque 3.2

La Remarque 3.1 montre que la structure de la solution (de viscosité) de (3.13) (3.14) est (très probablement !) très sensible aux variations de b - par ex. si $\Omega \subset \mathbb{R}$, au fait que b soit rationnel ou non.

Ce phénomène semble indiquer ici une propriété spécifique aux EDP en dimension infinie. \square

4 Problème non linéaire. Contrôle distribué.

On considère maintenant l'équation d'état

$$(4.1) \quad \begin{cases} \frac{\partial y}{\partial t} + Ay + \alpha y^3 = v\chi_\theta, \\ y(x, 0) = y^0(x), y^0 \in L^2(\Omega), y = 0 \text{ sur } \Gamma \times (0, T) \end{cases}$$

où α est ≥ 0 .

Si $\alpha = 0$ c'est la situation du N^o1 . Si $\alpha > 0$, la situation de la contrôlabilité change complètement: il n'y a plus contrôlabilité approchée. On peut en effet trouver des estimations a priori satisfaites par $y(T; v)$ qui sont indépendantes de v . cf. les travaux de A. BAMBERGER et J. HENRY [1], les résultats ayant été approfondis et étendus dans J.I. DIAZ [1].

Par conséquent,

$$(4.2) \quad \begin{cases} \inf_v \frac{1}{2} \iint_{\theta \times (0, T)} v^2 dx dt, \\ y(T) \in y^1 + \beta B \end{cases}$$

peut, selon f , être fini ou non. \square

Si l'on introduit alors y solution de

$$(4.3) \quad \begin{cases} \frac{\partial y}{\partial t} + Ay + \alpha y^3 = v\chi_\theta, \\ y(s) = f, y = 0 \text{ sur } \Gamma \times (s, T) \end{cases}$$

on définit

$$(4.4) \quad \begin{cases} \Phi_\alpha(f, s) = \inf_v \frac{1}{2} \iint_{\theta \times (s, T)} v^2 dx dt, \\ y(T) \in y^1 + \beta B, y \text{ solution de (4.3)}. \end{cases}$$

Pour $\alpha = 0$ cette fonction est toujours à valeurs finies (cf N^o2). Pour $\alpha > 0$, $\Phi_\alpha(f, s)$ est fini ou non selon les régions où se trouve f . \square

L'équation H.J.B. pour Φ_α s'obtient (formellement) comme précédemment. On trouve

$$(4.5) \quad \frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial s} - \left(\frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial f}, Af \right) - \alpha \left(\frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial f}, f^3 \right) - \frac{1}{2} \int_\theta \left(\frac{\partial \Phi_\alpha}{\partial f} \right)^2 dx = 0$$

avec

$$(4.6) \quad \Phi_\alpha(f, T) = \begin{cases} 0 & \text{si } f \in y^1 + \beta B \\ +\infty & \text{sinon. } \square \end{cases}$$

De manière tout à fait formelle, on aura un schéma comme indiqué sur la Figure ci-dessous

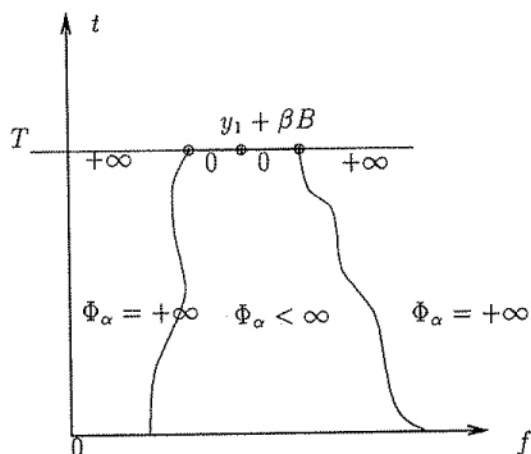


Figure 1:

Bibliographie

P. CANNARSA et G. DA PRATO

- [1] On a functional analysis approach to Parabolic equations in infinite dimensions. Scuola Nom Sup. Pisa, N° 139, Sep. 1992.

M.C. CRANDALL et P.L. LIONS

- [1] Hamilton-Jacobi equations in infinite dimensions. Parts (IV),..., (VIII). Series in J. of Funct. Analysis. 1990-1993

J.I. DIAZ

- [1] Mathematical treatment of some simple climate models. Apparaître comme Appendice du livre *La Planete Terre*, par J.L. Lions. Paris 1994.

- [2] On the controllability of some simple climate models. To appear in Environment, Economics and their mathematical models. J.I. Díaz and J.L. Lions eds. Masson 1994.

C. FABRE, J.P. PUEL, E. ZUAZUA

- [1] *Contrôlabilité approchée dans l'équation de la chaleur semilinéaire*. C.R.A.S. Paris serie I, 1992, 807-812.
- [2] *Approximate controllability of the semilinear heat equations*. 1992. IMA preprint series (Minnesota).

R. GLOWINSKI and J.L. LIONS

- [1] Numerical Methods for Controllability of Distributed Systems. Acta Numerica. To appear. 1994.

J. HENRY

- [1] Etude de la contrôlabilité de certaines équations paraboliques non linéaires. Thèse. Univ. Paris VI, 1978.

J.L. LIONS

- [1] Exact Controllability, Stabilization and Perturbations for Distributed Systems. J. Von Neumann lecture 1986, SIAM Rev., 30, p. 1-68, 1988.
- [2] Contrôlabilité Exacte Perturbations et Stabilisation de Systèmes Distribués. Tome 1. Contrôlabilité exacte. Masson, RMA 8, 1988.
- [3] id. Tome 2. Perturbations. Masson, RMA 9, 1988.
- [4] Contrôle Optimal de Systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles. Paris, Dunod, 1968.

P.L. LIONS

- [1] Generalized solutions of Hamilton-Jacobi equations. Pitman. 1982.
- [2] Viscosity solutions of fully non linear second order equations and Optimal Stochastic control in infinite dimensions. (I) Acta Math. 161 (1988), p. 243-278, (II) Lecture Notes, Springer, Vol. 1390, 1989, (III) J. Funct. Analysis 86, p. 1-18 (1989).

A. VALLE

- [1] Un problème de contrôle optimal dans certaines équations différentielles d'évolution. Ann. Sc. Ecole Nom. Sup. Pisa 20 (1966), p. 25-30.

La modelización matemática

en la producción primaria de aluminio

Introducción

L.M.Díaz, INESPAL METAL S.A., Fca. La Coruña

La competitividad del mundo del aluminio exige mejoras tecnológicas constantes, orientadas al incremento de la productividad del proceso y a la reducción de costes. En esta línea, la *modelización matemática* encuentra un amplio espectro de aplicaciones. Sin ella, las modificaciones posibles y las nuevas prácticas en la fabricación serían el resultado de una experiencia práctica considerable. Cada cambio significativo requeriría experimentación previa al establecimiento definitivo del nuevo procedimiento. En consecuencia, los tiempos y los costes del desarrollo se hacen muy elevados, empujándonos así a desechar sus beneficios potenciales.

La investigación en simulación numérica en INESPAL METAL S.A. se lleva a cabo en colaboración con el Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Santiago de Compostela, y está dirigida en dos vías bien diferenciadas: la *modelización de las cubas de electrolisis* y la *modelización del proceso de colada vertical continua*. Ambos objetivos constituyen el corazón de una factoría de producción básica de aluminio.

De las aplicaciones de la modelización a las mejoras a introducir en su posterior transformación (extrusión, laminación, trefilado o prensado) no trataremos en este artículo.

Modelización de cubas de electrolisis

La cuba de electrolisis constituye la unidad básica en la producción de aluminio. En su seno se descompone la alúmina procedente del tratamiento de la bauxita, en aluminio líquido y oxígeno, como consecuencia del paso de una corriente eléctrica a través del baño electrolítico, compuesto mayoritariamente por criolita líquida.

La cuba consta de dos partes fundamentales:

- Un ánodo, sumergido en el baño electrolítico, de carbón consumible, que reacciona con el oxígeno procedente de la descomposición de la alúmina para formar CO_2 .
- Un cátodo de diversos materiales, con dos misiones fundamentales: facilitar el paso de la corriente eléctrica a su través, y ejercer de contenedor del aluminio líquido y, sobre éste, del baño de criolita.

El aluminio está contenido un crisol de materiales carbonosos que proporcionan estanqueidad, conectados eléctricamente a barras de acero que dan salida a la corriente del cátodo. Por debajo y en la periferia de este conjunto, varias capas de materiales aislantes y refractarios se encargan de proporcionar a la cuba el balance térmico adecuado. Por último, un cajón de chapa de acero reforzado aporta contención al conjunto. En la **Figura 1** aparece representada una sección transversal de la cuba.

La vida del cátodo es limitada y su reposición es uno de los costes más elevados en la producción de aluminio. Otro aspecto fundamental es el rendimiento energético, la caída de potencial en él, no es sino una pérdida irrecuperable de energía. De la optimización de su diseño depende su longevidad y la reducción de la factura eléctrica.

Por otra parte, una serie de parámetros, como es la intensidad, el nivel de los líquidos, el contenido de aditivos, etc., son determinantes en el rendimiento y la duración de las cubas.

Ahora bien, la puesta en marcha de un nuevo diseño de cátodo o la modificación de un parámetro de marcha, exigen la realización de experimentaciones de elevado coste y lenta obtención de conclusiones, de ahí la necesidad de disponer de un modelo sobre el que simular estas variaciones.

La investigación en modelización de cubas ha sido separada en tres tareas distintas aunque profundamente relacionadas: la modelización de las condiciones térmicas y eléctricas en el seno de la cuba, la modelización magnetohidrodinámica de los movimientos de los fluidos en su interior, y la modelización de los estados tensionales en los diferentes materiales que la constituyen. Excepto por la influencia de los fenómenos convectivos en la transmisión de calor y por la deformación de las líneas de corriente en presencia de campos magnéticos, el modelo termoeléctrico puede considerarse independiente de los otros dos con una gran aproximación; y en ausencia de estos, una gran cantidad de información se obtiene del manejo de un buen modelo termoeléctrico.

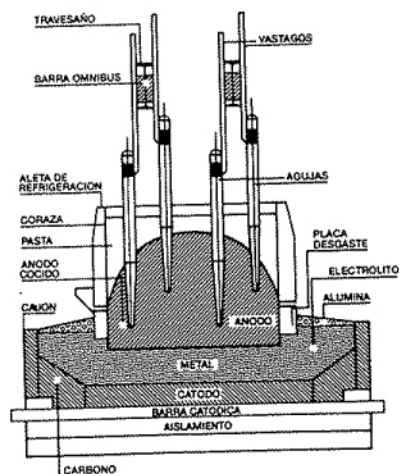
Asociados a las isotermas y equipotenciales que el modelo traza en el seno del cátodo, ocurren una serie de fenómenos termodinámicos y de reacciones químicas que, en función de su emplazamiento, pueden resultar perjudiciales o beneficiosas para la duración de la cuba.

La más característica de todas estas líneas es la de solidificación del *talud*, temperatura a la cual el baño de criolita pasa al estado sólido formando una capa protectora que se adhiere al lateral del cátodo. Por otra parte, el desarrollo de un talud correcto permite amortiguar los desplazamientos que se puedan producir alrededor del equilibrio térmico, mediante el mecanismo de solidificación-licuefacción.

Algunas otras manifestaciones que pueden deteriorar las características de los materiales o abrir vías de paso al aluminio líquido provocando la muerte de la cuba, predecibles con el modelo, son:

- La inclusión de átomos de Na procedentes del baño, que distorsionan la ordenación de la red del carbón, causando su hinchazón. Es el fenómeno conocido como *efecto Rapoport*.
- La congelación de lentes de fluoruros columnares, también procedentes del baño. Las fuerzas desarrolladas por el crecimiento de estos cristales salinos, direccionadas preferencialmente hacia arriba debido a la menor resistencia a la expansión y desplazamiento del material carbonoso en esta orientación, son la causa principal del fenómeno conocido como *subida de fondo*, cuya consecuencia inmediata es el agrietamiento y la pérdida de estanqueidad.

Figura 1



- Algunos materiales aislantes, como las diatomeas, pueden disolverse o debilitarse seriamente por el ataque del electrolito, antes de saturarse, cuando su temperatura de solidus es alcanzada en este dominio.
- En un intervalo determinado de temperaturas, la expansión de las barras de acero en contacto con los materiales carbonosos alcanza un máximo, relacionado con la transformación estructural entre el hierro α y el hierro γ . Como consecuencia, aparece un esfuerzo de fricción entre éstas y el bloque que puede llegar a relajarse mediante la aparición de fisuras, que además deterioran el contacto eléctrico. Por encima de estas temperaturas la contracción de la barra reduce la fricción.
- A partir de cierta temperatura, alrededor de los 550 °C, algunos materiales de carbón son fuertemente atacados por la oxidación en presencia del aire, pudiendo llegar a consumirse totalmente para dejar el cajón expuesto al ataque del baño.
- Cuando la temperatura del cajón excede los 400 °C, si está en contacto con materiales carbonosos, se produce la difusión del carbón en su interior, dañándolo severamente.

Con los objetivos planteados anteriormente, hemos abordado la *modelización tridimensional* para la simulación termoeléctrica de una cuba de electrolisis, que incorpora un módulo de ajuste automático del modelo al caso de cualquier cuba en funcionamiento a través de las temperaturas en su interior, las temperaturas de su cajón o los flujos de calor que lo atraviesan.

Para validar sus resultados se monitorizaron varias cubas, pinchándolas con termopares en su seno, conectados vía "datatakers" a sendos PC's, para la toma de temperaturas en continuo. Los resultados fueron excelentes, pues se establecieron diferencias entre las temperaturas calculadas por el modelo y las medidas por los termopares, del orden de la decena de grados centígrados.

Los primeros frutos ya han sido recogidos con la elaboración y revisión de nuevos diseños de cátodos que reducen las pérdidas energéticas y aumentarán previsiblemente su longevidad, aunque no se puede confirmar este aspecto a corto plazo debido a la extensa duración del ciclo vital de las cubas.

Modelización del proceso de colada vertical continua

La colada vertical continua es el proceso mediante el cual se solidifica el aluminio líquido, dándole un formato comercial. El aluminio es vertido en un molde, que puede ser físico o tratarse de un campo magnético de contención, en cuyo interior un sistema de refrigeración lo va haciendo solidificar. Al mismo tiempo, una plataforma móvil está descendiendo continuamente en un foso de colada para vaciar de forma ininterrumpida el metal que se va solidificando, dejando sitio al metal líquido que fluye. El esquema del tratamiento puede verse en la **Figura 2**.

La geometría del molde es variable y será la que nos defina el tipo y destino -laminación o extrusión- del producto.

Los parámetros fundamentales que regulan el proceso de solidificación son:

- La Geometría del molde o lingotera.
- La Velocidad de descenso del soporte.
- El Caudal de agua de refrigeración.
- La Temperatura del Metal.

Actualmente no existe ningún fundamento teórico a la hora de establecer los parámetros de colada, ya que estos se basan en experiencias y extrapolaciones de estas experiencias. Cualquier modificación en la geometría del producto o bien en su composición química, nos obliga a realizar múltiples experiencias, para encontrar unos parámetros que en la mayoría de los casos solamente son aproximados.

Este proceso de solidificación del aluminio tiene dos etapas claves:

Nucleación, o aparición de los primeros gérmenes de metal solidificado.

Crecimiento de grano, a esos núcleos se les van adhiriendo nuevas partículas de material sólido que cristalizan tomando una orientación.

Por último, esos cristales entran en contacto definiendo una frontera entre ellos.

El tamaño y la orientación de esos cristales o granos determinan la **estructura** del metal; y según sea ésta así serán sus aptitudes para el trefilado, extrusionado o laminado.

La **velocidad de enfriamiento** será el origen de la estructura obtenida. En la colada vertical este factor se rige mediante los cuatro parámetros citados anteriormente.

Esto provoca retraso entre la solidificación del centro de la huella y la solidificación de la periferia; y como consecuencia, una estructura heterogénea a modo de capas concéntricas.

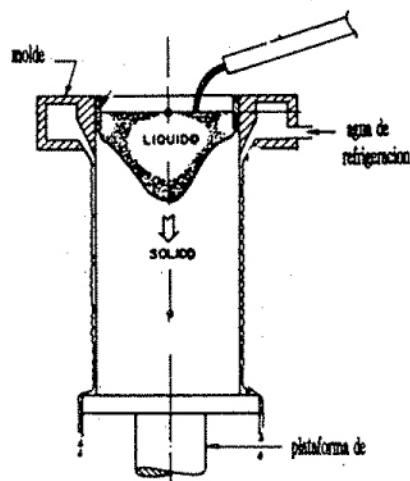
A estos fenómenos viene asociada la **segregación** o migración de los átomos de aleantes hacia las zonas más frías, debido a su inferior punto de solidificación, lo que aumenta la heterogeneidad de la estructura.

La regulación de los parámetros de la colada para homogeneizar el material es un tratamiento laborioso, lento y excepcionalmente caro pues un experimento fallido puede inutilizar la instalación de colada. La **simulación numérica** del proceso de solidificación permite aproximarse a la estructura ideal sin necesidad de experimentar.

El modelo térmico puede ser usado con buenos resultados en la predicción cualitativa de los cambios en la forma de la interfase sólido-líquido, basada en variaciones de los diversos parámetros de colada; para predecir los tamaños de grano y la macrosegregación en el producto; e incluso para predecir el fenómeno conocido como tendencia a la rotura de la línea central.

En las manos de un diseñador de maquinaria de colada, el modelo térmico también puede ser usado para determinar la profundidad óptima del molde y prevenir el recalentamiento de la capa cortical dentro del molde, que puede conducir al derrame del metal; o para diseñar la configuración óptima de la pulverización de enfriamiento; o para analizar el efecto de la inexistencia de un molde físico, como en el caso de la colada electromagnética.

Figura 2



En definitiva, la bondad de la estructura se traduce en una mejora sustancial de la calidad del producto, que incrementa su contenido de material aprovechable, y un aumento de la productividad en los procesos a los que se le va a someter posteriormente: extrusionado o laminado.

Para validar los resultados de la simulación es necesario diseñar experimentos que permitan obtener el bagaje de datos que los confirmaría, en una etapa simultánea y posterior a la formulación matemática y su programación, conocida comunmente como el *ajuste* del modelo. Comprende la monitorización de varias coladas, mediante la inserción de termopares de seguimiento de temperaturas, la adición durante las coladas de aleaciones Al-Zn para el trazado de la interfase sólido-líquido, medición de flujos de calor, análisis de propiedades de las aleaciones y materiales empleados, y comparación de resultados reales con las predicciones de la modelización. Al mismo tiempo el desarrollo de nuestro propio modelo presenta una ventaja adicional, pues la experimentación aportará nueva información y consecuentes mejoras de nuestras coladas.

Mathematical Treatment of Free Boundary Problems: Un Programa de la European Science Foundation con raíces ibéricas

Desde Enero de 1993, y por un periodo de cuatro años, la European Science Foundation patrocina un programa científico de más de 100 millones de pesetas de presupuesto global dedicado al tratamiento matemático de problemas de frontera libre. Tal programa aglutina a numerosos especialistas europeos con una importante participación española ya desde su gestación.

La European Science Foundation (ESF) es una asociación de 54 miembros constituidos por Consejos de Investigaciones, Académias e Instituciones dedicadas a la Investigación Básica de 20 países europeos. España participa por medio del Consejo Superior de Investigaciones Científicas y la Secretaria General del Plan Nacional de Investigación Científica y Desarrollo Tecnológico (que canaliza la posible participación de las universidades españolas). La ESF tiene su sede en Estrasburgo (Francia) y sufragada sus actividades científicas 'a la carta': es decir, los proyectos de actividades (Scientific Programmes, Scientific Networks, European Conferences, etc.) son valorados por cada uno de sus países miembros quienes deciden su participación o no de manera individualizada. En caso de participación, el país correspondiente aporta una cierta cantidad al presupuesto global de la actividad en función (entre otras cosas) del porcentaje del Producto Interior Bruto de ese país con respecto al de la totalidad de los países involucrados.

El tema del programa científico en cuestión se refiere al tratamiento matemático de los llamados 'Problemas de Frontera libre'. Tal tipo de problemas son de gran interés en numerosos campos de la Ciencia y se caracterizan por el hecho de que su formulación hace referencia a curvas que delimitan regiones de características muy distintas pero cuya localización es desconocida 'a priori'. Un ejemplo clásico es el problema de solidificación de un medio continuo (agua, acero, etc.). Problemas de esta naturaleza aparecen en contextos tan dispares como Biología, Reacciones Químicas, Combustión, Fusión Nuclear, Climatología, Economía, Geometría Diferencial etc.

La iniciativa de presentar un proyecto sobre el tema nació de un nutrido grupo de especialistas europeos con estrechos vínculos científicos desde fi-

nales de los setenta. El proyecto fue formalmente propuesto por Portugal (J.F.Rodrigues) y España (J.I.Díaz) en 1991 otorgándosele un primer periodo (Year Zero) lo que permitió una sistematización tanto de la memoria definitiva del proyecto, como de la relación de especialistas involucrados en la mayor parte de los países europeos. En su forma definitiva (y propuesto de nuevo por las mismas personas) el proyecto fue aprobado en Junio de 1992.

Las actividades principales del programa consisten en la celebración (y patrocinio) de numerosos 'European Free Boundary Workshops' (una media aproximada de 8 al año) así como en la cofinanciación de la serie de Congresos Internacionales 'FBP: Theory & Applications' (el último de ellos celebrado en Toledo, del 21 al 26 de Junio de 1993). La conexión científica entre los especialistas es potenciada mediante la financiación de estancias cortas (10 días) y becas para visitas de más larga duración (entre 1 mes y 1 año) para investigadores más jóvenes. También se emite un boletín 'FBP News' donde se da publicidad a las actividades realizadas en el marco del programa, se hacen públicas las convocatorias para la adjudicación de nuevas actividades, se informa de otras actividades en el campo y se exponen artículos recapitulativos sobre problemas candentes en el área.

El programa es coordinado por un Steering Committee que se reúne cuatro veces al año (dos de ellas en nuestro país en 1993). La composición de este comité en 1993 fue la siguiente: Presidente J.F.Rodrigues (Portugal); miembros H.W.Alt (Alemania), A.Damlamian (Francia), J.I.Díaz (España), C.J.van Duijn (Holanda), P.Neittaanmaki (Finlandia), M.Niezgodka (Polonia), J.Ockendon (Inglaterra), M.Primicerio (Italia) y G.Dallu (ESF). Están previstos algunos cambios entre los representantes de cada país y así en nuestro caso el representante español para 1994 será J.L.Vázquez.

Desde estas páginas animamos a los especialistas de cualquier centro español a participar y beneficiarse de las posibilidades que ofrece este programa de la ESF.

J.I. Díaz
U.C.M., Madrid.